Exercicio_aula4

quinta-feira, 24 de outubro de 2024 14:57

Exercicio_...

EXTECAMP

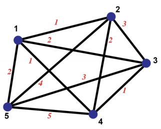
Computação Quântica
Algoritmos de otimização e
ML Quântico

Exercícios: Aula 4

Estes exercícios têm como objetivo proporcionar uma compreensão prática dos conceitos de otimização combinatória e como problemas clássicos podem ser abordados utilizando algoritmos quânticos. Especificamente, exploraremos o problema de Max-Cut, que envolve a partição de um grafo para maximizar a soma dos pesos das arestas entre conjuntos de vértices. Estes exercícios permitirão uma compreensão dos fundamentos do problema, bem como a aplicação de técnicas de corte e análise de grafos.

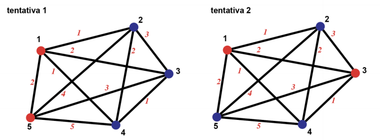
Max-Cut

A fim de entendermos as implicações do problema de Max-Cut, considere um sistema de várias entidades que interagem e influenciam umas às outras. Essas entidades podem ser representadas como vértices de um grafo, enquanto suas interações são modeladas como arestas conectando pares de vértices. O peso de cada aresta representa a força da interação entre duas entidades. Por exemplo, ao modelar influências entre consumidores em uma rede social, os pesos das arestas indicam o quanto um consumidor influencia outro. O objetivo é dividir o grafo em dois subconjuntos, de modo a maximizar a soma dos pesos das arestas entre esses conjuntos, refletindo um corte ótimo com, por exemplo, potenciais aplicações em estratégias de marketing.
Vamo supor como exemplo o grafo abaixo, onde temos 5 indivíduos sendo os pesos das arestas dados pelos números em vermelho.



Como mencionado, o objetivo é particionar o grafo de forma a maximizar a soma dos pesos das arestas que conectam vértices de diferentes conjuntos.

Para ilustrar, vejamos duas tentativas de segmentação:



Para calcular o valor do corte no problema de Max-Cut, somamos os pesos das arestas que conectam vértices de diferentes cores. No caso da tentativa 1, temos um conjunto vermelho (vértices 1 e 5) e um conjunto azul (vértices 2, 3 e 4). As arestas que cruzam entre esses conjuntos são:

- Aresta entre 1 e 2: peso 1
- Aresta entre 1 e 3: peso 2
- Aresta entre 1 e 4: peso 1
- Aresta entre 5 e 2: peso 4
- Aresta entre 5 e 3: peso 3
- Aresta entre 5 e 4: peso 5

Somando esses pesos, obtemos: $1 + 2 + 1 + 4 + 3 + 5 = 16$. Assim, o valor do corte associado à divisão escolhida é 16.

Com base nisso, resolva os seguintes problemas:

1. Determine o valor do corte associado à tentativa 2.
2. Sabendo que o problema de Max-Cut pode ser formulado como um problema de otimização quadrática, onde o valor máximo do corte é calculado usando a função de custo:

$$C(x) = \sum_{i,j} w_{ij}\, x_i (1 - x_j),$$

onde w_{ij} representa o peso da aresta entre os vértices i e j e $x_i \in \{0, 1\}$ é uma variável binária que indica a partição do vértice i (por exemplo, 0 para vermelho e 1 para azul), calcule $C(x)$ para as configurações das tentativas 1 e 2 usando a função de custo acima.

3. Sabendo que o corte máximo contém 2 vértices vermelhos e 3 vértices azuis, calcule $C(x)$ para as outras 8 combinações possíveis (diferentes da tentativa 1 e 2), determinando assim o valor do corte máximo.

Trascrição para o Hamiltoniano

Como vimos em aula, é sempre possível descrever um problema na formulação QUBO através de um Hamiltoniano. A ideia é converter a função de custo $C(x)$ para uma forma quântica, onde os valores das variáveis binárias x_i correspondem aos estados de um sistema quântico. Nesse contexto, o problema de Max-Cut pode ser formulado em termos de um Hamiltoniano H cuja energia é minimizada quando o valor de $C(x)$ é maximizado. Para escrever o Hamiltoniano, mapeamos as variáveis x_i em termos das matrizes de Pauli

$$x_i = \frac{1-\sigma_i^z}{2}. \tag{1}$$

Com base nisso, resolva os seguintes problemas:

1. Realize a substituição $x_i = \frac{1-\sigma_i^z}{2}$ na função de custo $C(x)$ para o problema de Max-Cut, e reescreva $C(x)$ em termos dos operadores de Pauli Z. Mostre que o Hamiltoniano final é então reduzido apenas ao termo de interação:

$$H = -\frac{1}{4}\sum_{i,j} w_{ij}\,\sigma_i^z\sigma_j^z + \text{constante} \tag{2}$$

onde a constante é simplesmente $\sum_{i,j}\frac{w_{ij}}{4}$, que não afeta o resultado de otimização e pode ser ignorada se desejarmos apenas encontrar a configuração que minimiza a energia.

1. TENTATIVA 2

1 e 2 : 1
1 e 4 : 1
1 e 5 : 2
3 e 2 : 3
3 e 4 : 1
3 e 5 : 3

11

2.

$$C(x) = \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{5} w_{ij}\, x_i(1-x_j)$$

VAMOS DESENVOLVER UMA EXPRESSÃO GERAL

$$C(x) = w_{11} x_1(1-x_1) + w_{12} x_1(1-x_2) + w_{13} x_1(1-x_3) + w_{14} x_1(1-x_4) + w_{15} x_1(1-x_5)$$
$$+ w_{21} x_2(1-x_1) + w_{22} x_2(1-x_2) + w_{23} x_2(1-x_3) + w_{24} x_2(1-x_4) + w_{25} x_2(1-x_5)$$
$$+ w_{31} x_3(1-x_1) + w_{32} x_3(1-x_2) + w_{33} x_3(1-x_3) + w_{34} x_3(1-x_4) + w_{35} x_3(1-x_5)$$
$$+ w_{41} x_4(1-x_1) + w_{42} x_4(1-x_2) + w_{43} x_4(1-x_4) + w_{44} x_4(1-x_4) + w_{45} x_4(1-x_5)$$
$$+ w_{51} x_5(1-x_1) + w_{52} x_5(1-x_2) + w_{53} x_5(1-x_3) + w_{54} x_5(1-x_4) + w_{55} x_5(1-x_5)$$

Como não existem arestas ligando um ponto a ele mesmo o peso de $w_{ij} = 0$, QUANDO $i = j$.

Sendo assim, vamos simplificar a expressão acima

$$C(x) = x_1\left[w_{12}(1-x_2) + w_{13}(1-x_3) + w_{14}(1-x_4) + w_{15}(1-x_5)\right] +$$
$$+ x_2\left[w_{21}(1-x_1) + w_{23}(1-x_3) + w_{24}(1-x_4) + w_{25}(1-x_5)\right] +$$
$$+ x_3\left[w_{31}(1-x_1) + w_{32}(1-x_2) + w_{34}(1-x_4) + w_{35}(1-x_5)\right] +$$
$$+ x_4\left[w_{41}(1-x_1) + w_{42}(1-x_2) + w_{43}(1-x_3) + w_{45}(1-x_5)\right] +$$
$$+ x_5\left[w_{51}(1-x_1) + w_{52}(1-x_2) + w_{53}(1-x_3) + w_{54}(1-x_4)\right] \qquad (1)$$

TENTATIVA 1

$x_1 = x_5 =$ VERMELHO $= 0$, $x_2 = x_3 = x_4 =$ AZUL $= 1$

PORTANTO $1-x_2 = 1-x_3 = 1-x_4 = 0$ e $1-x_1 = 1-x_5 = 1$

SEGUINDO A EQ. (1), OS ÚNICOS TERMOS DIFERENTE DE ZERO SERÃO OS QUE POSSUEM x_2, x_3 e x_4 FORA DOS COLCHETES. DENTRO DESSES COLCHETES APENAS OS TERMOS QUE POSSUEM $1-x_1$ e $1-x_5$ SERÃO IGUAIS A UM, OS OUTROS SERÃO ZERO. ASSIM PRECISO APENAS SABER OS PESOS, w_{21}, w_{25}, w_{31}, w_{35}, w_{41}, w_{45}

$C(x) = 1+4+2+3+1+5 = 16$

TENTATIVA 2

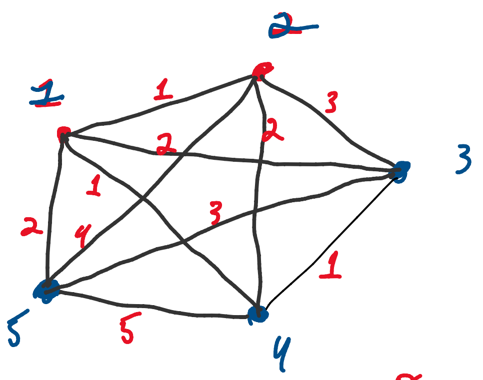
$x_1 = x_3 =$ VERMELHO $= 0$, $x_2 = x_4 = x_5 =$ AZUL $= 1$

PORTANTO, $1-x_2 = 1-x_4 = 1-x_5 = 0$ e $1-x_1 = 1-x_3 = 1$

ASSIM OS PESOS RELEVANTES SERÃO: $w_{21}, w_{23}, w_{41}, w_{43}, w_{51}, w_{53}$

$C(x) = 1+3+1+1+2+3 = 11$

TENTATIVA 3



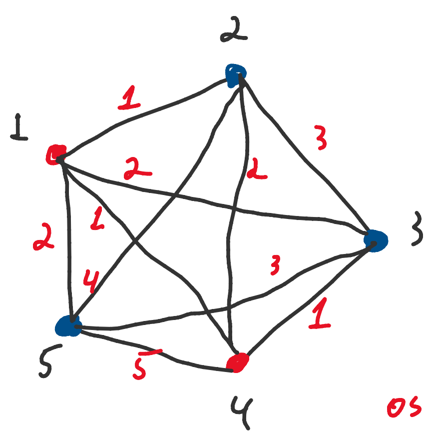
$$\begin{cases} x_1 = x_2 = \text{VERMELHO} = 0 \\ x_3 = x_4 = x_5 = \text{AZUL} = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1-x_3 = 1-x_4 = 1-x_5 = 0 \\ 1-x_1 = 1-x_2 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{31}, w_{32}, w_{41}, w_{42}$, w_{51}, w_{52}

ASSIM, $C(x) = 2+3+1+2+2+4 = 14$

TENTATIVA 4



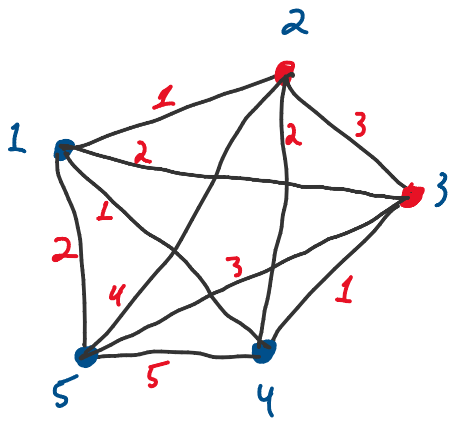
$$\begin{cases} x_1 = x_4 = 0 \\ x_2 = x_3 = x_5 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1-x_2 = 1-x_3 = 1-x_5 = 0 \\ 1-x_1 = 1-x_4 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO, $w_{21}, w_{24}, w_{31}, w_{34}$, w_{51}, w_{54}

$c(x) = 1+2+2+1+2+5 = 13$

TENTATIVA 5



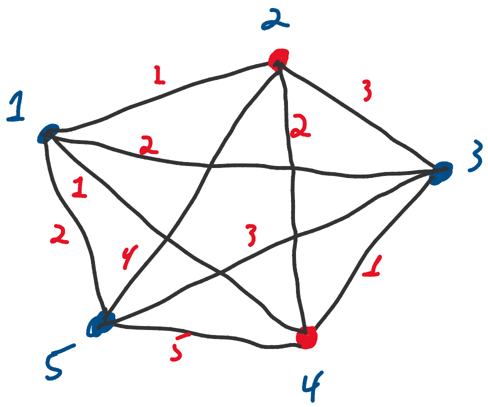
$$\begin{cases} x_2 = x_3 = 0 \\ x_1 = x_4 = x_5 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1-x_1 = 1-x_4 = 1-x_5 = 0 \\ 1-x_2 = 1-x_3 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{12}, w_{13}, w_{42}, w_{43}, w_{52}, w_{53}$

$c(x) = 1+2+2+1+4+3 = 13$

TENTATIVA 6



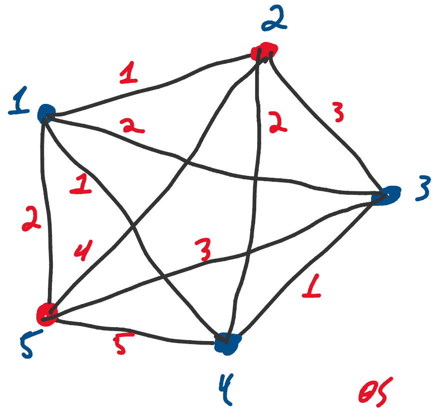
$$\begin{cases} x_2 = x_4 = 0 \\ x_1 = x_3 = x_5 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1-x_1 = 1-x_3 = 1-x_5 = 0 \\ 1-x_2 = 1-x_4 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{12}, w_{14}, w_{32}, w_{34}, w_{52}, w_{54}$

$c(x) = 1+1+3+1+4+5 = 15$

TENTATIVA 7



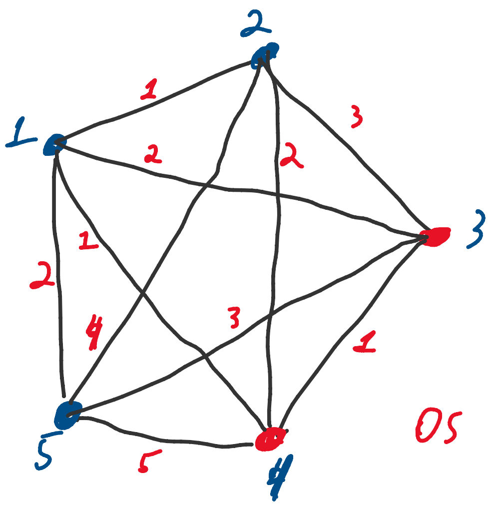
$$\begin{cases} x_2 = x_5 = 0 \\ x_1 = x_3 = x_4 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 - x_1 = 1 - x_3 = 1 - x_4 = 0 \\ 1 - x_2 = 1 - x_5 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{12}, w_{15}, w_{32}, w_{35}, w_{42}, w_{45}$

$c(x) = 1 + 2 + 3 + 3 + 2 + 5 = 16$

TENTATIVA 8



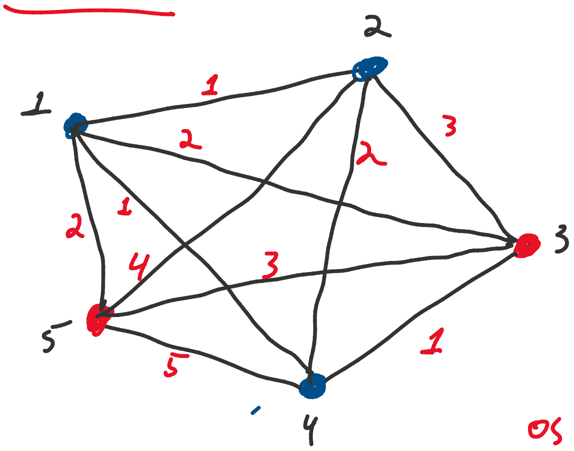
$$\begin{cases} x_3 = x_4 = 0 \\ x_1 = x_2 = x_5 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 - x_1 = 1 - x_2 = 1 - x_5 = 0 \\ 1 - x_3 = 1 - x_4 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{13}, w_{14}, w_{23}, w_{24}, w_{53}, w_{54}$

$c(x) = 2 + 3 + 3 + 1 + 2 + 5 = 16$

TENTATIVA 9



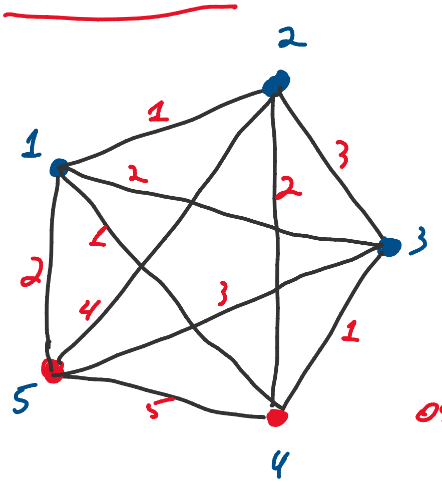
$$\begin{cases} x_3 = x_5 = 0 \\ x_1 = x_2 = x_4 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 - x_1 = 1 - x_2 = 1 - x_4 = 0 \\ 1 - x_3 = 1 - x_5 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS RELEVANTES SÃO: $w_{13}, w_{15}, w_{23}, w_{25}, w_{43}, w_{45}$

$c(x) = 2 + 2 + 3 + 4 + 1 + 5 = 17$

TENTATIVA 10



$$\begin{cases} x_4 = x_5 = 0 \\ x_1 = x_2 = x_3 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1-x_1 = 1 - x_2 = 1 - x_3 = 0 \\ 1-x_4 = 1-x_5 = 1 \end{cases}$$

OS PESOS SÃO: $w_{14}, w_{15}, w_{24}, w_{25}, w_{34}, w_{35}$

$$C(x) = 1+2+2+4+1+3 = 13$$

O VALOR DE CORTE MÁXIMO É O DA TENTATIVA 9

TRANSIÇÃO PARA O HAMILTONIANO

3.

$$C(x) = \sum_{i,j} w_{ij} \; x_i (1 - x_j)$$

FAZENDO A SUBSTITUIÇÃO: $x_i = \dfrac{1-\sigma_i^z}{2}$

$$C(x) = \sum_{i,j} w_{ij} \left[\frac{1-\sigma_i^z}{2}\right]\left[1 - \left(\frac{1-\sigma_j^z}{2}\right)\right]$$

$$= \sum_{i,j} w_{ij} \left(\frac{1-\sigma_i^z}{2}\right)\left[\frac{2-1+\sigma_j^z}{2}\right] = \sum_{i,j} w_{ij} \left(\frac{1-\sigma_i^z}{2}\right)\left(\frac{1+\sigma_j^z}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{i,j} w_{ij} \left(1 + \cancel{\sigma_j^z} - \cancel{\sigma_i^z} - \sigma_i^z \sigma_j^z\right)$$

COMO ESTAMOS SOMANDO SOBRE TODOS OS i e j OS TERMOS DO MEIO SE CANCELAM. ASSIM,

$$C(x) = -\frac{1}{4} \sum_{i,j} \sigma_i^z \sigma_j^z w_{ij} + \sum_{i,j} \frac{w_{ij}}{4}$$

$$= -\frac{1}{4} \sum_{i,j} w_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + \text{constant}$$