

Un exemple d'une classe d'algorithmes quantiques : VQE (Variational Quantum Eigensolver).

- Depuis le milieu des années 2010 une nouvelle classe d'algorithmes quantiques intéresse beaucoup la communauté du calcul quantique, elle pourrait en effet permettre d'atteindre le fameux avantage quantique, avant de disposer d'ordinateurs quantiques capable de correction d'erreur. Il s'agit d'algorithmes quantiques variationnels (VQA Variational Quantum Algorithms), voyons un exemple : VQE.

Les machines, mais pas seulement.

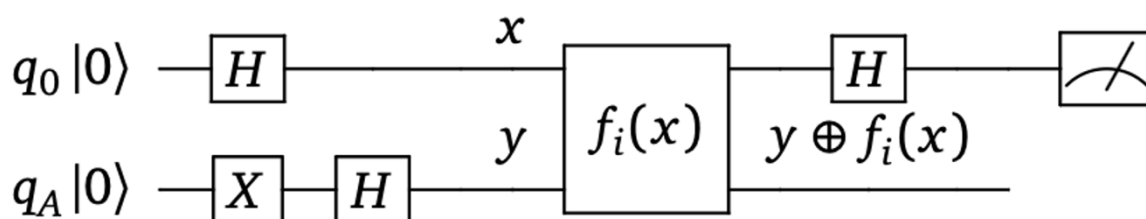
Les annonces des constructeurs d'ordinateurs quantiques se succèdent et sont de plus en plus impressionnantes. Cela révèle sans doute que le moment où l'ordinateur quantique atteindra clairement l'étape majeure de l'**avantage** quantique est très proche (c'est le moment où un ordinateur quantique sera capable de fournir un résultat de calcul utile hors d'atteinte de nos super calculateurs classiques).

Le calcul quantique présente de nombreux défis : maîtriser la physique quantique expérimentale pour mettre en œuvre des qubits de très bonne qualité, en nombre suffisant pour parvenir à exécuter des calculs permettant l'avantage quantique. Et dans ce domaine, même l'avenir promet d'importants progrès, il existe des machines qui ont déjà la possibilité en théorie de fournir cet avantage quantique (c'est une thèse discutée par John Preskill dès 2018 : Quantum Computing in the NISQ area and beyond ([arXiv](#) 1801.00862)).

Mais pour cela, il y a d'autres défis : trouver les cas de calcul les plus favorables pour démontrer cet avantage rapidement et trouver l'algorithme qui le fera.

Les résultats en algorithmie quantique ont précédé la conception des ordinateurs quantiques, et peut-être même ont-ils motivé les constructeurs de d'ordinateurs quantiques à continuer leurs efforts.

En effet les premiers concepts d'algorithmes datent des années 1980 alors même que l'avenir du calcul quantique était vraiment incertain, et qu'il n'existait aucune machine quantique, ne serait-ce qu'à un seul qubit.



L'algorithme quantique de Deutsch permet de répondre à une question simple en une fois au lieu de deux fois dans le monde classique

En 1985 David Deutsch prouve que l'on peut obtenir avec le principe d'intrication quantique en une seule étape un résultat qui nécessite toujours deux étapes dans un raisonnement classique. Il s'ensuit une série d'inventions d'algorithmes quantiques : les algorithmes de Deutsch-Josza, Bernstein-Varizani, Simon, toujours plus impressionnants dans leur ingéniosité, et dans leur avantage en termes de complexité algorithmique. Par exemple l'algorithme de Simon possède un avantage en temps exponentiel par rapport à la résolution classique du problème associé, mais ces algorithmes n'ont aucune application pratique. Dans les années 1990, toujours pas d'ordinateur quantique, mais deux algorithmes marquent l'histoire : l'algorithme de Deutsch (recherche plus efficace dans une liste non ordonnée) et celui de Shor (factorisation de nombre entier). Ces deux algorithmes présentent le gros avantage de résoudre des problèmes « utiles », mais en même temps le gros désavantage de ne pas pouvoir être exécutés de manière efficace sur les ordinateurs quantiques actuellement disponibles. Pour envisager cela il faudra disposer d'ordinateurs quantiques mettant en œuvre les techniques de correction d'erreur (qui sont beaucoup plus complexes que la détection et la correction d'erreurs de parités bien connues sur les ordinateurs classiques).

Il faut donc trouver autre chose

L'idée est d'utiliser une autre approche du calcul et si possible une approche particulièrement favorable aux qubits et à leur domaine de prédilection : l'algèbre linéaire.

C'est une approche riche de promesse, mais beaucoup plus complexe, et c'est d'ailleurs seulement une approche non classique de la résolution d'un problème qui permet au calcul quantique d'être pertinent. La raison est que l'ordinateur quantique apporte superposition et intrication, et si ces propriétés ne sont pas exploitées, il n'y a pas de raison d'espérer grand-chose du calcul quantique.

Une des possibilités est donc la famille des algorithmes quantiques variationnels : VQA, et l'instance la plus simple à décrire ici est VQE, Variational Quantum Eigensolver, en français : solveur quantique variationnel de valeurs propres.

Avant de commencer : je ne cherche pas à exposer la totalité de la construction mathématique : je me contente de présenter le raisonnement de VQE sans entrer dans les détails, sans exposer les démonstrations ni les calculs, cependant je vais devoir faire appel à des notions ou des termes que vous avez peut-être déjà oubliés.

Je m'explique sur les trois initiales de VQE :

- 1- **V** : C'est un algorithme variationnel : c'est-à-dire qu'il s'agit de faire varier un certain nombre de paramètres pour trouver le résultat recherché. La « variation » va consister à faire des itérations, pilotées par un mécanisme « classique » : tout simplement un optimiseur. Il en existe un certain nombre, et c'est un principe déjà répandu, dans le monde de l'optimisation (recherche opérationnelle) et par exemple en apprentissage automatique, lorsque l'on cherche un minimum (changement des poids inter-neuronaux, en étapes (« epoch ») jusqu'à atteindre un fonctionnement optimal (« loss fonction »). On utilisera donc une condition d'arrêt (lorsque la valeur obtenue ne varie plus « beaucoup », on arrête, considérant que le résultat est atteint. Ce mécanisme est confié à un algorithme d'optimisation classique.
- 2- **Q** : En plus d'être variationnel il est quantique : il va y avoir des itérations entre l'optimiseur classique (qui ajuste les paramètres à chaque tour, les présente au calculateur quantique, reçoit le résultat du calcul quantique et ajuste à nouveau les

paramètres « dans le bon sens » (c'est le job de l'optimiseur) pour le prochain tour. On détaille plus bas ce que l'on attend de l'ordinateur quantique.

3- **E** : Et pour finir, il trouve une valeur propre (« Eigenvalue »).

Qu'est-ce qu'une valeur propre ? C'est une notion d'algèbre linéaire, étant donné un opérateur (une matrice M), un vecteur propre u (associé à une valeur propre λ) est tel que $Mu = \lambda u$

Dès que la matrice est d'assez grande taille, plusieurs centaines ou milliers de lignes, il est très difficile (au sens de la complexité algorithmique) de trouver une valeur propre. C'est un calcul qui peut prendre un temps très long (déraisonnable par rapport aux résultats du calcul : s'il faut plus d'un jour pour agencer de manière optimale les colis dans un camion par exemple)

A quoi sert une valeur propre ? En physique, par exemple dans l'étude des molécules en chimie, on peut représenter les propriétés de la molécule dans une matrice, appelée Hamiltonien. Il se trouve que cette matrice est hermitienne (propriété mathématique qui lui confère de nombreuses propriétés parmi lesquelles celle d'avoir les valeurs propres réelles), le lien se fait ici : les valeurs propres de l'Hamiltonien (réelles, donc) correspondent (pour des raisons liées aux postulats de la mécanique quantique) aux niveaux d'énergies possibles pour l'objet en question (la molécule par exemple). En particulier VQE « promet » de trouver la valeur propre minimale, donc le niveau d'énergie fondamental de la molécule étudiée (que les chimistes me pardonnent ceci est une simplification grossière).

Et maintenant l'algorithme

On a fait le plus dur, encore un petit effort, avec un minimum de connaissances en physique quantique ou en algorithmes quantiques, ça devrait aller :

- 1- Expectation value : souvenons-nous que l'on note $|\psi\rangle$ le vecteur représentant un système quantique. (le premier postulat de la mécanique quantique nous dit qu'à un système quantique est associé un espace vectoriel E sur \mathbb{C} , dans lequel les états sont définis par les vecteurs de norme 1 de cet espace.

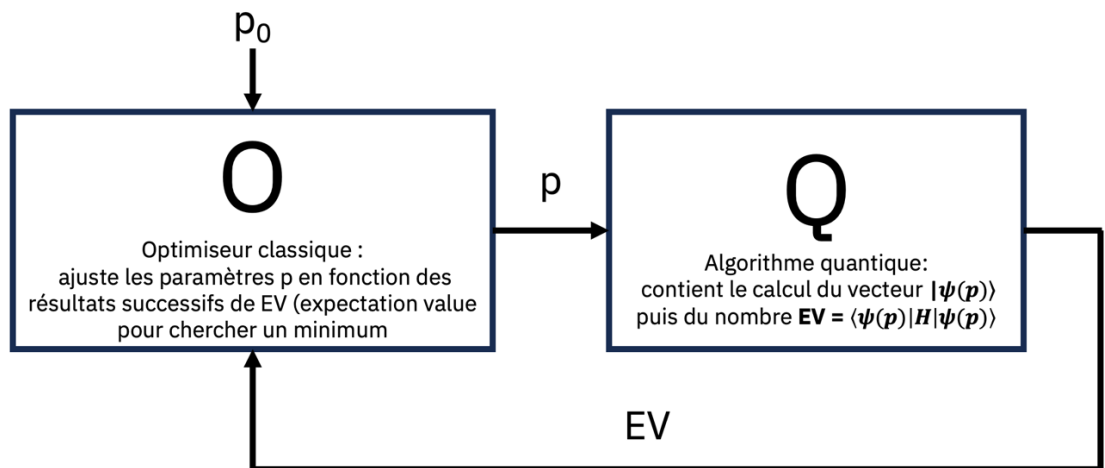
L'Hamiltonien qui représente la physique du phénomène est une matrice H .

On définit l'expectation value par cette formule : $\langle\psi|H|\psi\rangle$, on se souvient que le produit d'une matrice par un vecteur ($H|\psi\rangle = |\psi'\rangle$) est un vecteur (représentant l'état résultant de la transformée de $|\psi\rangle$ par H) et puis $\langle\psi|$ est le vecteur « dual » (transposée conjuguée de $|\psi\rangle$), et donc $\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle$ est un produit scalaire* des deux vecteurs (* produit hermitien pour les puristes), c'est donc un nombre (réel comme indiqué plus haut), il se trouve que la machine quantique sait calculer efficacement cette quantité (par exemple avec qiskit il s'agit de la fonction d'estimation)

- 2- Imaginons que p désigne un ensemble de paramètres (degrés de liberté) et que l'on utilise les paramètres p pour générer des états $|\psi(p)\rangle$, et que l'on dispose d'une méthode pour faire varier p pour parcourir « intelligemment » l'espace des états possibles du système.

- 3- Il existe de nombreuses publications qui définissent ces méthodes et la manière de les transformer en circuits quantiques pour l'ordinateur quantique auquel on fournit les paramètres p , et qui construit l'état $|\psi(p)\rangle$.
- 4- Un théorème (relativement facile à prouver) montre que cette valeur $\langle\psi(p)|H|\psi(p)\rangle$, est supérieure ou égale à la valeur propre minimale de H
- 5- Admettons (ça se démontre également) que l'on peut « facilement » construire un circuit quantique qui applique H (c'est-à-dire sans nécessiter un nombre d'opérations quantiques qui croît trop rapidement),

Le tour est joué, en regroupant ces 5 éléments, on peut représenter la démarche VQE avec ce schéma :



L'algorithme se décrit comme suit :

- 1- Choix des paramètres de départ (p_0) et de la méthode construction de $|\psi(p)\rangle$
- 2- Calcul (quantique) de $|\psi(p)\rangle$, et de l'Expectation Value
- 3- Ajustement des paramètres p par l'optimiseur classique
- 4- Répéter 2 et 3 jusqu'à satisfaire les critères de convergence (connus de l'optimiseur)
- 5- Fin : on a obtenu une valeur approchée de la valeur propre minimale.

Un tout petit exemple pour illustrer ceci pour ceux qui apprécient le calcul :

L'opérateur de Pauli Z est hermitien, ses vecteurs propres : $|0\rangle$ (valeur propre 1) et $|1\rangle$ (valeur propre -1), il s'agit justement des deux observables énergie du qubit, Z correspond à l'Hamiltonien du qubit dans ces conditions.

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

L'état d'un qubit peut s'écrire sous cette forme générale :

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} |1\rangle \text{ et donc } \langle\psi| = \cos\frac{\theta}{2} \langle 0| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \langle 1|$$

Calcul de $\langle\psi|Z|\psi\rangle$:

$$Z|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle - e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} |1\rangle$$

$$\langle\psi|Z|\psi\rangle = \left(\cos\frac{\theta}{2} \langle 0| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \langle 1|\right) \times \left(\cos\frac{\theta}{2} |0\rangle - e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} |1\rangle\right)$$

$$\langle\psi|Z|\psi\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}$$

Dans le contexte de VQE : l'angle θ est le paramètre p (paramètre unique, en général p est un ensemble de paramètres). Lorsqu'on fait varier θ entre 0 et 2π l'EV varie de 1 à -1 et on trouve ainsi la valeur propre minimale pour $\theta = \pi$, et elle vaut donc -1.

Et pour finir une remarque très importante :

Au-delà des calculs d'énergie pour les molécules en chimie, la communauté de la recherche opérationnelle a imaginé des méthodes permettant de représenter une fonction à minimiser sous la forme d'une matrice hermitienne, il ne reste plus qu'à utiliser VQE pour trouver la valeur minimale !

Convaincus ?

Avec les mots clefs **qiskit** et **VQE** sur un moteur de recherche, vous devriez arriver sur un notebook Jupyter qui explique cette démarche VQE vous permet avec quelques lignes de Python de tourner l'algorithme VQE pour deux problèmes « concrets » : un MAXCUT (coupure maximale des sommets d'un graphe) et TSP (traveller sales person) pour trouver le plus court chemin ... vers le calcul quantique.

J'espère avoir clarifié les principes de VQE et surtout de vous avoir donné l'envie d'approfondir les détails pour essayer vous-même.