

Présentation projet de recherche

Théodore CHAPUIS-CHKAIBAN

CentraleSupélec

Mars 2021

Page Rank : rappels

- **Classer les noeuds** d'un graphe par ordre d'importance
- Parcourir le graphe avec une **marche aléatoire** (chaîne de Markov) : selon le nombre de visites d'un noeud, on lui **attribue un score**
- Cela revient à **diagonaliser la matrice d'occurrences** A du graphe (si les sommets i et j sont connectés alors $A[i][j] = 1$, sinon 0)

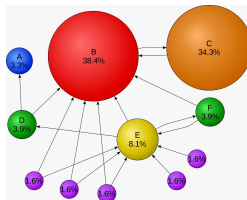


FIGURE 1 – Exemple de Graphe sur lequel fonctionne le Page Rank.

Laplacien de graphe

Définition - Equation de la chaleur

On considère un système physique représenté ici par le **graphe** (V, E) .

Soit $T : V \rightarrow \mathbb{R}^+$ la **fonction de température** sur les **noeuds du graphe** (à chaque noeud est associé une température donnée) et D une **constante de diffusion thermique**.

L'équation qui régit la **propagation de chaleur** dans le **milieu** est donnée par :

$$\delta_t T - D \Delta T = 0$$

Interprétation

Définition : Laplacien de Graphe

On définit le Laplacien L du graphe (V, E) de la manière suivante :

$$L = D - A$$

Avec D la matrice des degrés entrant du graphe et A la matrice d'adjacence du graphe.

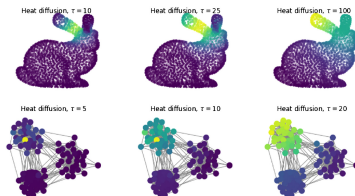


FIGURE 2 – Une diffusion de chaleur sur un graphe orienté

Laplacien normalisé de marche aléatoire.

L'intérêt principal du Laplacien de graphe se retrouve dans le Laplacien normalisé de Marche aléatoire

Définition - Laplacien normalisé de marche aléatoire.

Le laplacien normalisé de marche aléatoire de graphe (V,E) est défini par :

$$L^{rw} := D^{-1}L = I - P$$

Avec P la matrice de probabilité de transition du graphe,
Ou encore :

$$L_{i,j}^{rw} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ -\frac{1}{\text{outdeg}(i)} & \text{si } (i,j) \in E \end{cases}$$

Interprétation de valeurs propres

Théorème - Valeurs propres du laplacien de marche aléatoire

Soit x un vecteur propre de L^{rw} associé à la valeur propre ρ .

$$L^{rw}x = \rho x$$

$$Px = (1 - \rho)x$$

- La distribution de **probabilité limite de la marche aléatoire** est **reliée aux valeurs propres du Laplacien**.
- Associer une énergie aux valeurs propres du Laplacien : **quotient de Rayleigh**.
- On souhaite trouver les **valeurs propres associées aux énergies faibles / nulles : raisonnement en temps long**

Problèmes liés aux graphes dirigés

- Graphes dirigés : **La distribution de probabilité limite n'est pas nécessairement réelle.**
- **Cycles dans le graphe** \rightarrow valeurs propres complexes pour le laplacien = non convergence de P vers une vp réelle.
- Puits dans un graphe : marcheur aléatoire se retrouve bloqué et **vecteur propre contient des valeurs égales à 0.**
- **Multiplicité des valeurs propres** : composantes connexes dans le graphe.

Illustration

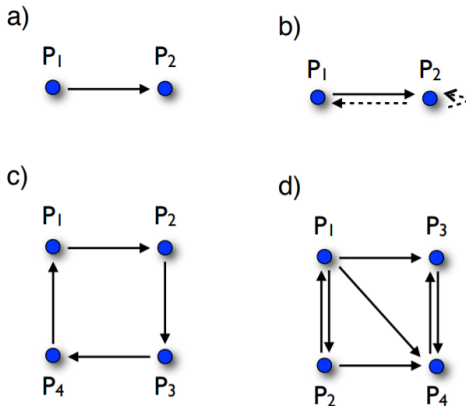


FIGURE 3 – Des exemples de graphes orientés

Etude des valeurs propres

- Les valeurs propres de P sont de **multiplicité égales au nombre de composantes connexes du graphe**.
- Les **valeurs propres de P de module égal à 1** correspondent à la **distribution limite de probabilité** sur le graphe.
- Les **valeurs propres de P d'argument non nul** correspondent à des composantes connexes cycliques (la marche aléatoire ne converge pas).
- Les **valeurs propres de P de module inférieur à 1** strictement correspondent à l'état de transition du marcheur aléatoire.

Preuve : si $\lambda e^{i\theta} \in \mathbb{C}$ est valeur propre de P et x vecteur propre associé, $k \in \mathbb{N} : P^k x = \lambda^k e^{ik\theta} x$

Graphe de Google

- Le graphe de Google fournit une solution aux problèmes ci-dessus : les valeurs propres de la matrice de transition sont réelles positives comprises entre 0 et 1.

Définition - Théorème ; graphe de Google

Soit (V, E) un graphe orienté de matrice d'adjacence A . On définit la matrice de google G par :

$$G = \alpha A + \frac{(1 - \alpha)}{|V|} \Gamma$$

Avec Γ une matrice ne comportant que des 1 et α donné. Les valeurs propres de la matrice de Google sont positives et comprises entre 0 et 1. La valeur propre maximale est égale à 1 et a une multiplicité unique.

Commentaire Graphe de Google

- Résolution classique s'appuie sur le théorème de Perron Frobenius pour approximer la valeur propre maximale.
- Avec la solution proposée (Transformée de Fourier sur les graphes), nous pouvons **calculer des valeurs propres complexes de multiplicité > 1** \rightarrow généralisation du pagerank classique.
- **Transformée de Fourier** : toujours le problème du puits, résout le problème des cycles et des composantes connexes
- Quelle nouvelle "matrice de google" choisir ? Matrice de google avec des "composantes connexes" fortement connectées ?

Description formelle du problème

- **Entrée du problème** : Graphe quelconque orienté.
- **Sortie du problème** : Classement des noeuds par ordre d'importance.
- Utilisation de la transformée de Fourier pour **adapter le PageRank**.

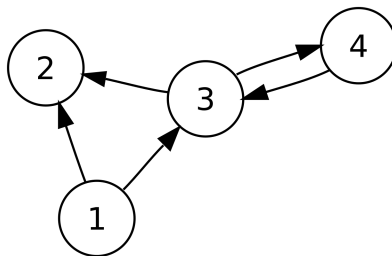


FIGURE 4 – Un Graphe orienté quelconque

Etapas de résolution

On nous fournit la matrice d'adjacence S du graphe orienté d'entrée stockée sur une mémoire d'ordinateur classique.

Etapas de résolution :

- 1 Calcul du Laplacien de la matrice de google modifiée G , noté L .
- 2 Initialisation du système quantique dans un état initial superposé.
- 3 Orientation du système quantique dans l'état superposé représentant la matrice du laplacien L .
- 4 Effectuer une PCA / SVD quantique sur le laplacien pour récupérer (en mesurant le système en sortie) les vecteurs propres associées aux énergies les plus basses.
- 5 Evaluer un score à partir de ces données.

Outline

- ① Introduction
 - Formulation du problème
 - Laplacien de graphe
 - Problèmes et discussions liés aux graphes dirigés
 - Etapes de résolution
- ② Traitements pré-algorithmique
 - Calcul du Laplacien
 - Initialisation du système
 - Recours à une qRAM
- ③ Traitements des données
 - SVD Quantique
 - Grandes étapes
 - Conclusion

Calcul du Laplacien

Définition - Laplacien d'un graphe, BAU2011

Soit (V, E) un graphe orienté. On définit L , le laplacien de (V, E) par la formule suivante :

$$L = I - D^{-1}A$$

Avec I la matrice identité, D la matrice des degrés de (V, E) , A est la matrice d'adjacence du graphe (non symétrique).
(On confond donc le Laplacien classique avec celui de la marche aléatoire)

Premières remarques

- Comme \mathbb{C} est algébriquement clos, L admet des valeurs propres **complexes**. Il faudra bien prendre cela en compte par la suite.
- Dans le cas d'un graphe orienté, la matrice des degrés peut être la matrice des degrés des arêtes entrantes ou des arêtes sortantes. Le choix est arbitraire et les 2 cas seront étudiés.
- Peut on simuler le Laplacien efficacement sur un système quantique, ou faut-il faire le calcul classique ?

Simulation du Laplacien dans un système quantique

- **Sujet très vaste** : simuler un vecteur donné quelconque sur un ordinateur quantique.
- **Exploiter les symétries du Laplacien pour diminuer la complexité** : Anupam Prakash (soutenance de thèse 2014) - permet de représenter un Laplacien associé à un graphe en $\mathcal{O}(\log n)$. Source sûre ?
- On sait déjà exploiter les portes quantiques pour **représenter n'importe quel système** (Phillip Kaye, 2004)
→ *inconvenient* : n'est **pas une structure de donnée modifiable type RAM** : l'article utilise implicitement une RAM pour faire des portes dans le cas général (on accepte le Laplacien classique en entrée de l'algorithme).

Solution idéale : qRAM

- La **qRAM** règle le problème, énormément d'articles sur le sujet du Quantum ML utilisent une structure de QRAM pour initialiser leur algorithme.
- **Plusieurs types de QRAM avec plusieurs problèmes classiques** en Calcul Quantique : perte de cohérence, contraintes sur l'erreur maximale de l'output.
- La qRAM est un sujet à part entière : on peut travailler et obtenir des résultats sans l'avoir résolu.

Principe d'une qRAM

- Idée : transposer une donnée classique dans un ordinateur quantique.
- Avantage : système quantique universel qu'on peut utiliser pour des inputs variables.

Théorème - Transformation d'une qRAM, Llyod

Une qRAM opère la transformation suivante :

$$\sum_j \psi_j |j\rangle_a |0\rangle \xrightarrow{qRAM} \sum_j \psi_j |j\rangle_a |D_j\rangle_j$$

Avec D_j le contenu de l'adresse mémoire j de la qRAM.

Bucket Brigade

- Llyod et Rebentrost ont proposé une solution efficace pour implémenter une qRAM en Calcul Quantique
- Utilise des qTrits : système à 3 états avec $E_1 - E_{\text{fonda}} \ll E_2 - E_1$: pas de perturbation de la part des qTrits à l'état fondamental.

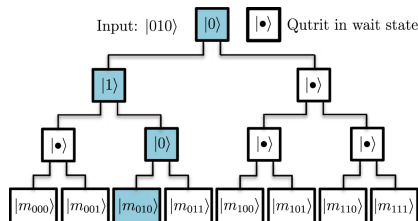


FIGURE 5 – Le fonctionnement d'une qRAM type Bucket-Brigade

Bucket Brigade : analyse de l'erreur

- La méthode Bucket Brigade a été analysée et critiquée dans "On the robustness of bucket brigade quantum RAM".
- Problème d'erreur de prédiction incompatible avec certains algos type Grover
- Est-ce toujours valable pour les algo en $\log(n)$? Question ouverte

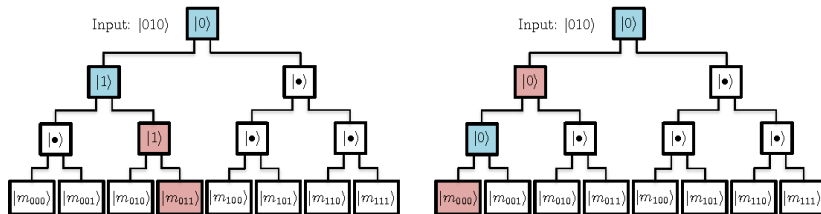


FIGURE 6 – Plusieurs erreurs pouvant apparaître sur une Bucket Brigade

Analyse de l'erreur du Bucket Brigade.

Théorème - Estimation de l'erreur Bucket Brigade

- L'erreur ϵ_p du Bucket Brigade par porte doit satisfaire :
 $\epsilon_p = \mathcal{O}(\frac{1}{n^2})$ pour que le Bucket Brigade conserve sa cohérence.
- Si $\epsilon_p = \mathcal{O}(\frac{1}{n^2})$, alors $\epsilon_{global} = \mathcal{O}(1)$.
- Pour l'algorithme de Grover, l'erreur par oracle doit croître en $\mathcal{O}(2^{-n/2})$ pour conserver sa cohérence.

Alternatives pour le Bucket brigade.

- En 2019, **Flip Flop qRAM** pour essayer de corriger les erreurs du **Bucket Brigade** (Park, Petruccione, Rhee).
- **Sinon cluster states** : se limiter à des graphes de plus petites taille mais système très fiable et peu d'erreurs. Permet de simuler directement un graphe dans ordinateur quantique.

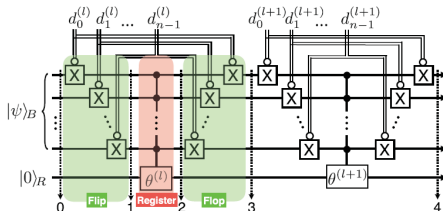


FIGURE 7 – Une flip-flop qRAM

SVD Quantique

- Plusieurs algos de SVD quantique qui **dépendent du graphe considéré** (et donc de l'état quantique en entrée).
- Le laplacien du graphe n'est **pas symétrique** (graphe non orienté), on n'a pas d'information très précises sur le **rang de la matrice** : on suppose **qu'il n'est pas très élevé** dans un premier temps (les pages internet se regroupent en clusters : on peut découper le laplacien en sous-matrices).
- Principe et avantage principal de la SVD quantique : **complexité en $\log(n)$ opérations**.
- Par la suite on **assimilera souvent SVD et PCA** : le but ici est d'estimer les k plus faibles valeurs propres du laplacien du graphe du Web.

Algorithmes de SVD Quantique

- **Algorithme de Lloyd et Rebentrost** : trouver une SVD en utilisant la tomographie Quantique.
- **Tomographie quantique** : agir sur plusieurs copies d'un même état quantique, et le mesurer indépendamment pour obtenir un résultat.
- **Entrée** : matrice dense, à rang faible \Rightarrow utiliser directement la matrice de transition plutôt que le Laplacien.
- **Sortie** : (Vecteurs propres, valeur propre) en superposition.
- **Complexité** : $\mathcal{O}(\log(RN))$ avec R la dimension de l'espace d'arrivée (le nombre de valeurs propres pour l'estimation) et N la dimension de la matrice de départ.
- **Erreur** : $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{n}})$ avec n le nombre de copies de l'état de départ.

Grandes étapes

Entrée : matrice de google G .

Réaliser n copies de $e^{-i\hat{G}t}$ avec $\hat{G} = \begin{pmatrix} 0 & G \\ G^\dagger & 0 \end{pmatrix}$. On retiendra la formule suivante :

$$\begin{aligned} \text{tr}_1\{e^{-iS_G\Delta t}\rho \otimes \sigma e^{iS_G\Delta t}\} \\ = \sigma - i \text{tr}_1\{S_G\rho \otimes \sigma\} + i \text{tr}_1\{\rho \otimes \sigma S_G\}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ = e^{-i\hat{G}t}\sigma e^{i\hat{G}t} \end{aligned}$$

avec ρ la superposition uniforme : $\rho = |1\rangle\langle 1|$ où $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum |k\rangle$
et $S_G = \sum_{j,k} \hat{G}_{j,k}(|k\rangle\langle j| \otimes |j\rangle\langle k|)$

Pour la 2ème égalité, on utilise que $\text{tr}_1\{S_G \rho \otimes \sigma\} = \sigma \frac{A}{N}$

Grandes étapes

- Lloyd précise **qu'il est facile de simuler** $e^{-iS_G\Delta t}$ comme S_G est une matrice creuse.
- Alors, cette simulation de $e^{-i\hat{G}t}$ sera utilisée dans **l'algorithme de l'estimation de la phase** pour déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de G
- En **fixant l'erreur ϵ et le temps de simulation** (temps de cohérence) $t = n\Delta t$, on a $n = \mathcal{O}(\frac{t^2}{\epsilon} \|\hat{G}\|_{max}^2)$ opérations pour simuler $e^{-i\hat{G}t}$
- Ici $\|\hat{G}_{max}^2\| = \mathcal{O}(1)$ et on souhaite $\frac{1}{\epsilon} = O(poly \log(n))$ et $t = poly \log(n)$. Ce qui nous donne bien un nombre de copies à effectuer en $O(poly \log(n))$

Estimation de la phase

- En 2009, Lloyd propose une version améliorée l'algorithme de l'estimation de la phase qui utilise les portes $C - e^{-i\hat{G}nt_0}$. Cela permet d'exploiter complètement la puissance de l'estimation de la phase.

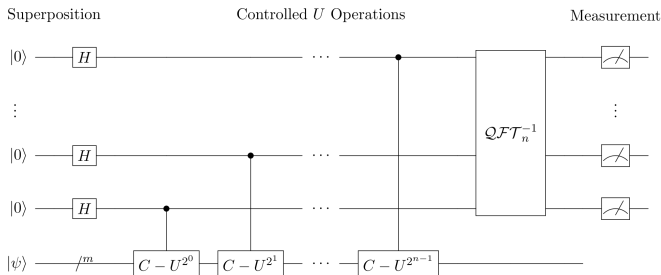


FIGURE 8 – Estimation de la phase classique

Obtention du résultat final : Procrustes problem

Si $G = U\Sigma V^\dagger$ alors en sortie on obtient l'état (à normalisation près) :

$$|\psi_{out}\rangle \simeq \sum_{\frac{\sigma_j}{M+N} \geq \epsilon} \beta_j^\pm |u_j, \pm v_j\rangle \left| \pm \frac{\sigma_j}{M+N} \right\rangle$$

Avec $\beta_j^\pm = \pm \langle v_j | \psi_{in} \rangle / \sqrt{2}$.

On applique alors σ_z sur le qBit le plus à droite, puis on projette sur les valeurs singulières et puis sur u_j et on obtient :

$$|\psi_{final}\rangle \simeq \sum_{\frac{\sigma_j}{M+N} \geq \epsilon} |u_j\rangle \langle v_j | \psi \rangle \simeq UV^\dagger |\psi\rangle$$

Conclusion

- On a alors **accès aux colonnes de U** (vecteurs singuliers) qui correspondent aux vecteurs propres de G associés à une valeur propre élevée (donc proche de 1). Il faut donc mesurer l'un des u_j pour avoir accès au PageRank.
- **Prochaine étape** : implémentation et test avec une matrice de petite taille. Comparaison avec le PageRank quantique classique.
- **Questions en suspens** : graphe de google ? Algorithmes adaptés ? En pratique, est-ce un gain de temps ?

Remerciements

Pour finir, je souhaite remercier tout particulièrement Zeno Toffano et Benoit Valiron, chargés de l'encadrement de notre projet, pour leur présence et implication tout au long de cette étude.