II - QUBO

Programação não-linear • Otimização Inteira

Pedro Maciel Xavier

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
PESC/COPPE/UFRJ

Sumário

Tópicos Anteriores

Compreender melhor:

1. O princípio da dualidade (e suas demonstrações).
2. A relação entre o lagrangeano de um sistema e seu hamiltoniano.
3. Modelagem QUBO

Ising Model

Definição (*Ising Model*)

O modelo de Ising descreve a energia do sistema através da função hamiltoniana $\mathbb{H}$ para uma determinada configuração $\boldsymbol{\sigma}$.

$$\mathbb{H}(\boldsymbol{\sigma}) = -\sum_{i} \mathbf{h}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i - \sum_{i<j} \mathbf{J}_{i,j} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j$$

QUBO

Definição (*Quadratic Unconstrained Binary Optimization*)

Um problema de otimização é assim denominado se pode ser escrito na forma

$$\text{minimizar } f(\mathbf{x})$$
$$\text{sujeito a } \mathbf{x} \in \{0,1\}^n$$

onde $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\intercal \mathbf{Q}\,\mathbf{x}$ para $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Mais especificamente, $\mathbf{Q}$ é uma matriz simétrica ou triangular superior.

QUBO

Observação

É muito importante, para a formulação, considerar a idempotência das variáveis binárias. Isto é, se $x \in \{0,1\}$ *então* $x^2 = x$. *Indutivamente,* $x^n = x, n > 0$. *Isso faz com que a diagonal principal da matriz* $\mathbf{Q}$ *represente os termos lineares.*

Deste fato vem também uma maneira de reduzir o grau das conexões. Como vimos anteriormente, qualquer termo de grau elevado mas com apenas um variável pode ser reduzido ao caso linear. De maneira análoga, termos de qualquer grau em duas variáveis pode ser trazido ao caso quadrático.

Annealing

O *Annealing* é um dos processos mais populares para solucionar o *QUBO*. Dentre os principais métodos desta classe estão:

- *Simulated Annealing*
- *Quantum Annealing* (*D-Wave*)
- *Digital Annealing* (*Fujitsu*)

Annealing

O *Annealing* é um dos processos mais populares para solucionar o *QUBO*. Dentre os principais métodos desta classe estão:

- *Simulated Annealing*
- *Quantum Annealing* (*D-Wave*)
- *Digital Annealing* (*Fujitsu*)

De um modo geral, é difícil encontrar soluções de qualidade em computadores convencionais. É um problema NP-Difícil.

Satyrus

No contexto do Satyrus, temos uma equação de energia a minimizar dada por

$$\begin{aligned}\mathbb{E} &= \mathbb{E}_{\text{opt}} + \mathbb{E}_{\text{int}} \\ &= \sum_i \mathcal{H}\left(\varphi_i\right) + \sum_j \boldsymbol{\lambda}_j \mathcal{H}\left(\neg\varphi_j\right)\end{aligned}$$

onde λ_j é a penalidade associada à j-ésima restrição de integridade e $\mathcal{H}\left(\,\cdot\,\right)$ é o mapeamento. Portanto, é possível escrever um problema modelado pelo Satyrus como

$$\begin{aligned}\text{minimizar } & f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda} \cdot g(\mathbf{x}) \\ \text{sujeito a } & \mathbf{x} \in \{0,1\}^n\end{aligned}$$

Satyrus

Resta saber se é possível escrever $f(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda} \cdot g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\intercal \mathbf{Q}\, \mathbf{x}$. Como, por construção, tanto $f(\mathbf{x})$ quanto $g(\mathbf{x})$ são polinômios nas componentes de $\mathbf{x}$, isso pode ser feito ao aplicar uma redução dos termos com três ou mais variáveis.

Redução do grau

Redução por seleção mínima[2]

$$xyz = \max_{w} \{w(x + y + z - 2)\}$$

Seja $a \in \mathbb{R}$.

$$axyz = \begin{cases} aw(x + y + z - 2) & a < 0 \\ a[(1 - w)(1 - x - y - z) + xy + yz + xz] & a > 0 \end{cases}$$

Redução por substituição[2]

A técnica consiste em escrever a restrição $z \iff x \wedge y$ como

$$P(x, y; w) = xy - 2(x + y)w + 3w$$

Em seguida, escrevemos

$$xyz = \min_{w} \{wz + \alpha P(x, y, w)\}$$

onde $\alpha > 1$ é uma constante de penalidade.

Referências

Fred Glover, Gary Kochenberger, Yu Du
Quantum Bridge Analytics I: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models.

D-Wave Systems
Problem-Solving Handbook
https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_handbook_3.html

Endre Boros, Peter L. Hammer
Pseudo-Boolean optimization
Elsevier, Discrete Applied Mathematics, 2002.