Verteidigung der Doktorarbeit

Combinatorial Problems in Programming Quantum Annealers

Elisabeth Lobe

High-Performance Computing
Institut für Softwaretechnologie
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.

13. Mai 2022

DLR

OTTO VON GUERICKE UNIVERSITÄT MAGDEBURG

Aktuell

- „größter Quantencomputer außerhalb Nordamerikas“ im Forschungszentrum Jülich in Betrieb genommen
- kanadische Firma D-Wave Systems Inc.
  - verkaufte erste kommerziell erhältliche Quantenarchitektur
  - Kunden: Google/NASA,
    Lockhead Martin/USC,
    Los Alamos National Laboratory
- D-Wave Advantage System
  - 5. Generation
  - über 5000 Qubits
  - 15 Kopplungen pro Qubit
  - über 35 000 Kopplungen

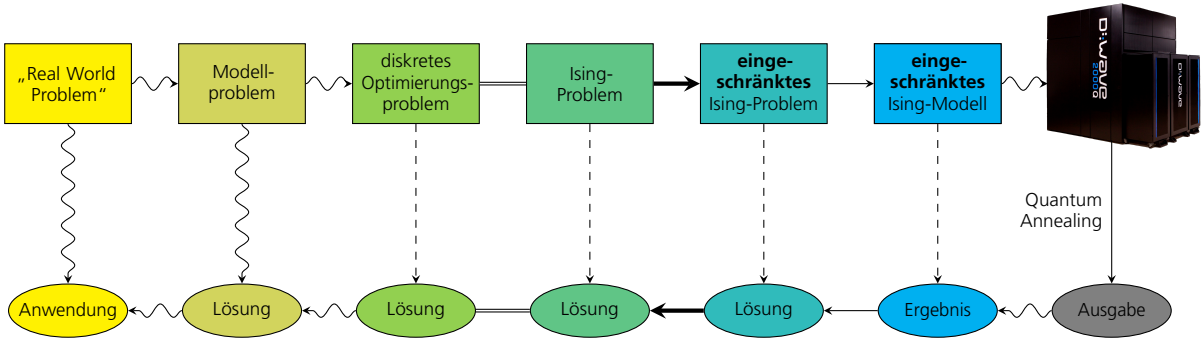
Neue Zürcher Zeitung

In Jülich rechnen jetzt die Quanten – können sie mehr als klassische Computer?

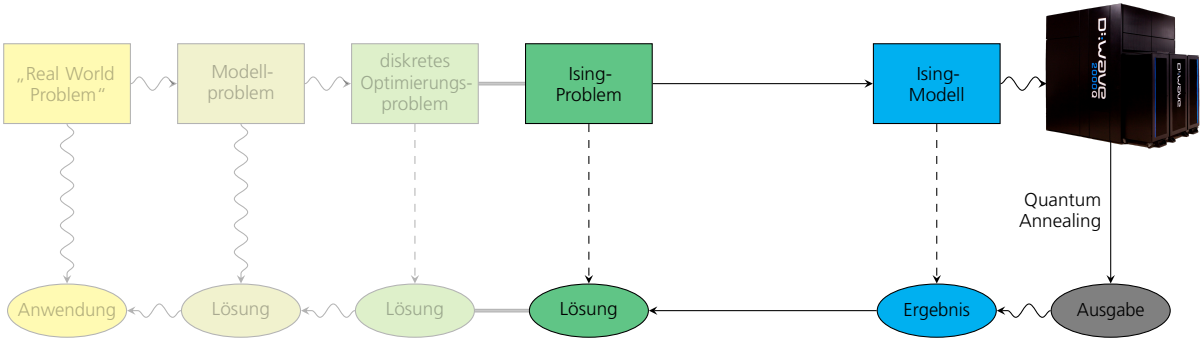
Das Forschungszentrum Jülich in Nordrhein-Westfalen hat einen Quantencomputer des kanadischen Herstellers D-Wave Systems erworben. Noch ist unklar, ob er echte Vorteile gegenüber klassischen Rechnern hat.

Christian J. Meier
18.02.2022, 11.42 Uhr

Einordnung


„Real World Problem“
Modell-problem
diskretes Optimierungs-problem
Ising-Problem
einge-schränktes Ising-Problem
einge-schränktes Ising-Modell
D-WAVE
Quantum Annealing
Anwendung
Lösung
Lösung
Lösung
Lösung
Ergebnis
Ausgabe

Einordnung

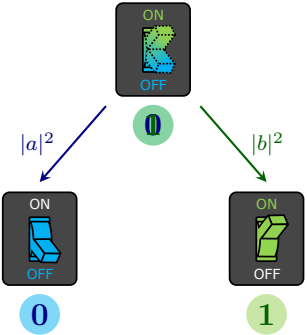

„Real World Problem“
Modell-problem
diskretes Optimierungs-problem
Ising-Problem
Ising-Modell
D-WAVE
Quantum Annealing
Anwendung
Lösung
Lösung
Lösung
Ergebnis
Ausgabe

Quantenbits (Qubits)

- Wert eines klassischen Bits ist
  entweder „0“ **oder** „1“

- Zustand eines Quantenbits ist
  Superposition von „0“ **und** „1“

$$|\phi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \quad \text{mit } a, b \in \mathbb{C}, |a|^2 + |b|^2 = 1$$

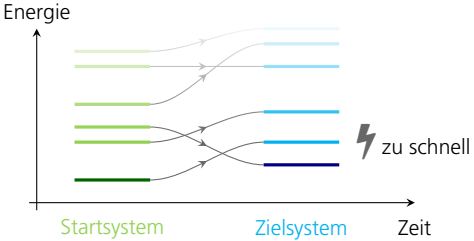


- Messung verändert Zustand in
  - $|\phi\rangle = |0\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit $|a|^2$
  - $|\phi\rangle = |1\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit $|b|^2$
  - ➔ Ergebnis entspricht klassischer Information

- Qubitregister – Quantensystem aus mehreren Qubits

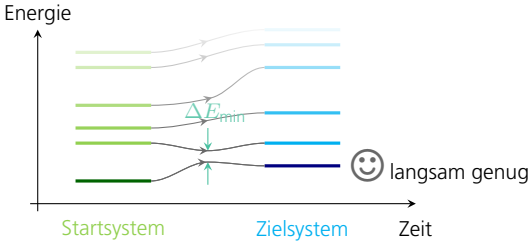
Umsetzung des Adiabatischen Theorems

- Quantensysteme
  - haben diskrete Energieniveaus und tendieren zu Grundzustand mit niedrigster Energie
  - können in ein anderes überführt werden durch Änderung äußerer Einflüsse



Umsetzung des Adiabatischen Theorems

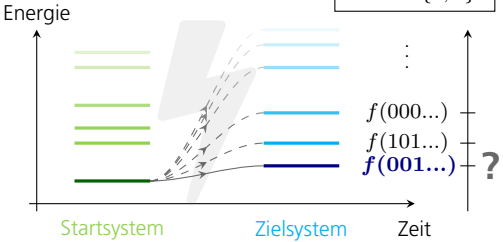
- Quantensysteme
  - haben diskrete Energieniveaus und tendieren zu Grundzustand mit niedrigster Energie
  - können in ein anderes überführt werden durch Änderung äußerer Einflüsse
- Bei adiabatischer Zustandsänderung wird Energielevel beibehalten
  - minimale Laufzeit abhängig vom „Spectral Gap" in $\mathcal{O}\left(\Delta E_{\text{min}}^{-2}\right)$



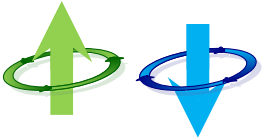
Umsetzung des Adiabatischen Theorems

- Quantensysteme
  - haben diskrete Energieniveaus und tendieren zu Grundzustand mit niedrigster Energie
  - können in ein anderes überführt werden durch Änderung äußerer Einflüsse
- Bei adiabatischer Zustandsänderung wird Energielevel beibehalten
  - minimale Laufzeit abhängig vom „Spectral Gap“ in $\mathcal{O}\left(\Delta E_{\text{min}}^{-2}\right)$
- → Lösen von Minimierungsproblemen
  - Kodieren der Lösungen in Zuständen
  - Grundzustand entspricht Optimallösung
  - nur unter Idealbedingungen
  - → Quanten Annealer: Heuristischer Löser

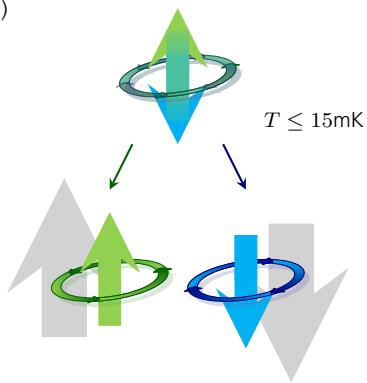
$$\min f(x) \quad \text{s.t. } x \in \{0,1\}^n$$

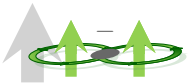


Realisierung der Qubits

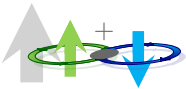


- über Supraleitende Schleifen
  - elektrischer Strom induziert einen Spin
  - bei tiefen Temperaturen Spins in Superposition (Grundzustand)
  - beeinflussbar durch äußeres Magnetfeld
- paarweise überlappende Schleifen → Kopplung von Qubits
  - mit einstellbarem Magnetismus
  - lokale Interaktionen beschrieben durch Ising-Modell
  - → realisieren eine quadratische Funktion





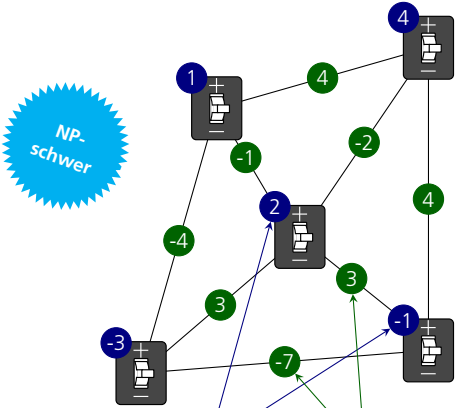
ferromagnetisch



antiferromagnetisch

Optimierer für Ising-Probleme

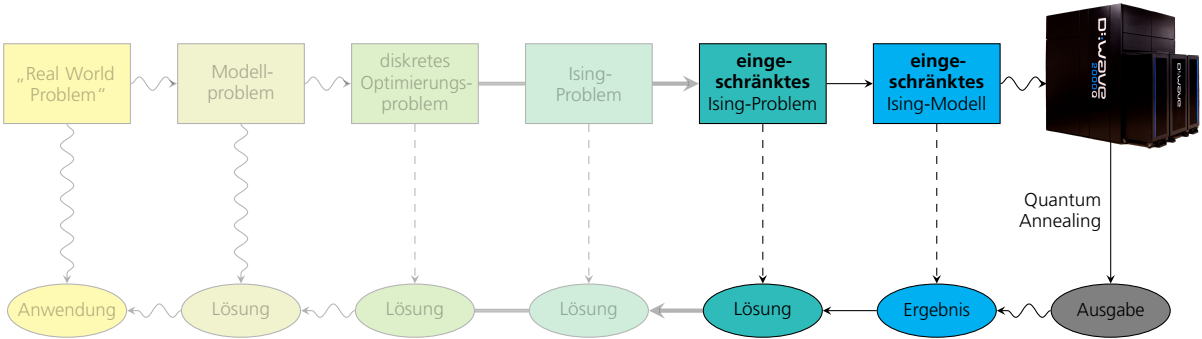
- Minimierung
  - über Spin-Variablen
  - einer quadratischen Zielfunktion
  - ohne Nebenbedingungen
- „Programmieren“
  - Bereitstellen der Gewichte $W \in \mathbb{R}^V$ und Stärken $S \in \mathbb{R}^E$



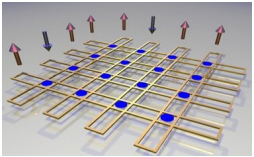
$$\min \sum_{v \in V} W_v \, s_v + \sum_{vw \in E} S_{vw} \, s_v s_w$$

s.t. $s \in \{-1, +1\}^V$

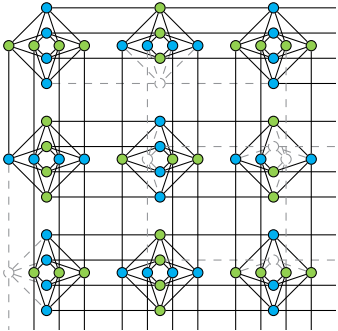
Einordnung


„Real World Problem“
Modell-problem
diskretes Optimierungs-problem
Ising-Problem
einge-schränktes Ising-Problem
einge-schränktes Ising-Modell
D-WAVE
Quantum Annealing
Anwendung
Lösung
Lösung
Lösung
Lösung
Ergebnis
Ausgabe

Einschränkung – Interaktionsgraph



- Hardwarestruktur des Quanten-Chips
  - 8 Qubits pro Einheitszelle formen $K_{4,4}$
  - Einheitszellen im Schachbrettmuster angelegt
  - definiert Chimera-Graphen $C_{n,m}$ mit n Reihen und m Spalten
- „defekte“ Qubits
  - abgeschaltet da Abweichung von Erwartungswerten
  - konstant bis Neukalibrierung ($\geq$ 1 Jahr)
- Aktuell
  - Chimera-Architektur `DW2000Q` ($C_{16,16}$)
  - neu: Pegasus-Architektur `Advantage5.1` (P_{16})



Einschränkung – Parameter

- Software: nur Höhe der Gewichte und Stärken begrenzt
  - Skalierung der gesamten Zielfunktion

$$W \in [-2, 2]^{V(C)},$$
$$S \in [-1, 1]^{E(C)}$$

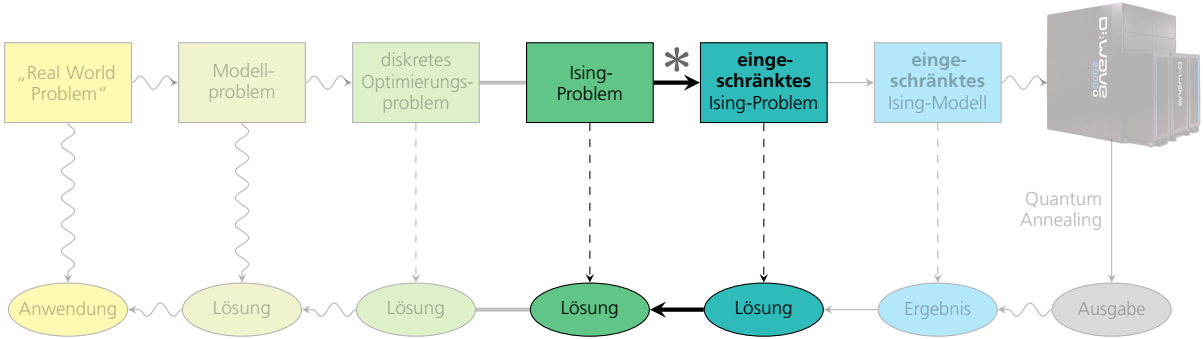
- Hardware: begrenzte Parameterpräzision
  - Koeffizienten „zu nah aneinander“ ➔ Maschine kann Werte nicht auflösen
  - Problem ist falsch spezifiziert ➔ Lösungen entsprechen nicht denen des Originalproblems
  - ➔ Erfolgswahrscheinlichkeit entscheidend beeinflusst

- Bevorzugte Koeffizientenverteilung
  - Grenzen $m, n \in \mathbb{N}$ unklar
  - Ansatz bei ganzzahligen Problemformulierungen: Minimieren des maximalen absoluten Koeffizienten

$$W \in \{-m, -m+1, ..., m\}^{V(C)},$$
$$S \in \{-n, -n+1, ..., n\}^{E(C)}$$

$$C_{\text{max}} = \max\left\{\|W\|_\infty, \|S\|_\infty\right\}$$

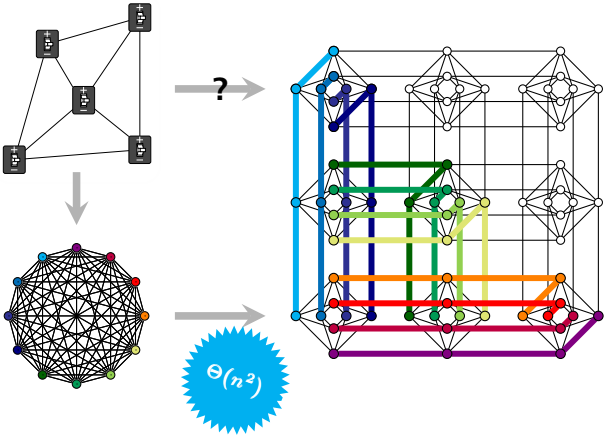
Einordnung



* **Einbettung** und **Gewichtsverteilung**

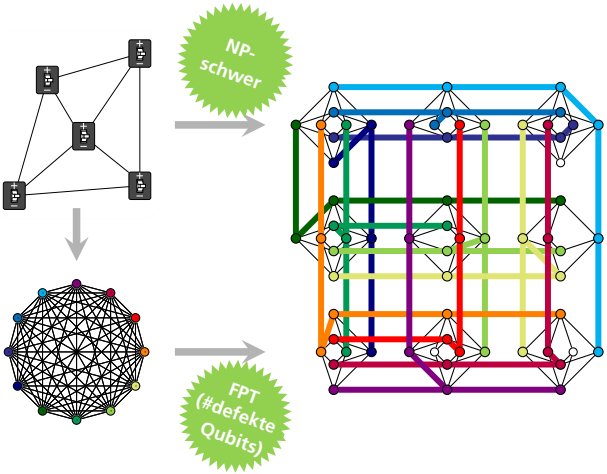
Einbettung in den Chimera-Graphen

- durch Zusammenfassen mehrerer Qubits, die einen Knoten repräsentieren
- „virtueller Hardwaregraph“ als Zwischenschritt
- vollständiger Graph
  - erweiterbares Schema im nicht-defekten Graphen
  - Overhead $\Theta(n^2)$

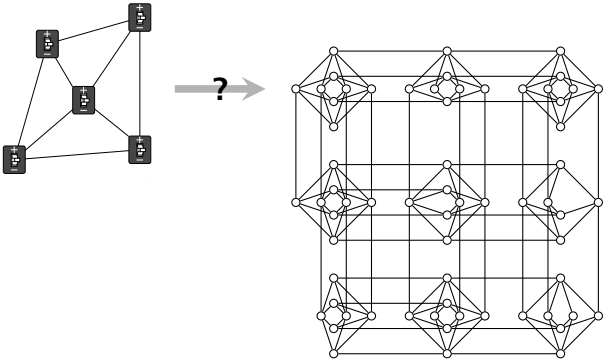


Einbettung in den defekten Chimera-Graphen

- durch Zusammenfassen mehrerer Qubits, die einen Knoten repräsentieren
- „virtueller Hardwaregraph“ als Zwischenschritt
- vollständiger Graph
  - erweiterbares Schema im nicht-defekten Graphen
  - im defekten Graphen nicht anwendbar



Allgemeines Einbettungsproblem



Broken Chimera Minor Embedding Problem

Gegeben ein beliebiger Graph G und ein defekter Chimera-Graph C, ist G in C einbettbar?

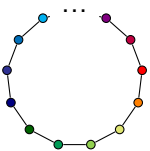
Allgemeines Einbettungsproblem

Broken Chimera Hamiltonian Cycle Problem

Gegeben ein defekter Chimera-Graph C, hat C einen Hamiltonkreis?

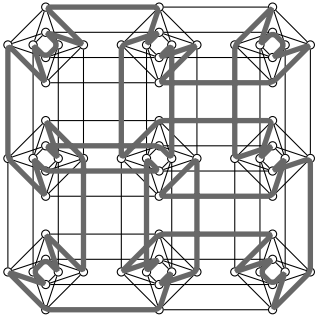
Broken Chimera Minor Embedding Problem

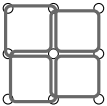
Gegeben ein beliebiger Graph G und ein defekter Chimera-Graph C, ist G in C einbettbar?



$|V(G)| = |V(C)|$

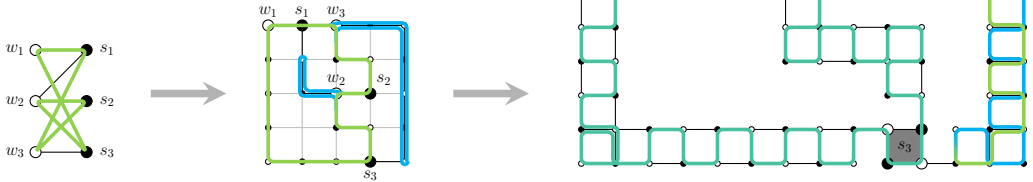
NP-schwer



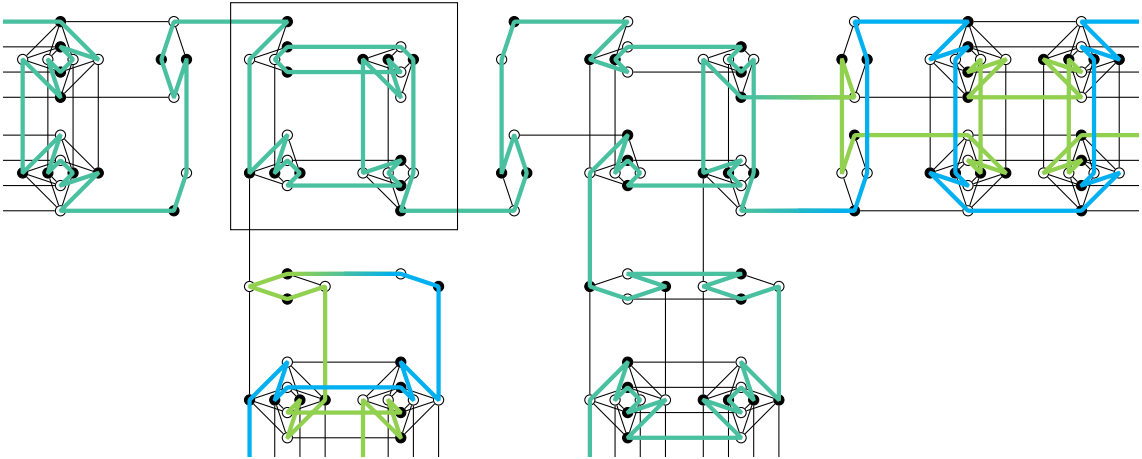


Beweisidee: Reduktion des Hamiltonkreisproblems

- Konstruktion eines defekten Chimera-Graphen
  - aus planarem, bipartiten Graphen mit maximalem Ausgangsgrad 3
  - über Paritäten-erhaltende Repräsentation im Gittergraphen (nach A. Itai)
  - Ausgangsgrad der s-Elemente bleibt erhalten
  - → Kontraktion liefert ursprünglichen Hamiltonkreis



Konstruierter defekter Chimera-Graph

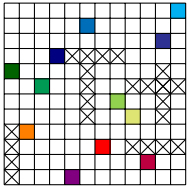


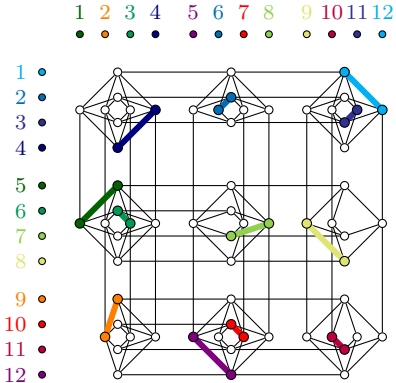
Einbettung des vollständigen Graphen

LARGEST COMPLETE GRAPH EMBEDDING PROBLEM

Gegeben ein defekter Chimera-Graph C, welches ist das größte $n \in \mathbb{N}$, für das K_n in C einbettbar ist?

- Über bipartites Matching-Problem
  - je eine Knotenzeile zu je einer -spalte
  - Maximieren Zahl der Zuordnungen

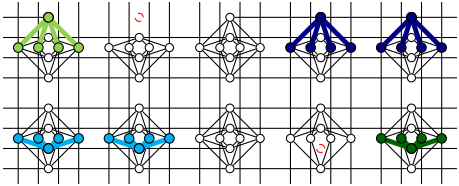


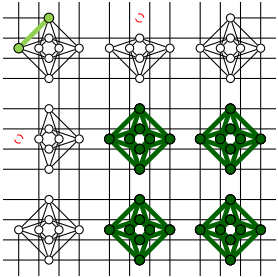


Konstruktionsidee: Eingeschränktes Matching-Problem

NP-schwer

- Paare von defekten Qubits
  - schließen bestimmte Zuordnungen paarweise aus
  - durch Matching-Bedingungen zusammenfassbar zu „mutally exclusive sets“
  - → zusätzliche Nebenbedingungen für jede Menge



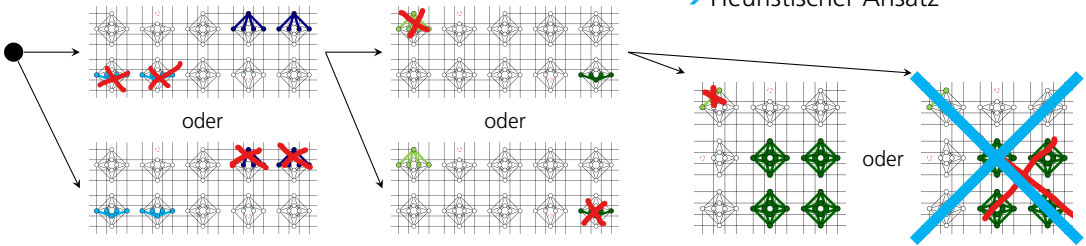


Beweisidee: Laufzeit

- Unterteilung in Unterprobleme
  - für jede Nebenbedingung zwei Möglichkeiten wählbar
  - resultierende Nebenbedingung ist schwächer als Matching-Bedingungen
  - → $2^{|B|^2}$ bipartite Matching-Probleme ohne zusätzliche Nebenbedingungen
  - → jedes lösbar in $\mathcal{O}(n^3)$

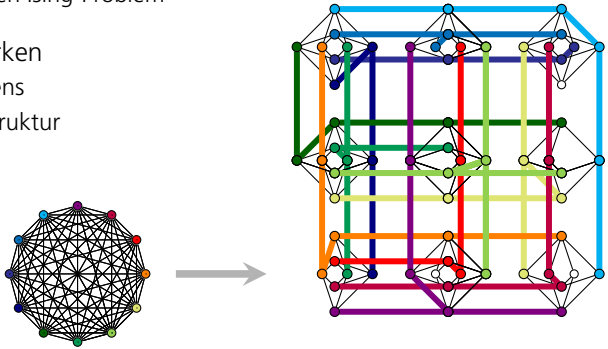
FPT (#defekte Qubits)

→ Heuristischer Ansatz



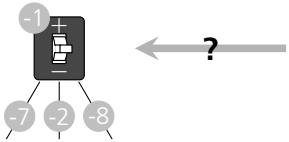
Eingebettetes Ising-Problem

- Ising-Problem auf Graphen resultierend aus Einbettung
  - beweisbar äquivalent zum originalen Ising-Problem
- Übertragung der Gewichte und Stärken
  - Betrachtung eines einzelnen Knotens
  - Vereinfachen der Nachbarschaftsstruktur

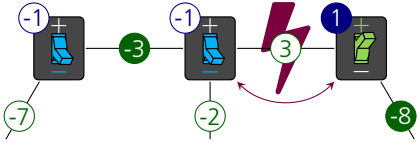


Starke Kopplungen im eingebetteten Ising-Problem

Originalknoten



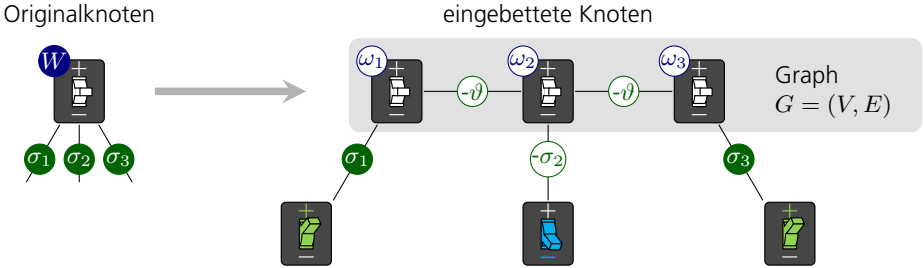
eingebettete Knoten



$= -1 - 0 - 17 = -18$

- Wie groß muss die Kopplungsstärke **mindestens** gewählt sein?
  - bei bestimmter Verteilung des Gewichts
  - zur Synchronisierung der eingebetteten Variablen für Lösungsextraktion
  - bei beliebiger Konstellation der Nachbarknoten

Starke Kopplungen im eingebetteten Ising-Problem



- Wie groß muss die Kopplungsstärke **mindestens** gewählt sein?
  - bei bestimmter Verteilung des Gewichts
  - zur Synchronisierung der eingebetteten Variablen für Lösungsextraktion
  - bei beliebiger Konstellation der Nachbarknoten

Gewichtsverteilungsproblem(e)

Strength-only [Full] Gapped Weight Distribution Problem

Gegeben Graph $G = (V, E)$, $\sigma \in \mathbb{R}^V_{\geq 0}$, $W \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ mit $W < \sigma(V)$ und $\gamma \in \mathbb{R}_{>0}$:

$$\begin{aligned} &\min \vartheta \\ &\text{s.t. } \vartheta \in \mathbb{R},\ \omega \in \mathbb{R}^V \\ &\qquad \vartheta \geq \frac{\min\{\sigma(S) + \omega(S), \sigma(V \setminus S) - \omega(V \setminus S)\} + \gamma}{|\delta(S)|} \quad \forall \emptyset \neq S \subsetneq V, \\ &\qquad \omega(V) = W, \\ &\qquad \boxed{[\vartheta \geq \|\omega\|_\infty].} \end{aligned}$$

polynomiell für Bäume

- Schnittnebenbedingungen sind redundant für S oder $V \setminus S$ nicht zusammenhängend
- in Bäumen verbleiben nur die polynomiell vielen Fundamentalschnitte

Algorithmenentwicklung für Bäume

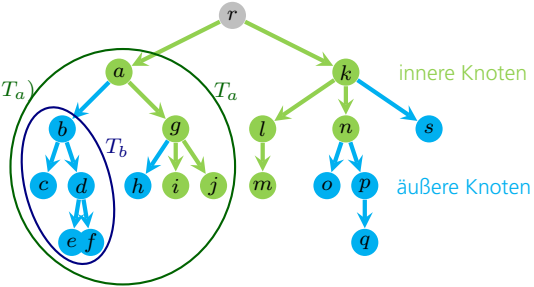
- Baumkanten erhalten Richtung und Typ
  - zeigt in Teilbaum T_v für $\sigma(T_v) \leq \sigma(V \setminus T_v)$
  - unterschiedliche Nebenbedingungen entsprechend Minimalwert

$$\sigma(T_v) + \omega(T_v) \leq \sigma(V \setminus T_v) - \omega(V \setminus T_v)$$

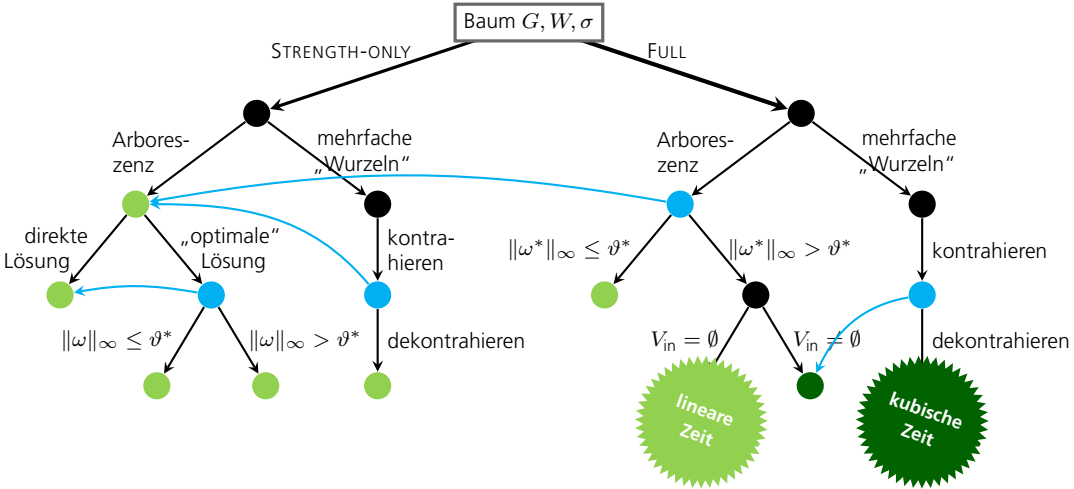
$$\Leftrightarrow \qquad \sigma(T_v) \leq \tfrac{1}{2}\left(\sigma(V) - W\right)$$

$\vartheta + \omega(V \setminus T_a) \geq \sigma(V \setminus T_a)$

$\vartheta - \omega(T_b) \geq \sigma(T_b)$



Fallunterscheidungen



Gewichtsverteilungsproblem(e)

Strength-only [Full] Integer Gapped Weight Distribution Problem

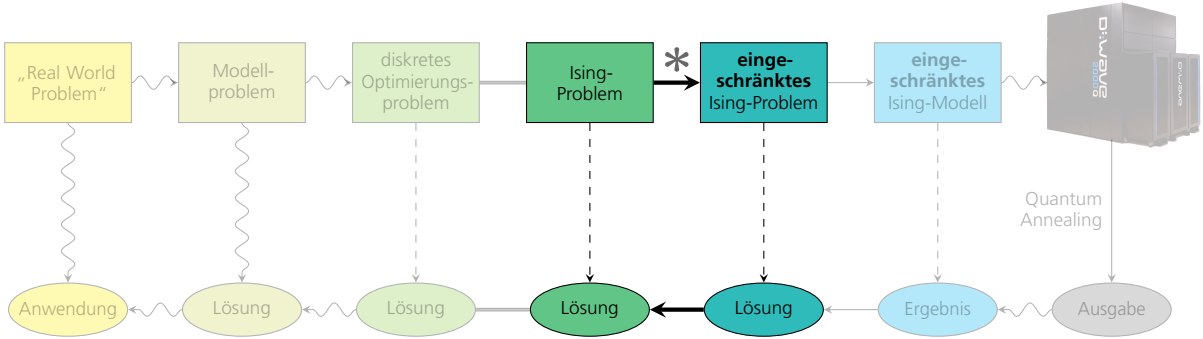
Gegeben Graph $G = (V, E)$, $\sigma \in \mathbb{N}^V$, $W \in \mathbb{N}$ mit $W < \sigma(V)$ und $\gamma \in \mathbb{N}_+$:

polynomiell für Bäume

$$
\begin{aligned}
&\min \vartheta \\
&\text{s.t. } \vartheta \in \mathbb{Z},\ \omega \in \mathbb{Z}^V, \\
&\quad \vartheta \geq \frac{\min\{\sigma(S) + \omega(S), \sigma(V \setminus S) - \omega(V \setminus S)\} + \gamma}{|\delta(S)|} \quad \forall \emptyset \neq S \subsetneq V, \\
&\quad \omega(V) = W, \\
&\quad [\vartheta \geq \|\omega\|_\infty].
\end{aligned}
$$

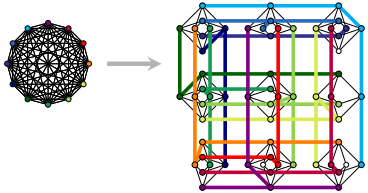
- ➔ Schnittnebenbedingungen sind redundant für S oder $V \setminus S$ nicht zusammenhängend
- ➔ in Bäumen verbleiben nur die polynomiell vielen Fundamentalschnitte

Einordnung

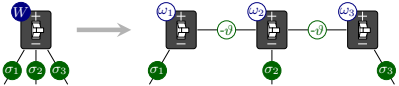


* **Einbettung** und **Gewichtsverteilung**

Fazit



- **Einbettung**
  - Schwerheitsbeweis speziell für Chimera-Architektur
  - aber voraussichtlich gültig für alle „lokalen“ Strukturen
  - benötigen clevere Strategie um dies zu umgehen ➔ vorab berechnete Templates
  - ➔ nächster Schritt: Übertragung des Matching-Problems in Pegasus-Graphen
- **Gewichtsverteilung**
  - Erzeugung beweisbar äquivalenter eingebetteter Ising-Probleme
  - anwendbar für alle Hardwaregraphen, bei denen Einbettung erforderlich ist
  - ➔ nächster Schritt: praktische Evaluierung der Gewichtsverteilung
  - ➔ Einfluss auf die Erfolgswahrscheinlichkeit?
    Rolle des Gap-Parameters γ?



Fragen?

Elisabeth Lobe

High-Performance Computing
Institut für Softwaretechnologie
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.

elisabeth.lobe@dlr.de

DLR

OTTO VON GUERICKE
UNIVERSITÄT
MAGDEBURG

Gewichtsverteilungsproblem(e) auf Bäumen

Strength-only [Full] [Integer] Weight Distribution Problem on Trees

Gegeben Baum $G = (V, E)$, $\sigma \in \mathbb{R}^V_{\geq 0}$, $W \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ mit $W < \sigma(V)$ und $\gamma \in \mathbb{R}_{>0}$:

$$
\begin{aligned}
&\min \vartheta + \gamma \\
&\text{s.t. } \vartheta \in \mathbb{R},\ \omega \in \mathbb{R}^V \quad \boxed{[\vartheta \in \mathbb{Z},\ \omega \in \mathbb{Z}^V]}, \\
&\qquad \vartheta \geq \sigma(T_a) + |\omega(T_a)| && \forall a \in A_{\text{out}}, \\
&\qquad \vartheta \geq \tfrac{1}{2}(\sigma(V) - W) + \left|\tfrac{1}{2}(\sigma(V) - W) - \sigma(T_a) + \omega(T_a)\right| && \forall a \in A_{\text{in}}, \\
&\qquad \omega(V) = W, \\
&\qquad \boxed{[\vartheta + \gamma \geq \|\omega\|_\infty]}.
\end{aligned}
$$

Veröffentlichungen

- E. Lobe, L. Schürmann und T. Stollenwerk. Embedding of complete graphs in broken Chimera graphs. Quantum Information Processing, 20(7):1–27, 2021. DOI: 10.1007/s11128-021-03168-z.
- E. Lobe und A. Lutz. Minor Embedding in Broken Chimera and Pegasus Graphs is NP-complete. preprint, 2021. arXiv: 2110.08325 [quant-ph]. currently under consideration for publication in Theoretical Computer Science.
- M. Jünger, E. Lobe, P. Mutzel, G. Reinelt, F. Rendl, G. Rinaldi und T. Stollenwerk. Quantum Annealing versus Digital Computing: An Experimental Comparison. Journal of Experimental Algorithmics, 26:1–30, 2021. DOI: 10.1145/3459606.
- T. Stollenwerk, E. Lobe und M. Jung. Flight gate assignment with a quantum annealer. In International Workshop on Quantum Technology and Optimization Problems, Seiten 99–110, Berlin. Springer, 2019. DOI: 10.1007/978-3-030-14082-3_9.