

Quantum annealing und Logistik

Yanick Kind

12. Juli 2023

Fakultät Physik

Übersicht

Einleitung

Simulated und quantum annealing

Quadratic unconstrained binary optimization

Hardware embedding

Fallbeispiel Aisin Corporation

Zusammenfassung und Ausblick

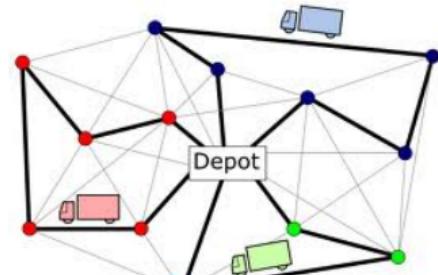
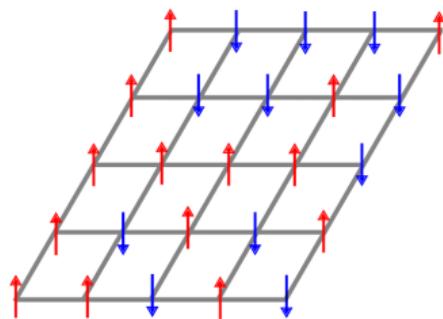


azom.com

Traveling Salesman problem

- klassisches kombinatorische Optimierungsproblem
- Beispiel: Ein Lieferwagen hat n Lieferorte
 - $(n - 1)!$ verschiedene Routen
- NP-hard
 - skaliert nicht polynomiell sondern **exponentiell** mit Systemgröße
- Globales Optimum mittels numerischen Lösungsverfahren finden, ist extrem aufwändig
- Local search Algorithmen als heuristische Näherungsverfahren nutzen

Motivation



r-bloggers.com

Sascha Wald, Thermalisation and Relaxation of Quantum Systems (2017)

E

f

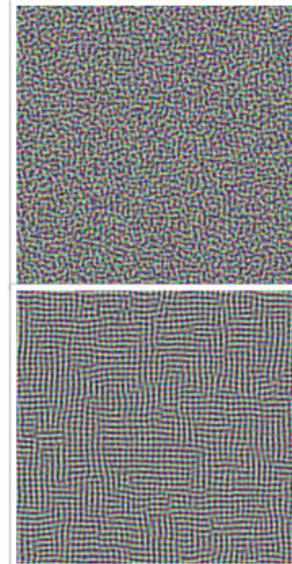
Motivation



Simulated annealing

- in Analogie zu auskühlenden Metallen
 - schneller auskühlen → suboptimaler Zustand (amorph)
 - langsamer auskühlen → optimalerer Zustand (kristallin)
- nutzt thermische Fluktuationen, um lokalen Minima zu entkommen
- Wahrscheinlichkeit P_i folgen Mastergleichung $\frac{dP_i}{dt} = \sum_j L_{ij} P_j$

$$L_{ij} = \begin{cases} \left[1 + \exp((E_i - E_j)/T_t)\right]^{-1} & \text{einzelne Spin Differenz} \\ -\sum_{k \neq i} L_{ki} & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

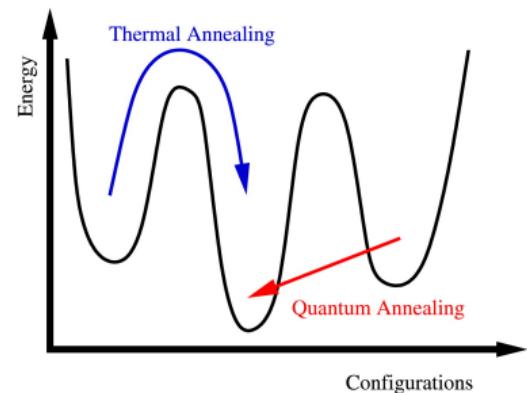


simulated annealing

Bild um die Übergangselemente zu erläutern in Inkscape selber machen

Quantum Annealing

- transversales Ising Modell $H(t) = \underbrace{-\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^z}_{H_0} - \underbrace{\Gamma(t) \sum_i \sigma_i^x}_{H_x(t)}$
- $H_x(t)$ verursacht Tunneln zwischen Eigenzuständen von H_0
 - schnellere Konvergenz
- $|\Psi(t)\rangle$ durch Schrödingergleichung $i \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t)|\Psi(t)\rangle$ festgelegt
- wähle monoton fallende Funktionen für $\Gamma(t)$ („ausglühen“)



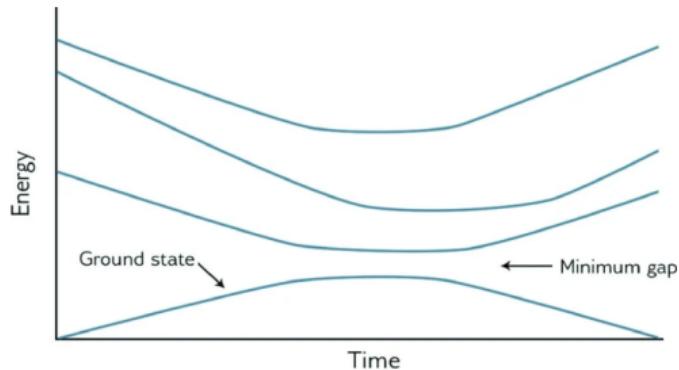
V. Bapst et al., Physics Reports 523 (2013)

Adiabatisches Theorem der Quantenmechanik

System bleibt im selben Eigenzustand von H , wenn sich H hinreichend langsam ändert

Adiabatische Zeit

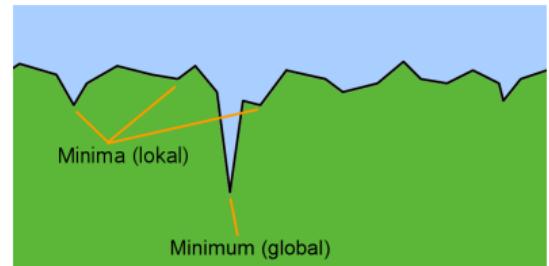
- minimale Zeit, damit sich System adiabatisch ändert τ
- $\Delta(s) = E_1(s) - E_0(s)$
- mindestens $\tau \propto \frac{1}{\Delta(s)^2}$, schlimmstenfalls $\tau \propto \frac{1}{\Delta(s)^3}$
- Problem: $\Delta(s)$ sehr klein
 - $\tau \rightarrow \infty$



E. R. Miranda (Ed.), Quantum Computer Music (2022)

Simulation zu simulated und quantum annealing

- $P_{SA}(t)$: Wahrscheinlichkeit System in GZ zu finden
- $P_{QA}(t) = |\langle g | \Psi(t) \rangle|^2$: Wahrscheinlichkeit System in GZ $|g\rangle$ von H_0 zu finden
- $P_{SA}^{st}(T)$: Boltzmann-Faktor des GZ von H_0
- $P_{QA}^{st}(\Gamma) = |\langle g | \Psi_\Gamma \rangle|^2$ mit $|\Psi_\Gamma\rangle$ als GZ von H
- $\lim_{t \rightarrow 0} \Gamma(t) = \lim_{t \rightarrow 0} T(t) = \infty$ bzw. $\lim_{t \rightarrow -\infty} \Gamma(t) = \lim_{t \rightarrow -\infty} T(t) = \infty$
 - Superposition aller Zustände gleicher Amplitude (QA)
 - Alle Zustände gleich wahrscheinlich (SA)
- Idealfall (adiabatisch): $\lim_{t \rightarrow \infty} P_{QA}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{SA}(t) = 1$
 - Grundzustand gefunden
 - sonst: In einem lokalen Minimum „hängen“ geblieben
- 8 Spins



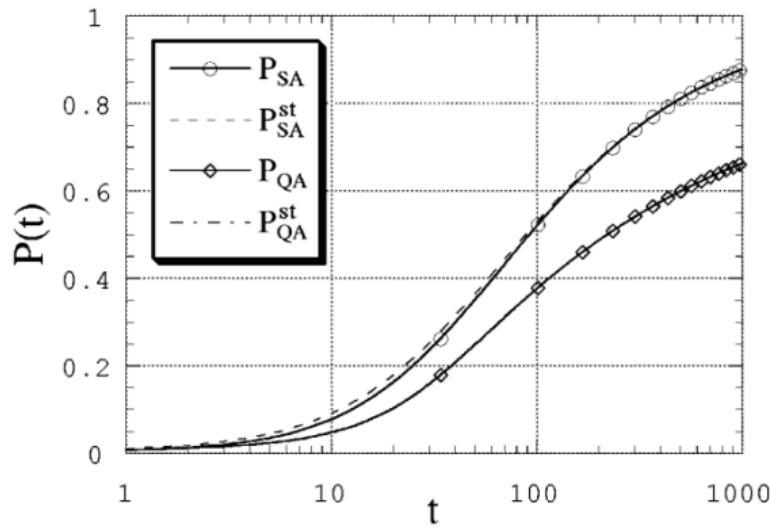
K. Fleischer, wikipedia.org

Ergebnisse zu simulated und quantum annealing

- $P_{SA}(t)$: Wahrscheinlichkeit System in GZ zu finden
- $P_{QA}(t) = |\langle g | \Psi(t) \rangle|^2$: Wahrscheinlichkeit System in GZ $|g\rangle$ von H_0 zu finden
- $P_{SA}^{st}(T)$: Boltzmann-Faktor des GZ von H_0
- $P_{QA}^{st}(\Gamma) = |\langle g | \Psi_\Gamma \rangle|^2$ mit $|\Psi_\Gamma\rangle$ als GZ von H

$J_{ij} = \text{const}$
 $h = 0.1$

$$\Gamma(t) = T(t) = 3/\ln(t + 1)$$

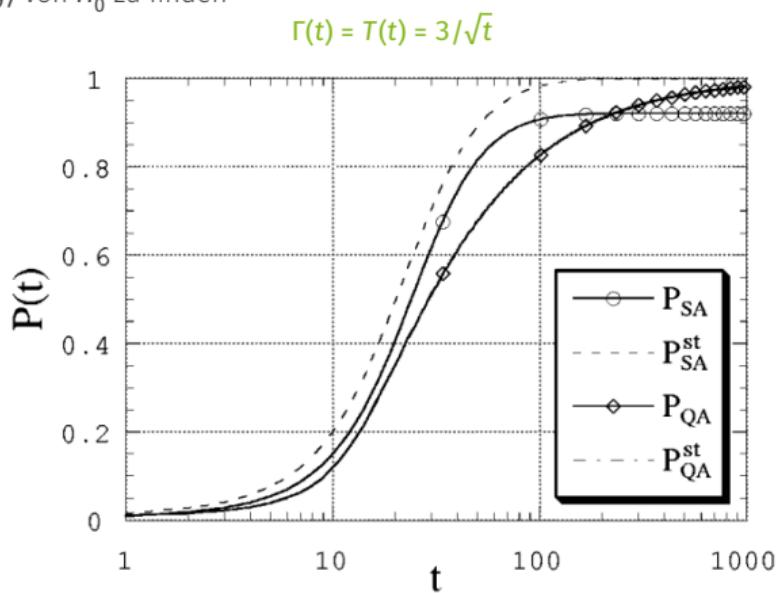


Kadowaki, T, Nishimori, H, PHYSICAL REVIEW E 1998

Ergebnisse zu simulated und quantum annealing

- $P_{SA}(t)$: Wahrscheinlichkeit System in GZ zu finden
- $P_{QA}(t) = |\langle g | \Psi(t) \rangle|^2$: Wahrscheinlichkeit System in GZ $|g\rangle$ von H_0 zu finden
- $P_{SA}^{st}(T)$: Boltzmann-Faktor des GZ von H_0
- $P_{QA}^{st}(\Gamma) = |\langle g | \Psi_\Gamma \rangle|^2$ mit $|\Psi_\Gamma\rangle$ als GZ von H

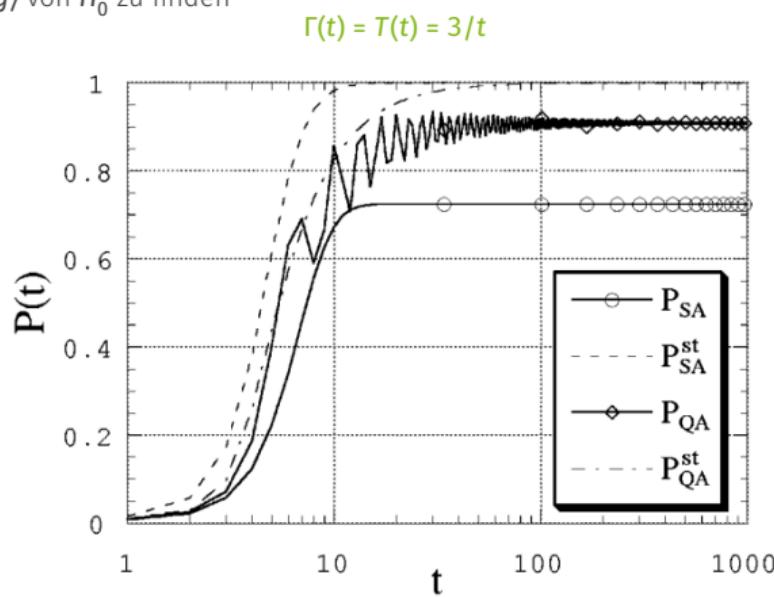
$J_{ij} = \text{const}$
 $h = 0.1$



Ergebnisse zu simulated und quantum annealing

- $P_{SA}(t)$: Wahrscheinlichkeit System in GZ zu finden
- $P_{QA}(t) = |\langle g | \Psi(t) \rangle|^2$: Wahrscheinlichkeit System in GZ $|g\rangle$ von H_0 zu finden
- $P_{SA}^{st}(T)$: Boltzmann-Faktor des GZ von H_0
- $P_{QA}^{st}(\Gamma) = |\langle g | \Psi_\Gamma \rangle|^2$ mit $|\Psi_\Gamma\rangle$ als GZ von H

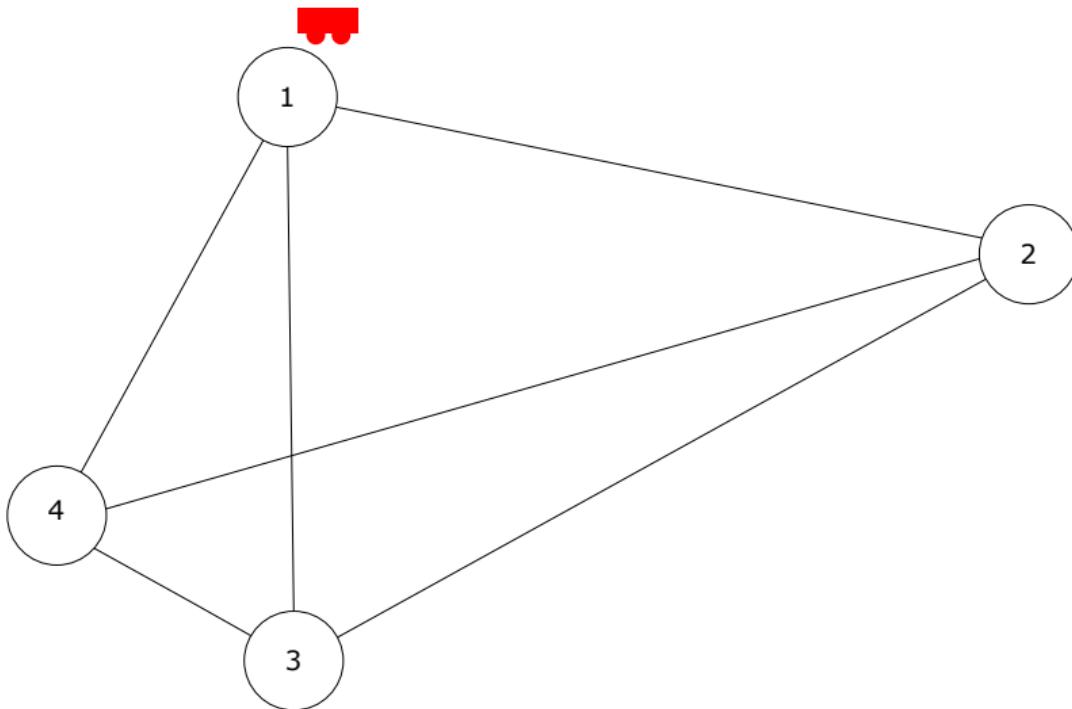
$\blacksquare J_{ij} = \text{const}$
 $\blacksquare h = 0.1$



Binäre Variable

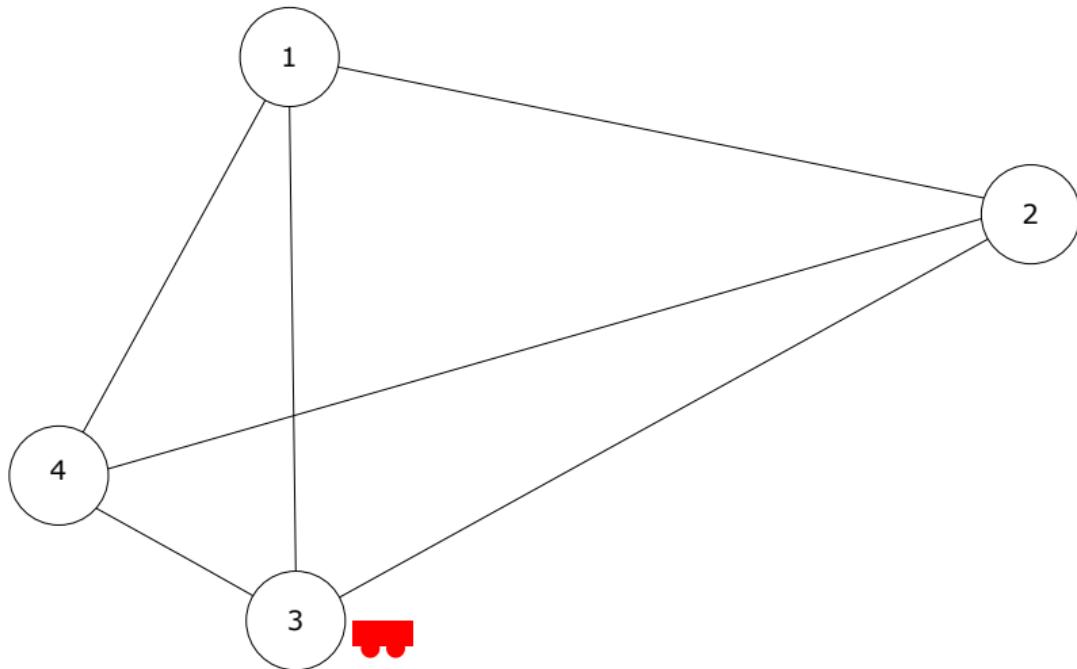
- $x \in \{0, 1\}$
- Beispiel: Aufenthaltsort von einem Truck
- Formulierung als Graph mit N Knoten i
 - ordne jedem Knoten i eine binäre Variable zu
 - jedem Truck kann ein Vektor $x^j = (x_1^j, \dots, x_N^j)$ von binären Variablen zugeordnet werden
- Truck j an Knoten $i \rightarrow x_i^j = 1$ sonst $x_k^j = 0$

Binäre Variable



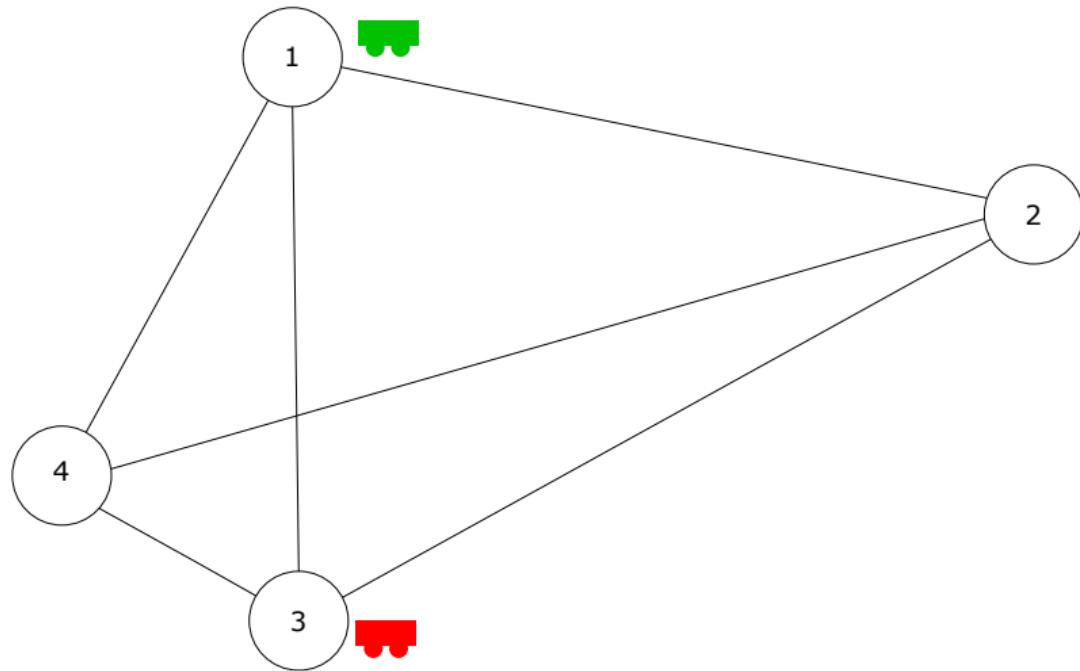
$$\underline{x}^{\text{rot}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Binäre Variable



$$\underline{x}^{\text{rot}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

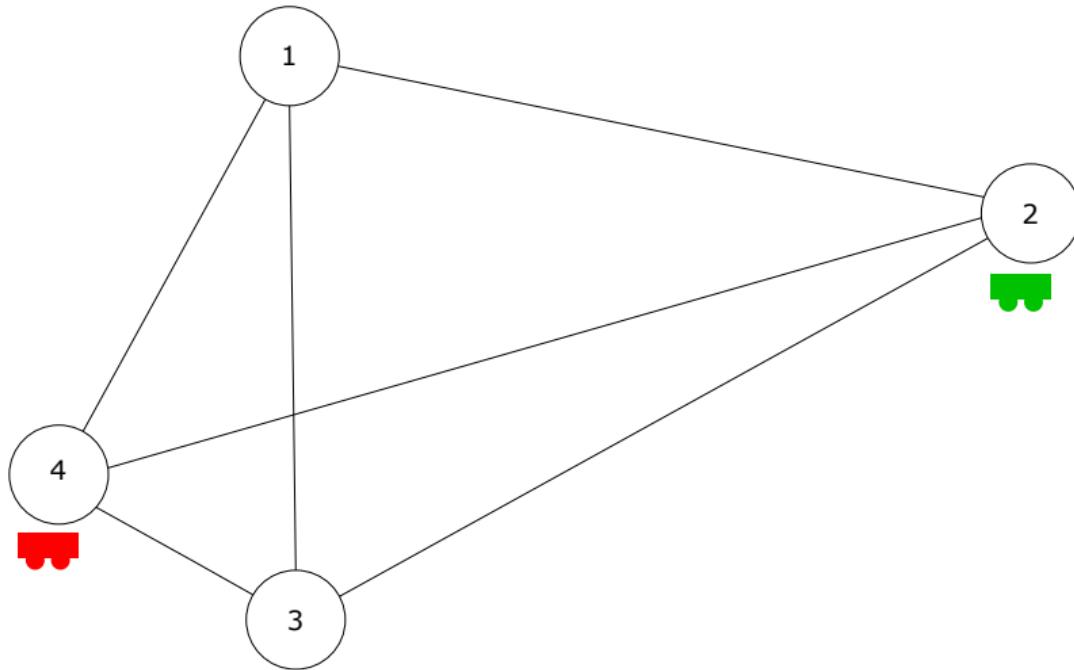
Binäre Variable



$$\underline{x}^{\text{rot}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\underline{x}^{\text{grün}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Binäre Variable



$$\underline{x}^{\text{rot}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{x}^{\text{grün}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Quadratic unconstrained binary optimization (QUBO)

Aufgabe

$$\text{Minimiere } f(\underline{x}, \underline{\underline{Q}}) = \sum_{ij} Q_{ij} x_i x_j$$

- $x_i \in \{0, 1\}$ als binäre Variable
 - lässt sich mittels $s_i = 2x_i - 1 \in \{-1, 1\}$ auf Ising-Variablen („spin“) transformieren
- Q_{ij} definiert Wechselwirkung zwischen x_i
 - allg. hermitesch (symmetrisch im Ising-Modell)

Quadratic unconstrained binary optimization constrains

- constraints lassen sich nicht direkt in der Hardware implementieren
 - constraints als „Strafe“ in der Kostenfunktion implementieren
- Beispiel: Ein Truck darf sich nur an einem Punkt aufhalten
 - $\sum_i x_i = 1 \iff \sum_i x_i - 1 = 0$
 - in QUBO Problem umwandeln $\rightarrow g(x_i) = (\sum_i x_i - 1)^2$
 - $f \rightarrow f + \lambda g$
 - constraint verletzt → Kostenfunktion erhöht
- Lagrangeparameter λ sehr groß wählen, damit constraint eingehalten

Quantum annealer von D-Wave Systems

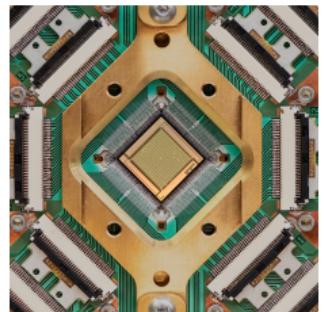
- D-Wave Systems als Hersteller von quantum annealer
- Quantum Processing Unit (QPU) mit QUBITs und couplern
 - QUBITs und coupler sind gewichtet
- neuste Version: 5000 QUBITs mit 15 couplern pro QUBIT
- Nach annealing-Prozess die QUBITs auslesen
 - mögliches Energieminimum gefunden



techcrunch.com

Unterschied zu Quantencomputer

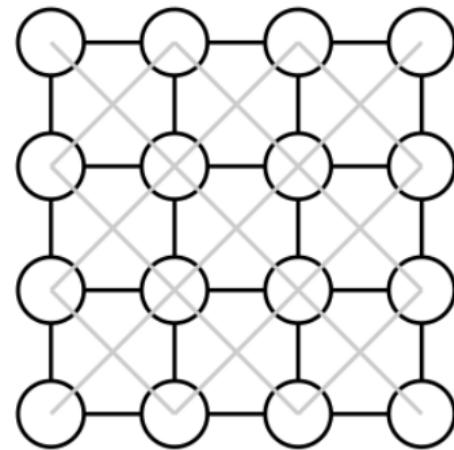
- Quantum annealer nur für kombinatorische Optimierungsprobleme
- Quantencomputer nutzen Quantengatter (unitäre Operationen)
 - kann mehr Problem lösen



dwavesys.com

Embedding

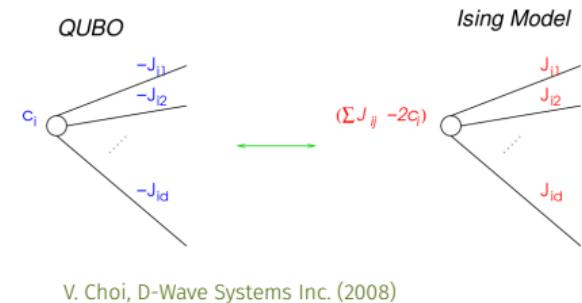
- D-Wave's QPU kann als Graph U gesehen werden
 - Gewichtete Vertices (QUBIT) $i \in V(U)$
 - Gewichtete Kanten (coupler) $ij \in E(U)$
- Gewichte:
 - $h_i(t)$ „QUBIT bias“
 - $\Delta_i(t)$ „tunneling amplitude“
 - $J_{ij}(t)$ „coupler strength“
- formuliere transversalen Ising-Hamiltonian auf Graph G
- $H(t) = \sum_{i \in V(G)} h_i(t) \sigma_i^z + \sum_{ij \in E(G)} J_{ij}(t) \sigma_i^z \sigma_j^z + \sum_{i \in V(G)} \Delta_i(t) \sigma_i^x$
- Eigenergie des Ising-Hamiltonians $\epsilon(s_1, \dots, s_n) = \sum_{i \in V(G)} h_i s_i + \sum_{ij \in E(G)} J_{ij} s_i s_j$
 - spins $s_i \in \{-1, 1\}$
- Suche nach Grundzustandsenergie ist das „Ising Problem“



V. Choi, D-Wave Systems Inc. (2008)

Embedding

- Ising Problem äquivalent zu QUBO Problem auf dem selben Graph G
 - $Y(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i \in V(G)} c_i x_i - \sum_{ij \in E(G)} J_{ij} x_i x_j$ maximieren
 - $x_i \in \{0, 1\}$



V. Choi, D-Wave Systems Inc. (2008)

Ziel

G in U einbetten („subgraph-embedding“) und somit das Ising/QUBO Problem lösen

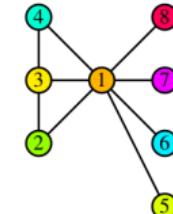
- Problem: Einschränkungen auf U (z.B. Anzahl der coupler) übertragen sich auf G
 - „dummy“-Vertices mit ferromagnetischer Kopplung einführen

Minor embedding

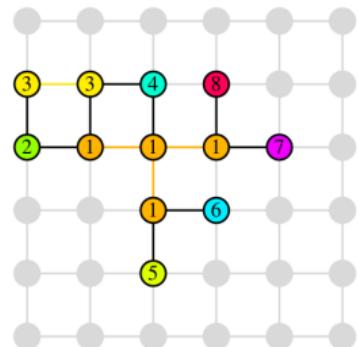
- logischer QUBIT i aus G wird auf subtree T_i physischer QUBITS aus $G_{\text{emb}} \subset U$ abgebildet
- ferromagnetische Kopplung zwischen „dummy“-Vertices muss hinreichend groß sein

Ziel

Parameter des minor-embedding auf ursprüngliche Ising/QUBO Variablen zurückführen



G

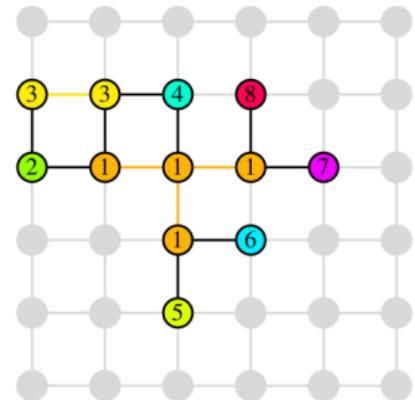


G_{emb}

V. Choi, D-Wave Systems Inc. (2008)

Minor embedding

- $\epsilon^{\text{emb}}(s_1, \dots, s_N) = \sum_{i \in V(G_{\text{emb}})} h'_i s_i + \sum_{ij \in E(G_{\text{emb}})} J'_{ij} s_i s_j$ minimieren
- $\tau : V(G) \times V(G) \rightarrow V(U)$, so dass $i_{\tau(i,j)} \in V(T_i)$, $j_{\tau(j,i)} \in V(T_j)$ mit $i_{\tau(i,j)} j_{\tau(j,i)} \in E(U)$
- $\text{OE}(G_{\text{emb}}) = \cup_{ij \in E(G)} i_{\tau(i,j)} j_{\tau(j,i)}$ sind ursprüngliche coupler
 → $J'_{i_{\tau(i,j)} j_{\tau(j,i)}} = J_{ij}$ für $i_{\tau(i,j)} j_{\tau(j,i)} \in \text{OE}(G_{\text{emb}})$
- ferromagnetische coupler strength F_k^{ij} für $ij \in E(T_i)$
- bias h_i der logischen QUBITS auf physische QUBITS verteilen
 → $\sum_{i_k \in V(T_i)} h'_{i_k} = h_i$



V. Choi, D-Wave Systems Inc. (2008)

Finale Energie

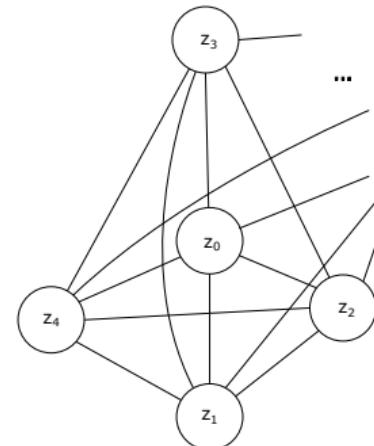
$$\epsilon^{\text{emb}}(s_1, \dots, s_N) = \sum_{i \in V(G)} \left(\sum_{i_k \in V(T_i)} h'_{i_k} s_{i_k} + \sum_{i_p i_q \in E(T_i)} F_i^{pq} s_{i_p} s_{i_q} \right) + \sum_{ij \in E(G)} J_{ij} s_{i_{\tau(ij)}} s_{j_{\tau(ij)}}$$

Fallbeispiel Aisin Corporation

- Zeit für Route ξ : $\text{time}(\xi) = \sum_{t=1}^{k-1} T_{\xi_t, \xi_{t+1}}$
- off-board-demand D_{ij} , der von i nach j gebracht werden muss

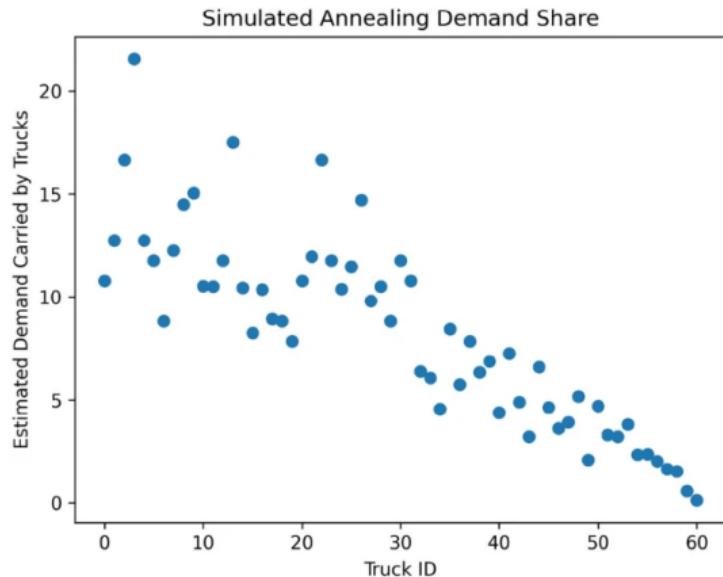
Terme für QUBO-Formulierung:

- $f_{\text{local}}(\{x_i\}) = A_{\text{local}} \sum_t (1 - \sum_i x_{it})^2$
- $f_{\text{time}}(\{x_i\}) = A_{\text{time}} \sum_{ijt} T_{ij} x_{it} x_{jt+1}$
- $f_{\text{demand}}(\{x_i\}) = -A_{\text{demand}} \sum_{ijt} \sum_{\delta=1}^{\delta_*(t)} D_{ij} x_{it} x_{jt+\delta}$ mit $\delta_*(t) = \min(\delta_{\max}, \tau - 1 - t)$
- $f'_{\text{nonredundant}}(\{x_i\}) = A_{\text{nonredundant}} \sum_{ij} I_{ij} \sum_{\delta=2}^{\tau-2} \sum_{t=0}^{\tau-2-\delta} x_{it} x_{jt+1} x_{it+\delta} x_{jt+1+\delta}$
 - Vorsicht: Grad des Polynoms muss noch auf zwei reduziert werden

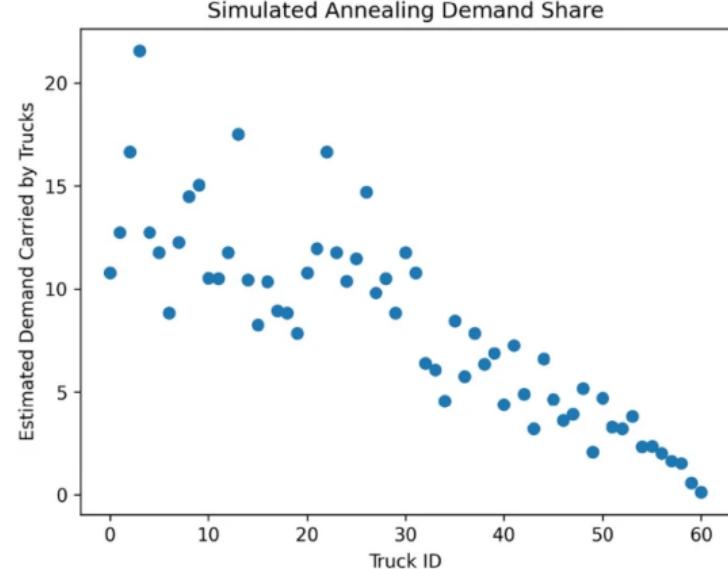


$$A_{\text{local}} = 5000, \quad A_{\text{demand}} = 320, \quad A_{\text{time}} = 0.01, \quad A_{\text{nonredundant}} = 1$$

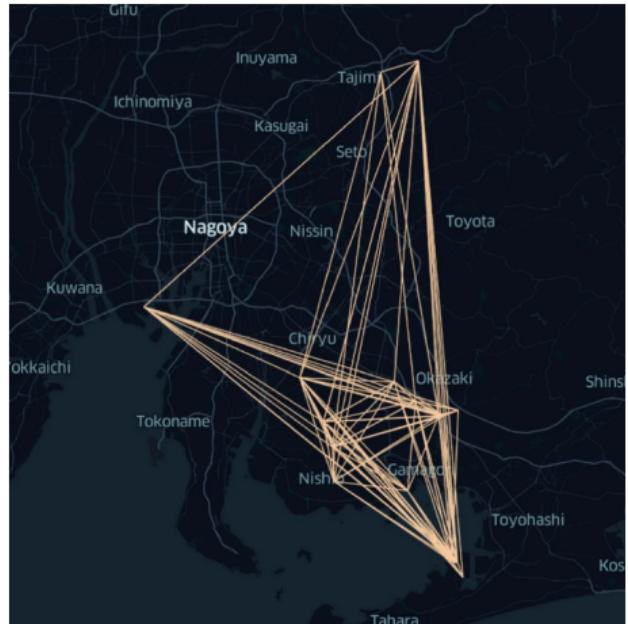
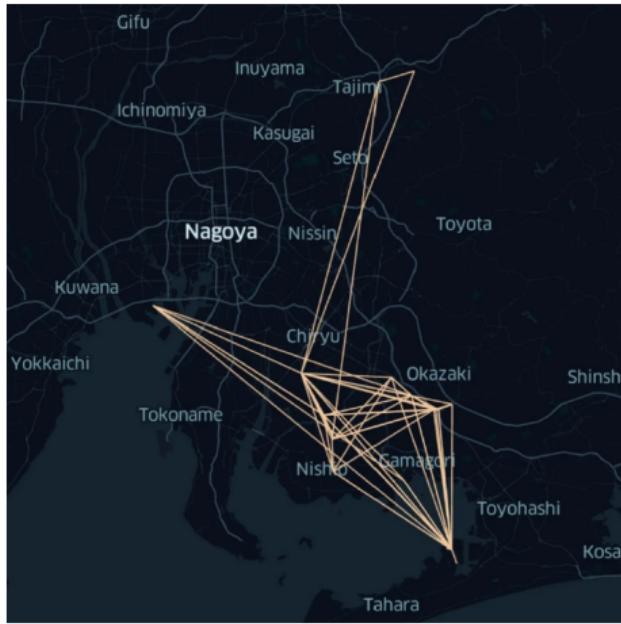
Fallbeispiel Aisin Corporation



Weinberg, S.J., Sanches, F., Ide, T. et al. Sci Rep 13, 4770 (2023)



Fallbeispiel Aisin Corporation



Weinberg, S.J., Sanches, F., Ide, T. et al. Sci Rep 13, 4770 (2023)

Zusammenfassung und Ausblick

Quellen

- Bapst, V. et al., The quantum adiabatic algorithm applied to random optimization problems: The quantum spin glass perspective, ScienceDirect 523 (2013), <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2012.10.002>
- Kadowaki, T. et al. Quantum annealing in the transverse Ising model, PHYSICAL REVIEW E 58 (1998), <https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/9804280>
- Rieffel, E.G., Venturelli, D., O’Gorman, B. et al. A case study in programming a quantum annealer for hard operational planning problems. Quantum Inf Process 14, 1–36 (2015). <https://doi.org/10.1007/s11128-014-0892-x>
- Choi, V. Minor-embedding in adiabatic quantum computation: I. The parameter setting problem. Quantum Inf Process 7, 193–209 (2008). <https://doi.org/10.1007/s11128-008-0082-9>
- Jain, S, Solving the Traveling Salesman Problem on the D-Wave Quantum Computer, Frontiers in Physics, Volume 9, id.646 (2021) ,doi: 10.3389/fphy.2021.760783
- Sangwan, Shabnam. (2018). Literature Review on Travelling Salesman Problem. International Journal of Research. 5. 1152.
- Weinberg, S.J., Sanches, F., Ide, T. et al. Supply chain logistics with quantum and classical annealing algorithms. Sci Rep 13, 4770 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41598-023-31765-8>
- Yarkoni, S et al., Quantum annealing for industry applications: introduction and review, IOP Publishing 85-10 (2022), <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6633/ac8c54>

Backup-Folien für Detailfragen

Details, evtl. Rechnungen und Zahlenwerte für Fragen