

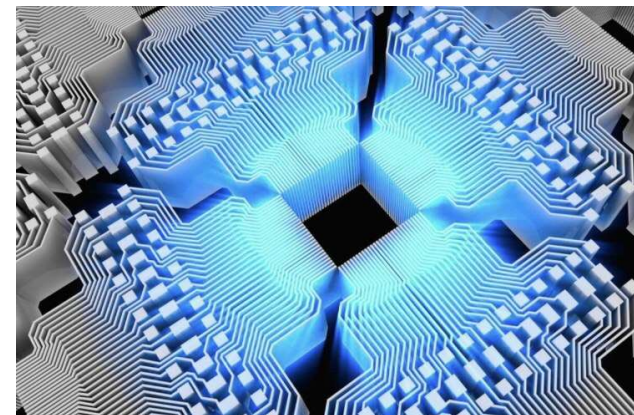
Семинар «Математические проблемы квантовых информационных технологий», 27-28 мая 2024 года, г. Дубна, ЛИТ ОИЯИ

## Использование отжигателей для решения научно-практических задач параметризации сложных моделей: перспективы, возможности, ограничения и некоторые математические аспекты



Николай Владимирович Малетин  
Лаборатория «Квантовая инженерия света»  
Южно-Уральского Государственного Университета  
[MaletinNV@my.msu.ru](mailto:MaletinNV@my.msu.ru), [MaletinNV@susu.ac.ru](mailto:MaletinNV@susu.ac.ru),  
Telegram: @MaletinNV

27 мая 2024 года  
Дубна



## GTQC vs QA

GTQC (Gate-Type Quantum Computers)	QA (Quantum Annealers)
<b>GTQC более перспективны как база для создания универсальных полномасштабных FTQC</b>	
<p>Считаются <b>более удобными и перспективными</b> для реализации полномасштабных универсальных FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computers).</p> <p>~ <b>20</b> компаний-разработчиков.</p>	<p>Предназначены <b>только</b> для решения <b>задач оптимизации</b>.</p> <p>QA – NISQ-реализация ATQC (Adiabatic-Type Quantum Computers) NISQ - Noisy Intermediate Scale Quantum devices.</p> <p><b>3</b> компании-разработчика.</p>
<b>но квантовая вычислительная мощность QA сейчас выше</b>	
<b>1121</b> кубита IBM, <b>1180</b> кубитов Atom Computing	<b>5760</b> кубитов D-Wave
<b>QA легче эмулируются на классических вычислителях</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Программные эмуляторы GTQC: <b>30-50 кубитов</b>. Основная проблема: +1 кубит = RAM × 2.</li> <li>Тензорные сети (ПО): до <b>70 кубитов</b> с fidelity 95%. Принцип действия: аппроксимация многомерных массивов тензорным разложением.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Гибридный отжигатель <b>D-Wave</b> – <b>1 млн.</b> бинарн. переменных.</li> <li>Цифровой отжигатель <b>Fujitsu</b> – <b>1 млн.</b> бинарн. переменных.</li> <li>Цифровой отжигатель <b>Toshiba</b> – <b>10 млн.</b> бинарн. переменных.</li> <li>Программный эмулятор квантового отжига D-Wave – <b>100 тыс.</b> бинарных переменных.</li> </ul> <p style="text-align: center;"><b>1 бинарная переменная “равна” 1 кубиту</b></p>
<b>отжигатели уже используются на практике и поэтому они лидируют в средне- и краткосрочной перспективах</b>	
<p><b>Горизонт создания</b> FTQC <b>20+ лет</b> (по прогнозу BCG <a href="https://www.bcg.com/publications/2019/quantum-computers-create-value-when">https://www.bcg.com/publications/2019/quantum-computers-create-value-when</a>)</p>	<p>Гибридные и цифровые отжигатели <b>начинают использоваться уже сейчас</b> для решения бизнес и научно-практических задач</p>

# Направления возможного практического применения отжигателей

## обсуждаемые в литературе:

### I. Оптимальное управление и задачи дискретной комбинаторной оптимизации в экономике:

логистика, маршрутизация, маркетинг, управление портфелем, сценарное планирование и пр.



### II. Параметризация моделей сложных систем различной природы:

сейсмология, метеорология, томография, материаловедение и пр.



### III. Обучение систем AI/ML



## Примеры решения практических бизнес-задач с использованием гибридного отжигателя D-Wave

2021г., компании Groovenauts и Mitsubishi Estate: оптимизации сбора отходов в районе Токио Маруноути

Параметры	До	После	Эффект
Маршрут сбора отходов, км	2296	1004	<b>-56%</b>
Количество транспортных средств	75	31	<b>-59%</b>
Выбросы CO2			<b>-57%</b>

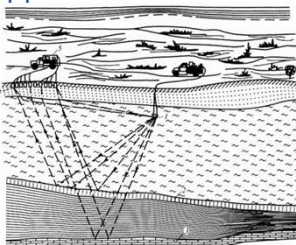
2022 г., компания SavantX: оптимизация логистики в порту Лос-Анджелеса

Параметры	До	После	Эффект
Загрузка крана, %	45	72	<b>60%</b>
Время возврата грузовика, мин.	66	58	<b>-12%</b>
Среднее расстояние между кранами, м.	8900	6200	<b>-30%</b>

источник: D-Wave Systems, <https://www.dwavesys.com/learn/customer-success-stories/>

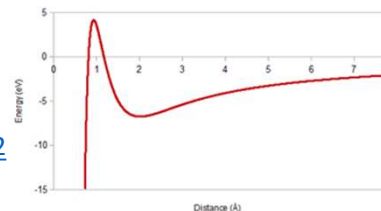
## Примеры возможного научно-практического применения отжигателей

### Инверсия сейсмических данных



Малетин Н.В., «О возможности решения масштабных одномерных задач инверсии сейсмических данных на современных квантовых отжигателях», *Геофизика*, 2023, 2, 102, DOI: [10.34926/geo.2023.59.58.012](https://doi.org/10.34926/geo.2023.59.58.012)

### Параметризация потенциалов межмолекулярного взаимодействия



N.V.Maletin, V.V.Dremov, I.I. Klebanov, «On the possibility of using quantum annealers to solve problems of parametrization of intermolecular interaction potentials», 2023 Laser Phys. Lett. 20 115205, DOI [10.1088/1612-202X/acfd8e](https://doi.org/10.1088/1612-202X/acfd8e)

# Возможности и ограничения современных отжигателей

**Задачи QUBO** (Quadratic Unconstrained Binary Optimization)

$$H(q_1, q_2, \dots, q_N) = \sum_{i,j} \alpha_{ij} q_i q_j \rightarrow \min, (1)$$

$q_i \in \{0, 1\}$  – бинарные переменные

**Полносвязная задача QUBO** – задача QUBO, все коэффициенты  $\alpha_{ij}$  в гамильтониане  $H(q_1, q_2, \dots, q_N)$  которой не равны нулю. **Многие практические задачи** являются **полносвязными или сильносвязными**.

Возможности	Ограничения	Возможные мат.методы преодоления ограничений
<p>① Аннилеры решают только задачи QUBO. но к ним могут быть сведены многие задачи оптимизации, с практической точки зрения <b>формализм QUBO</b> достаточно <b>универсален</b>.</p>	<p><b>Аппаратные возможности</b> современных аннилеров пока <b>сильно ограничены</b>.  <b>D-Wave</b>: 1 млн. бин.переменных, но лишь <b>200 млн. связей</b> = <b>полносвязная задача с ~ 20 тыс. бин. переменных</b>.</p>	<p>1.Поиск способов <b>декомпозиции</b> (последовательной и/или параллельной) <b>исходной задачи</b> на более простые подзадачи.                  2.<b>Выбор оптимального</b> для каждой из переменных в полученных подзадачах <b>способа бинарной дискретизации</b>.                  3.Разработка <b>декомпозиционно-итерационных алгоритмов</b> решения больших <b>задач QUBO</b>, <b>учитывающих внутренние математических симметрий</b> полученных <b>подзадач</b>.</p>
<p>② <b>Существует универсальный алгоритм сведения к задаче QUBO задачи оптимизации любой функции</b> с линейными ограничениями</p>	<p>Алгоритм <b>неприменим для сложных задач</b>, т.к. порождает для них большое количество дополнительных бинарных переменных.</p>	
<p>③ <b>Существует стандартный набор универсальных алгоритмов приближенного решения больших задач QUBO</b> посредством понижения их размерности/ декомпозиции на задачи меньших размеров.</p>	<p>Эти алгоритмы <b>плохо применимы для больших задач</b>, т.к. <b>точность</b> получаемых решений <b>ухудшается с ростом масштаба</b> задачи.</p>	

# Применение QS в задачах вычислительного материаловедения

Расчет инженерно-физических характеристик материалов (предел текучести, пластичность, прочность на разрыв и пр.)

Моделирование систем, состоящих из  $\sim 10^9$  частиц

Пионерская идея Ричарда Фейнмана (1981-1982 гг.):  
Изучение квантовой системы посредством ее моделирования на другой квантовой системе.  
**Возможно на масштабных GTQS без шумов (через 20+ лет)**

## Параметризация потенциалов межмолекулярного взаимодействия

**Шаг 1.** Из физических соображений конструируем **модельный** полуэмпирический **потенциал** взаимодействия  $U(\vec{\theta}, r)$ , где  $\vec{\theta}$  – вектор параметров потенциала  $\theta_i$



**Шаг 2.** Численно решаем уравнение Шредингера методами DFT для системы из  $10^2$ - $10^3$  частиц на интервалах  $10^2$ - $10^3$  пикосекунд. Получаем энергию системы  $E_m^{obs}$  в  $\sim 10^1$ - $10^2$  различных конфигурациях  $m$ .

**Шаг 3.** Параметризуем потенциал  $U(\vec{\theta}, r)$ , минимизируя функцию невязки

$$Err^2(\vec{\theta}) = \sum_{m=1}^M (E_m^{mod}(\vec{\theta}) - E_m^{obs})^2, \quad (2)$$

где  $E_m^{mod}(\vec{\theta}) = \sum_{i=1}^K \sum_{j>i}^K U(r_{ij}^{(m)})$ . (3)

**Шаг 4.** Моделируем систему из  $\sim 10^9$  частиц, используя полученный на Шаге 3 параметризованный потенциал  $U(\vec{\theta}, r)$ . Получаем инженерно-физические характеристики.

Количество параметров  $\theta_i$  в однокомпонентной системе от 2 до  $\sim 10$ , в многокомпонентной системе  $\sim 10^2$ .  
Потенциал взаимодействия  $U(\vec{\theta}, r)$  может быть очень сложной функцией



**Шаг 3 – сложная задача оптимизации, для решения которой можно попробовать применить QA**



# Мат.техника сведения к QUBO на примере простых потенциалов (1/3)

## Экспоненциальная бинарная дискретизация

Простой пример:

$$x \in \left[0, 1\frac{7}{8}\right]: x = \frac{1}{2^0} q_1 + \frac{1}{2^1} q_2 + \frac{1}{2^2} q_3 + \frac{1}{2^3} q_4$$

Общая формула:

$$x \in [x_{min}, x_{max}]: x = x_{min} + \frac{x_{max} - x_{min}}{2^N - 1} \sum_{i=1}^N 2^{i-1} q_i \quad (4),$$

где  $q_i \in \{0, 1\}$  – бинарные переменные.

Сетка дискретизации, задаваемая формулой (4), состоит из  $2^N$  узлов, равномерно расположенных на отрезке

$[x_{min}, x_{max}]$ , включая его границы, с шагом  $\frac{x_{max} - x_{min}}{2^{N_b} - 1}$ .

Таким образом количество узлов сетки решетки экспоненциально зависит от количества бинарных переменных.

## Масштабируемость алгоритма

– зависимость  $N_b$  -количества бинарных переменных от  $N_d$  - количества узлов сетки дискретизации.

## Теоретический предел масштабируемости

$$N_b = K \log_2 N_d, \quad (5)$$

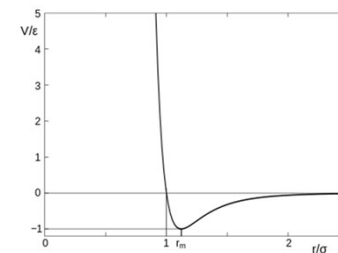
где  $K$  – количество переменных,  $N_d$  - количество узлов сетки дискретизации одной переменной.

## Потенциал Леннарда-Джонса

$$U(r) = 4\epsilon_0 \left( \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right) \quad (6)$$

$$E_m^{mod}(\epsilon_0, \sigma) = \sum_{i=1}^K \sum_{j>i}^K U(r_{ij}^{(m)}), \quad (7)$$

$$Err^2(\epsilon_0, \sigma) = \sum_{m=1}^M (E_m^{mod}(\epsilon_0, \sigma) - E_m^{obs})^2 \rightarrow \min \quad (8)$$



Простая замена переменных

+ экспоненциальная бинарная дискретизация  
+ очевидное для любой бинарной переменной тождество

$$q^2 \equiv q \quad (9)$$

позволяют свести задачу (8) к задаче QUBO (1)

$$H(q_1, q_2, \dots, q_N) = \sum_{i,j} \alpha_{ij} q_i q_j \rightarrow \min,$$

где  $q_i \in \{0, 1\}$  – бинарные переменные.

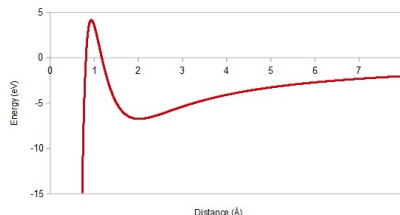
**Масштабируемость алгоритма** в данном случае будет **логарифмической**

$$N_b = 2 \log_2 N_d \quad (10)$$

# Мат.техника сведения к QUBO на примере простых потенциалов (2/3)

## Потенциал Букингема

$$U(r) = A \exp(-Br) - \frac{C}{r^6}, \quad (11)$$



$$Err^2(A, B, C) = \sum_{m=1}^M (E_m^{mod} - E_m^{obs})^2 \rightarrow \min, \quad (12)$$

## Метод 1. На основе бинарной дискретизации

Замена переменных + экспоненциальная бинарная дискретизация преобразует функцию  $Err^2(A, B, C)$  в **трансцендентную функцию от бинарных переменных.**

**Теорема 1.** Любая функцию от  $n$  бинарных переменных  $f(q_1, q_2, \dots, q_n)$  может быть представлена в виде полинома от  $q_1, q_2, \dots, q_n$  степени не большей, чем  $n$ .

**Теорема 2.** Задача оптимизации произвольного полинома от 3-х бинарных переменных может быть сведена к задаче QUBO от 5-ти бинарных переменных.

**Теоремы 1 и 2 позволяют свести задачу (12) к задаче QUBO.**

**Масштабируемость алгоритма** будет при этом **линейно-логарифмической**

$$N_b \approx 4N_d \log_2 N_d. \quad (13)$$

## Линейная бинарная дискретизация

$$x = \sum_{i=1}^N \beta_i q_i, \quad (14.1)$$

при условии, что  $\sum_{i=1}^N q_i = 1$ , (14.2)

где  $q_i \in \{0, 1\}$  – бинарные переменные,

$\beta_i$  - действительные коэффициенты.

Не экономно, т.к.  $N_d = N_b$ , но зато

удобно задавать функцию

$$f(x) = \sum_{i=1}^N f(\beta_i) q_i, \quad (15)$$

и использовать для построения неравномерных сеток.

## Метод 2. На основе линейной дискретизации

**Масштабируемость алгоритма квадратичная**

$$N_b = N_d^2 + N_d. \quad (16)$$

## Комбинация Методов 1 и 2

**Масштабируемость алгоритма линейно-логарифмическая**

$$N_b \approx 2N_d \log_2 N_d. \quad (17)$$

## Мат.техника сведения к QUBO на примере простых потенциалов (3/3)

**Метод 3.** Последовательная декомпозиция на более простые задачи с помощью разложения в ряд Тейлора

$U(r) = A \exp(-Br) - \frac{C}{r^6}$ , (11) – потенциал Букиннгема

$$Err^2(A, B, C) = \sum_{m=1}^M (E_m^{mod} - E_m^{obs})^2 \rightarrow \min, (12)$$

**Основная идея метода:** «вытащить» параметр  $B$  из экспоненты  $\exp(-Br)$ , используя разложение в ряд Тейлора.

**Первый этап:** численно рассчитываем значения первых  $V$  коэффициентов  $a_v$  ряда Тейлора по  $r$  функции  $A \exp(-Br)$ .

**Масштабируемость алгоритма логарифмическая.**

**Второй этап:** Приравнивая полученные значения  $a_v$  к их формульному выражению, получаем систему уравнений для  $A$  и  $B$ , которая сводится к задаче

$$Err^2(\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_V) = \left( \sum_{v=0}^V (-1)^v a_v \varepsilon_v r_{max}^v \right)^2 \rightarrow \min (18.1)$$

при наличии ограничений

$$A(B)^v = a_v v! (1 - \varepsilon_v) \text{ для всех целых } v \text{ от } 0 \text{ до } V. (18.2)$$

Задача (18) сводится к задаче QUBO. **Масштабируемость алгоритма линейная.**

**Метод 4.** Модификация метода 3 путем замены гамильтониана QUBO на более простой

Задачу QUBO, к которой сводится задача (18) можно заменить на другую задачу QUBO, имеющую тот же глобальный минимум, но не содержащую дополнительных бинарных переменных.

В этом случае **масштабируемость алгоритма** будет **логарифмической и равной теоретическому пределу**

**Таким образом исходная задача декомпозируется на две последовательные подзадачи, решаемые алгоритмами с логарифмической масштабируемостью.**



## Потенциал EAM (Embedded Atom Model)

$U_i(\vec{\theta}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = AE^{(c)}F(\rho_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)) + \frac{1}{2}\sum_{j(\neq i)}\bar{\varphi}(r_{ij})$  - потенциальная энергия  $i$ -ой частицы в  $N$ - частичной системе,  
где:

$$F(\rho_i) = -\left(1 - \ln\left(\frac{1}{Z} \sum_{j(\neq i)} S\left(\frac{r_{max}-r}{r_{max}-r_{min}}\right) \exp\left(-\beta \frac{r-r_0}{r_0}\right)\right)^n\right) \left(\frac{1}{Z} \sum_{j(\neq i)} S\left(\frac{r_{max}-r}{r_{max}-r_{min}}\right) \exp\left(-\beta \frac{r-r_0}{r_0}\right)\right)^n,$$

$$S(y) = \begin{cases} 0, & y \leq 0 \\ 35y^4 - 84y^5 + 70y^6 - 20y^7, & 0 < y < 1, \\ 1, & y \geq 1 \end{cases}$$

$$\bar{\varphi} = S\left(\frac{r_{max}-r}{r_{max}-r_{min}}\right)\left(E_0 - \frac{2E^{(c)}}{Z}(1 + \alpha x + \eta x^2 + \mu x^3 + D(\alpha x)^3 \frac{r_0}{r})e^{-\alpha x}\right),$$

$$x(r) = \frac{r-r_0}{r_0},$$

$\vec{\theta} = (A, E^{(c)}, n, Z, r_{max}, r_{min}, r_0, \beta, E_0, \alpha, \eta, \mu, D)^T$  - вектор из 13 параметров, значения которых нужно определить

Формула взята из статьи  
«The Embedded Atom Model and large-scale MD simulation of tin under shock loading»,  
F A Sapozhnikov *et al* 2014 *J. Phys.: Conf. Ser.* **500** 032017  
DOI 10.1088/1742-6596/500/3/032017

Проблема – слишком сложные формулы при разложении в ряд Тейлора, что математически не элегантно и не технологично.

Но существует метод (**Метод 5**), как обойти эту проблему с помощью ML и получить алгоритм с логарифмической масштабируемостью равной теоретическому пределу.

Продолжение следует...