КВАНТОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Задача А
Разработка и применение квантового алгоритма поиска для решения задачи об оптимизации транспортного сообщения

Квантовые алгоритмы поиска позволяют находить помеченную запись из N неупорядоченных записей за $O(N^{1/2})$ запросов к БД. Это позволяет достичь полиномиального ускорения работы во многих практически значимых сценариях.

Общая формулировка: разработать квантовый алгоритм решения задачи о нахождении лучшего решения для логистической компании, используя квантовые алгоритмы поиска в неструктурированных БД.

У логистической компании есть N складов ($3 <= N <= 10^6$). Некоторые из складов соединены прямыми рейсами транспорта: между конкретными складами ездят грузовики. Компания хочет выбрать три склада для того, чтобы обновить грузовики, ездящие между этими складами. Необходимо выбрать три склада так, чтобы первый и второй, а также второй и третий из них были соединены прямыми рейсами транспорта.

При этом для всех имеющихся рейсов между парами складов известна стоимость перевозки грузов. При обновлении грузовиков стоимость перевозки грузов в конкретном рейсе уменьшится в два раза. Компания хочет выбрать такую тройку складов, чтобы суммарная стоимость всех рейсов компании максимально уменьшилась.

Напишите квантовый алгоритм, который будет иметь доступ к чёрному ящику, хранящему информацию о рейсах между складами, и выдаст ответ за асимптотически минимальное количество запросов (достаточно асимптотической оценки на количество запросов). Запрос к чёрному ящику принимает аргумент k (число k можно единственным образом представить в виде $k = i * N + j$). Запрос возвращает одно число — стоимость рейса между складами i и j, если склады с этими номерами соединены сообщением, и 0, если нет.

Чёрный ящик держит информацию в квантовой памяти.

Полезные ссылки:

1. Запросная сложность: https://homepages.cwi.nl/~rdewolf/publ/qc/dectree.pdf
2. Квантовые алгоритмы поиска: https://arxiv.org/abs/quant-ph/0504012

А1.

Опишите ваш алгоритм в формализованном виде. Для этого используйте приложенную библиотеку library.zip.

А2.

Оцените (с точностью до мультипликативной константы), какое количество запросов в зависимости от N делает ваш алгоритм в худшем случае. Докажите вашу оценку.

Задача B
Разработка и применение алгоритма цифрового отжига для решения задачи оптимизации инвестиционного портфеля.

Общая формулировка: на основе исторических данных о стоимостях ценных бумаг и алгоритма комбинаторной оптимизации NMFA, симулирующего работу адиабатического отжига, разработайте метод для оптимизации инвестиционного портфеля.

Одной из важнейших проблем в современном мире является решение задачи дискретной квадратичной комбинаторной оптимизации. Данная задача формулируется следующим образом: найдите глобальный минимум квадратичной формы $P_2 : \{0,1\}^N \to \mathbb{R}$, такой что:

$$P_2(\mathbf{s}) = \sum_{i,j}^{N} J_{ij} s_i s_j + \sum_{i}^{N} b_i s_i,$$

Где N – размерность задачи, а все коэффициенты являются действительными числами.

Данная задача встречается в различных областях современной науки и индустрии: от задач моделирования основных состояний химических молекул и моделирования процесса свертывания белков, до задач логистики и оптимизации инвестиционного портфеля. В общей постановке эта задача является NP-сложной, что означает невозможность нахождения ее точного решения известными классическими алгоритмами, реализованными на современных компьютерах. Проблема заключается в том, что количество возможных вариантов ответа при увеличении размерности задачи N возрастает экспоненциально быстро, а точнее как 2^N, что приводит к тому, что при достаточно больших размерностях прямой перебор всех возможных вариантов требует колоссальных вычислительных мощностей, которые пока недоступны для человечества.

Возможным решением данной проблемы является разработка современных квантовых устройств отжига, которые создаются специально для решения такого класса задач.

B1. В первой части задачи вам будет необходимо переформулировать задачу оптимизации инвестиционного портфеля в задачу комбинаторной оптимизации, пользуясь портфельной теорией Марковица* и рассмотреть решение при малой размерности.

Вы имеете массив данных (временной ряд), в котором записаны данные об относительном изменении стоимостей различных ценных бумаг, при этом строки отвечают различным ценным бумагам, а столбцы отвечают дням, когда это изменение стоимости было записано. Пользуясь предоставленными данными и теорией портфельной оптимизации Марковица постройте квадратичную форму для дальнейшего решения задачи дискретной комбинаторной оптимизации. При построении модели необходимо использовать всю длину массива включая изменение стоимости в последний день (последний столбец массива). Необходимо построить матрицу дневных ковариаций на данном временном промежутке и вектор средней дневной доходности.

Квадратичная форма в модели Марковица выглядит следующим образом:

$$Q_2(\mathbf{s}) = \lambda \sum_{i,j}^{N} COV_{ij} s_i s_j - \sum_{i}^{N} \bar{R}_i s_i,$$

где COV – матрица ковариаций, $\bar{R}$ – вектор средней дневной доходности, λ – параметр модели, имеющий смысл веса при слагаемом отвечающим за волатильность модели, $\boldsymbol{s}$ – искомая последовательность из 0 и 1. Где $s_i = 1$ означает, что совершается покупка ценной бумаги с индексом i, $s_i = 0$ означает, что покупка не совершается.

Для размерности N=10 запишите сумму всех элементов матрицы ковариаций, а также сумму всех элементов вектора средней дневной доходности, через пробел с точностью до 5-го знака после запятой. Коэффициент перед слагаемым, отвечающим за волатильность, зафиксируйте и возьмите равным $\lambda = 1$

* Портфельная теория Марковица, разработана Гарри Марковицем в 1952 году и, за которую, он был удостоен Нобелевской премии по экономике в 1990 году. По этой теории с математической точки зрения задача по формированию оптимального портфеля представляла собой задачу квадратичной оптимизации при линейных

ограничениях. Иногда в англоязычных статьях можно также встретить название Modern Portfolio Theory.

B2. Для размерности 10 решите задачу дискретной квадратичной комбинаторной оптимизации с параметром $\lambda = 1$.

Найдите минимальное значение построенной формы. В качестве ответа запишите полученное число с точностью до 4-го знака после запятой.

B3. В равновесной модели Марковица оптимизация полученной квадратичной формы осуществляется в виде нахождения оптимальной последовательности из 0 и 1. В реальных физических устройствах квантового отжига и их симуляторах, как правило, решением является последовательность из спинов, которые могут принимать значения -1 и 1, а роль квадратичной формы для дальнейшей оптимизации выполняет функция энергии, записанная в модели Изинга.
Действительно, квадратичная форма в задаче дискретной комбинаторной оптимизации совпадает по форме с гамильтонианом модели Изинга для цепочки спинов в магнитном поле.

Модель Изинга имеет широкое применение в физике и прикладных задачах и детально обсуждается в учебнике M. Le Bellac "Quantum and statistical field theory". Рассмотрим одномерную модель Изинга, в которой все N спинов взаимодействуют со всеми с константой взаимодействия J/N. Гамильтониан такой системы спинов описывается формулой:

$$\mathrm{H} = -\frac{J}{N}\sum_{i,j} S_i S_j\,; \quad S_i = \pm 1; \quad S_i^2 = 1,$$

где суммирование ведётся по всем парам индексов и каждый спин может принимать значение +1 или -1.

Для одномерной цепочки из N = 6 спинов найдите среднюю намагниченность на спин в некоторой конфигурации, если число конфигураций с такой средней намагниченностью на спин равно 15. В ответе приведите обыкновенную дробь (в формате 1/2).

B4. Вернёмся к задаче оптимизации. Осуществите переход от квадратичной формы в модели Марковица в формализм модели Изинга.

Определите для размерности 10 минимальное значение энергии Изинга и сравните с оптимальным значением квадратичной формы, полученной в модели Марковица.

B5. Одним из физических устройств, упомянутых выше, способных решать задачу квадратичной комбинаторной оптимизации является оптическая когерентная машина Изинга (ОКМИ) [ссылки 1,2,3]. Данное устройство является крайне перспективным и активно исследуется научным сообществом как с практической, так и с теоретической точки зрения. Теоретическое исследование этой машины привело к разработке нового поколения квантово-вдохновленных алгоритмов, которые моделируют работу ОКМИ на классическом компьютере и позволяют достаточно эффективно решать задачи дискретной комбинаторной оптимизации без использования реального физического устройства. Один из таких квантово-вдохновленных алгоритмов, демонстрирующий хорошие результаты, является NMFA (Noisy intermediate field annealing), описание которого приводится в статье arxiv:1806.08422.

Реализуйте данный алгоритм согласно статье arxiv:1806.08422, и примените разработанный метод к решению задачи портфельной комбинаторной оптимизации, используя модель Изинга, полученной в пункте B4.

Решите при помощи данного метода задачи размерности N = 10, 50 и 150, подберите для каждой размерности оптимальный набор параметров, на котором достигается наилучшее (минимальное) значение квадратичной формы.

На основе результатов реализации алгоритма подготовьте презентацию, в которой необходимо отразить:

1. Для каждой размерности:
   1.1 Оптимальный набор параметров алгоритма;
   1.2 График эволюции амплитуд при в течение одного запуска алгоритма;
   1.3 График эволюции температуры T в течение одного запуска алгоритма;
   1.4 Наилучшие (минимальные) достигнутые значения квадратичной формы;
   1.5 Вероятность нахождения этого минимального значения;

Отразите полученные результаты в презентации. ***Важно в презентации нельзя указывать свой личные данные.***

Будьте готовы объяснить принцип работы физического устройства оптической когерентной машины Изинга на финальном туре, а также ответить на другие вопросы жюри.