

# Способы представления оптимизационных задач

Яцулевич Владимир Владимирович

## 1. КОНВЕЕР ПОДГОТОВКИ ДАННЫХ

Теперь подберёмся чуть ближе к задаче квантового отжига. Квантовый симулятор представляет из себя регистр кубитов с определёнными связями. То есть математически архитектуру квантового вычислителя можно описать с помощью неориентированного графа, где кубиты — это вершины графа, а связи между кубитами — это рёбра между вершинами. То есть теперь с одной стороны мы имеем граф, а с другой стороны мы имеем оптимизационную задачу в форму QUBO. Соответственно, мы можем свести модель QUBO к графовой форме.

Пусть даны бинарные переменные  $x_1, \dots, x_n$  и коэффициенты  $c_{ij} \in \mathbb{R}$ . Тогда задача QUBO имеет вид

$$\operatorname{argmin}_{\vec{x}} \sum_{i \leq j} c_{ij} x_i x_j. \quad (1)$$

Модель QUBO может быть напрямую конвертирована в граф  $P$  с вершинами  $V(P) = \{x_1, \dots, x_n\}$  и рёбрами  $E(P) = \{(x_i, x_j) | i \neq j, c_{ij} \neq 0\}$ , где  $c_{ii}$  — вес вершин, а  $c_{ij}$  — вес рёбер при  $i \neq j$ .

В результате мы получаем некоторый граф. Но основная проблема на данном этапе заключается в том, что полученный граф и граф архитектуры квантового симулятора отличаются. Поэтому следующим этапом будет сведение математического графа к физическому. Конвеер подготовки данных представлен на рисунке ниже.

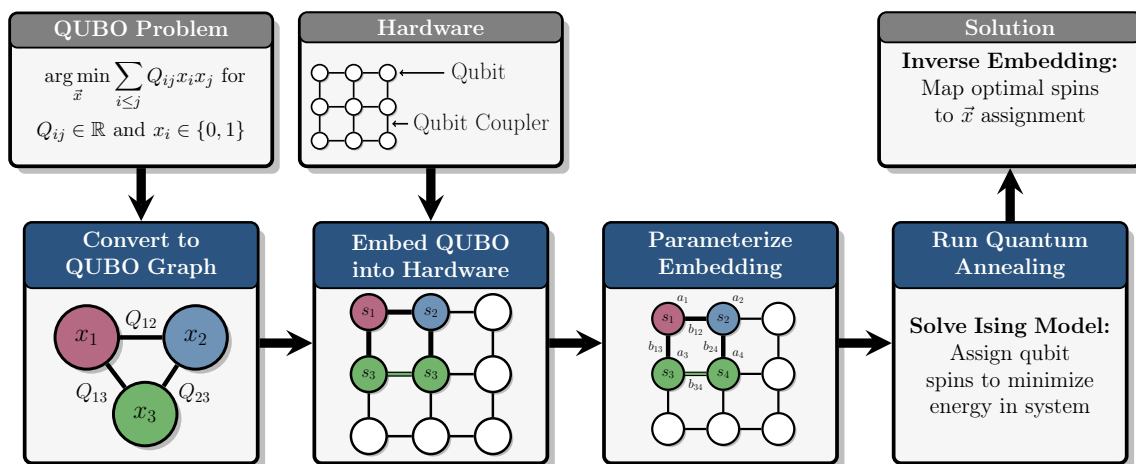


Рис. 1. Конвеер подготовки данных

## 2. МИНИМАЛЬНОЕ ВЛОЖЕНИЕ

Пусть дано два графа  $P$  и  $H$ , минимальным вложением графа  $P$  в граф  $H$  называется функция  $\varphi : V(P) \rightarrow \mathcal{P}(V(H))$ , которая каждой вершине графа  $P$  ставит в соответствие множество вершин из  $V(H)$ , которое удовлетворяет следующим свойствам:

1. Множества вершин не пересекаются:  $\varphi(u) \cap \varphi(v) = \emptyset$  для любых двух различных вершин  $u, v \in V(P)$ .
2. Множества вершин индуцируют связанные подграфы:  $H[\varphi(u)]$  — связный для всех вершин  $u \in V(P)$ .
3. Связь вершин сохраняется:  $(u, v) \in E(P) \rightarrow (u', v') \in E(H)$  для некоторых вершин  $u' \in \varphi(u)$  и  $v' \in \varphi(v)$ .

Стоит отметить, что в общем виде задача вычислительно сложная. Но нам не нужно создавать алгоритм минимального вложения в произвольный граф. Мы будем отталкиваться от архитектуры квантового симулятора. У одного из квантового компьютера компании D-Wave архитектура имеет вид

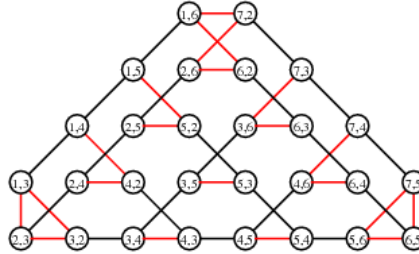
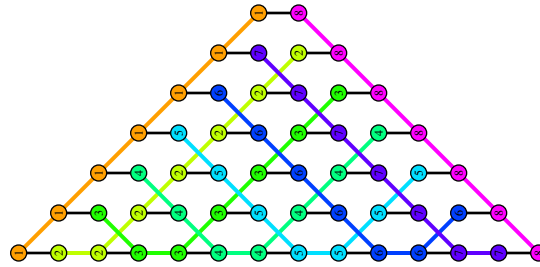
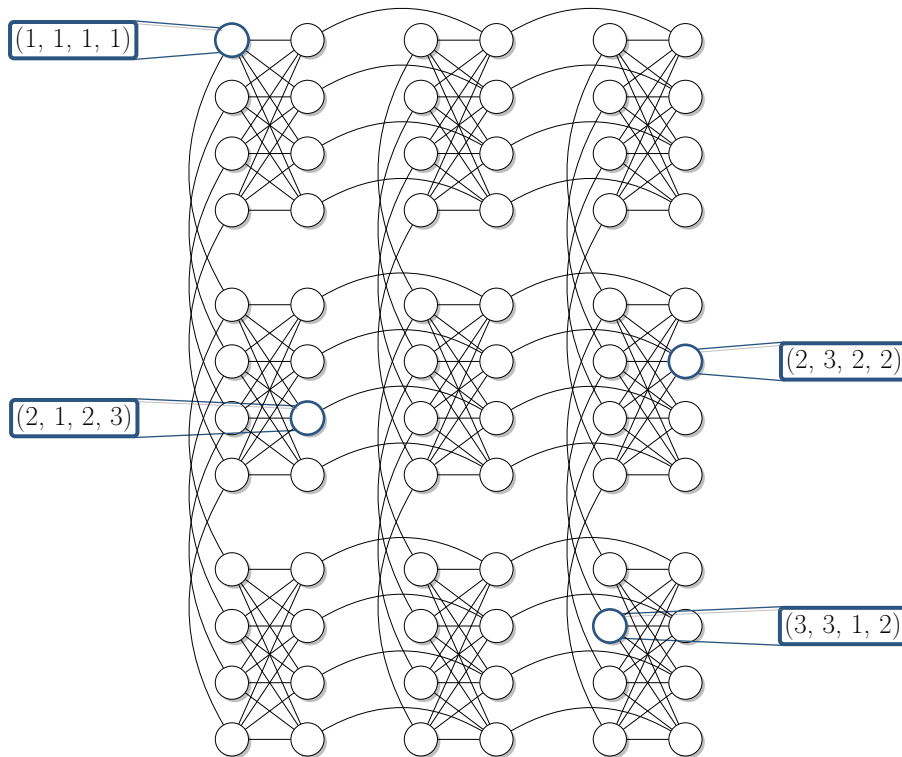


Рис. 2. Архитектура квантового компьютера D-Wave

Пусть дан полный граф  $K_n$ . Основная концепция заключается в том, чтобы каждой вершине полного графа  $K_n$  поставить в соответствие цепочку из  $n - 1$  вершины. Пример для полного графа  $K_8$  представлен на рисунке ниже.

Текущее и приоритетное направление архитектуры квантовых симуляторов компании D-Wave основаны на так называемых Химерных графах.

Химерный граф  $\mathcal{C}_{L,M,N}$  представляет из себя решётку  $M \times N$  полных двудольных графов  $K_{L,L}$ . К примеру, квантовый симулятор D-Wave 2000Q основан на графе  $\mathcal{C}_{4,16,16}$ . Местоположение кубита в таком графе определяется четвёркой  $(l_r, l_c, l_p, l_h)$ , где  $1 \leq l_r \leq M$  идентифицирует строку,  $1 \leq l_c \leq N$  идентифицирует столбец,  $l_p \in \{1, 2\}$  описывает

Рис. 3. Вложение графа  $K_8$ Рис. 4. Пример Химерного графа  $C_{3,3,4}$ 

долю графа и  $1 \leq l_h \leq L$  определяет высоту в двудольном графе.

Детально рассмотрим идею, предложенную в статье [1]. Главная концепция заключается в введении промежуточного графа, который мы назовём *виртуальным слоем*. Тогда процесс поиска минимального вложения можно будет разделить на две части:

1. Определим начальное вложение. Начнём с виртуального слоя, который описывает физические кубиты. И определим вид отображений.

2. Итеративная настройка вложения. После инициализации начального вложения, произведём оценку и определим новый вид виртуального слоя и новый вид отображений.

Пусть задан граф задачи  $P$  и граф архитектуры  $H$ ,  $\mathcal{T}$  — шаблон виртуального слоя. Отображение  $\varphi : V(P) \rightarrow \mathcal{P}(V(\mathcal{T}))$  — вложение исходной задачи в виртуальный слой,  $\psi : V(\mathcal{T}) \rightarrow \mathcal{P}(V(H))$  — вложение виртуального слоя в физический граф.

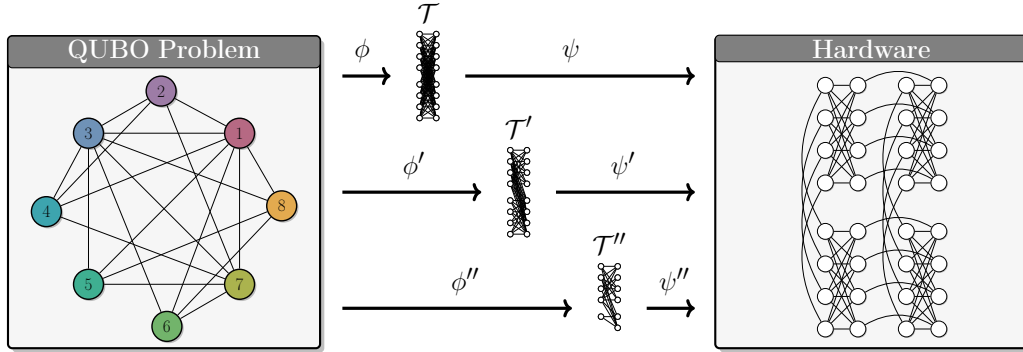


Рис. 5. Алгоритм поиска минимального вложения

Семейство виртуальных шаблонов  $\mathcal{F}$  — это множество виртуальных графов определённых вместе с семейством функций  $\Psi$ , таких что для любых  $L, M, N \in \mathbb{Z}^+$  существует функция  $\psi \in \Psi$  и  $\mathcal{T} \in \mathcal{F}$ , такие что функция  $\psi$  вкладывает граф  $\mathcal{T}$  в Химерный граф  $\mathcal{C}_{L,M,N}$ .

Нахождения функции виртуального вложения  $\varphi : V(P) \rightarrow \mathcal{P}(V(\mathcal{T}))$  достаточно для определения начального вложения  $\chi : V(P) \rightarrow \mathcal{P}(V(H))$ , которое может быть построено следующим образом

$$\chi(u) = \bigcup_{x \in \varphi(u)} \psi(x). \quad (2)$$

Этап вложения принимает на вход граф  $P$  некоторой задачи и виртуальный слой  $\mathcal{T}$ , и выдаёт на выходе виртуальное вложение  $\varphi : V(P) \rightarrow \mathcal{P}(V(\mathcal{T}))$

Этап редукции принимает на вход граф  $P$  некоторой задачи, виртуальный слой  $\mathcal{T}$  и виртуальное отображение  $\varphi$ . На выходе алгоритм выдаёт новый виртуальный слой  $\mathcal{T}'$  и новое виртуальное отображение  $\varphi'$  (которое может совпадать с отображением  $\varphi$ )

Физический граф  $\mathcal{C}_{L,M,N}$  описывает виртуальный двудольный граф  $\mathcal{T} = K_{LM, LN}$  с долями  $L(\mathcal{T}) = \{v_1, \dots, v_{LM}\}$  и  $R(\mathcal{T}) = \{h_1, \dots, h_{LN}\}$ . Функция минимального вложения определяется следующим образом

$$\begin{aligned}\psi(v_i) &= \{(j, \lceil i/L \rceil, 1, i \bmod L) | 1 \leq j \leq M\}, \\ \psi(h_i) &= \{(\lceil i/L \rceil, j, 2, i \bmod L) | 1 \leq j \leq N\}.\end{aligned}\tag{3}$$

**Шаг 1.** Пусть дан граф  $P$  некоторой задачи с множеством вершин  $V(P) = \{u_1, \dots, u_n\}$ , где  $n \leq \min(LM, LN)$  и двудольный виртуальный слой  $\mathcal{T}$  с долями  $L(\mathcal{T}) = \{v_1, \dots, v_{LM}\}$  и  $R(\mathcal{T}) = \{h_1, \dots, h_{LN}\}$ . Возьмём в качестве начального отображения  $\varphi(u_i) = \{v_i, h_i\}$  для  $1 \leq i \leq n$ .

**Шаг 2.** Пусть задан стандартный ввод  $P$ ,  $\mathcal{T}$  и  $\varphi$ . Для каждого виртуального кубита  $v_i \in L(\mathcal{T})$  определим множество соседей  $I_{v_i} = \{j | (v_i, h_j) \in E(\mathcal{T})\}$ . Определим для каждой вершины левой доли метрику

$$\text{score}(v_i) = 1 + \left\lfloor \frac{\max(I_{v_i})}{L} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{\min(I_{v_i})}{L} \right\rfloor\tag{4}$$

Для вершин правой доли метрика определяется аналогично. Тогда метрика кубита для отображения  $\varphi$  и виртуального слоя  $\mathcal{T}$  определяется как

$$\sum_{v_i \in L(\mathcal{T})} \text{score}(v_i) + \sum_{h_i \in R(\mathcal{T})} \text{score}(h_i).\tag{5}$$

**Шаг 3.** Пусть задан стандартный ввод  $P$ ,  $\mathcal{T}$  и  $\varphi$ . Пусть  $S$  — множество вершин задачи, сопоставленных по крайней мере одному виртуальному кубиту на каждой доле,  $\mathcal{E}$  — это множество вершин  $E$  виртуального слоя, таких что для любых вершин  $u, v \in S$  существует ровно одно ребро  $(u', v') \in E$  с  $u' \in \varphi(u)$  и  $v' \in \varphi(v)$ . Тогда на этом шаге нужно вычислить величину

$$\text{argmin}_{E \in \mathcal{E}} \text{Qubit-Scoring}(E).\tag{6}$$

**Шаг 4.** Пусть задан стандартный ввод  $P$ ,  $\mathcal{T}$  и  $\varphi$ . Пусть  $S$  — множество вершин задачи, сопоставленных по крайней мере одному виртуальному кубиту на каждой доле.

$$E = \{(v_i, h_j) | i \leq j, v_i \in \varphi(x), h_j \in \varphi(y), x, y \in V(P), y \in N(x)\},\tag{7}$$

где  $N(u)$  — кол-во вершин, смежных с вершиной  $u$ .

**Шаг 5.** Пусть задан стандартный ввод  $P$ ,  $\mathcal{T}$  и  $\varphi$ ,  $E$  — множество вершин, полученных на предыдущем шаге. Результатом работы данного шага будет новое виртуальное окружение  $\mathcal{T}'$  с вершинами  $V(\mathcal{T})$  и рёбрами  $E(\mathcal{T}) - E$ .

**Шаг 6.** Пусть задан стандартный ввод  $P$ ,  $\mathcal{T}$ ,  $\varphi$  и параметр  $k$ . Тогда новое отображение можно вычислить следующим образом.

1. Пусть  $\varphi' = \varphi$ .
2. Начиная с  $\varphi'$  посчитаем все  $C_n^k k!$  способов переобозначить ровно  $k$  вершин в каждой части. И для каждого случая посчитаем матрицу качества для каждого кубита.
3. Выберем тот результат, который даёт наименьшее значение метрики.
4. Повторять эти шаги до получения меньшего результата.

- 
- [1] T. D. Goodrich, B. D. Sullivan, and T. S. Humble, Optimizing adiabatic quantum program compilation using a graph-theoretic framework, Quantum Information Processing **17**, 1 (2018).
- [2] V. Choi, Minor-embedding in adiabatic quantum computation: I. the parameter setting problem, Quantum Information Processing **7**, 193 (2008).