Webinarreihe QC

Quantum Annealing

Elisabeth Lobe

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

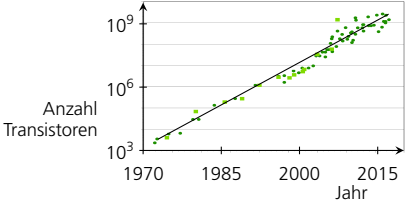
12. April 2022

DLR

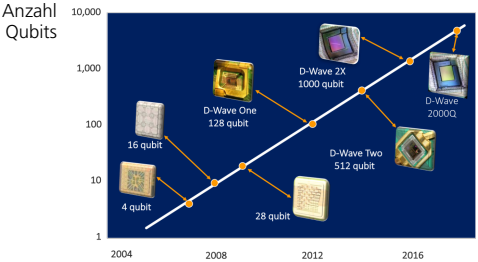
Verschränkung
Anwendungen
Einbettung
Erfolgswahrscheinlichkeit
Kopplung
Adiabatisches Theorem
Antiferromagnetismus
Parameterpräzision
Quantencomputer
D-Wave Systems
Heuristik
Ising-Problem
Adiabatischer Quantencomputer
Superposition
Qubits
Spin
Hardwaregraph
Grundzustand
Strafterm
Quantenparallelismus
Pegasus
Quantum Annealing
Adiabatische Evolution
Kombinatorische Optimierung
Spectral Gap
Ferromagnetismus
Supraleiter
Chimera
QUBO
Quantensystem

Ende des „Mooreschen Gesetzes“?

- Beobachtung ➔ „Selbsterfüllende Prophezeiung“
  - Verdoppelung der Transistorenzahl auf Mikrochips alle 2 Jahre
  - Entspricht exponentiellem Wachstum der „Computational Power“



- Nicht unbegrenzt fortführbar
  - Mit zunehmender Transistordichte werden störende Quanteneffekte relevanter
  - Ablösung der klassischen Halbleitertechnik?



[1]

➔ **Quantentechnologien** könnten der nächste Schritt sein

Aktuelles

- „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
  - größer, schneller, besser, ...

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.

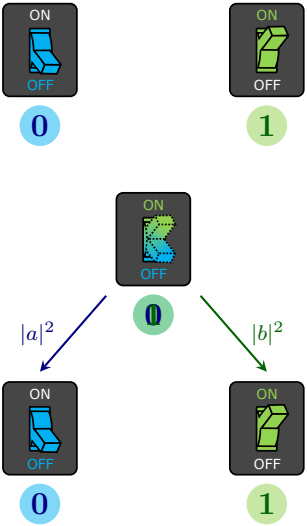
Christian J. Meier
18.02.2022, 11.42 Uhr

[2]

Quantenbits (Qubits)

- Wert eines klassischen Bits ist
  entweder „0“ **oder** „1“
- Zustand eines Quantenbits ist
  Superposition von „0“ **und** „1“

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

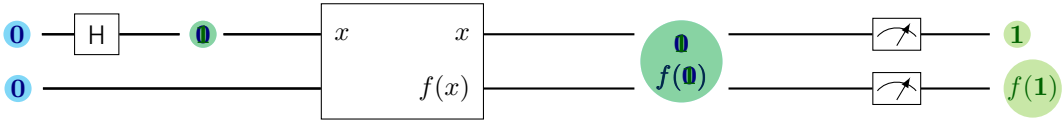


Universeller Quantencomputer

- Rechnen auf Qubits
  - Manipulation der Quantenzustände (= Verändern der Parameter) durch Ausführen von Quantengattern
  - Zusammenfassen von Qubits in Quantenregistern

→ Algorithmus
+
→ Startzustand
Endzustand

- Eigenschaften
  - Quantenparallelismus: Gleichzeitiges Rechnen auf „0“ **und** „1“
  - Verschränkung: Wert des 1. an Wert des 2. Qubits gebunden
  - Messung liefert nur ein Ergebnis: „$f(0)$“ **oder** „$f(1)$“

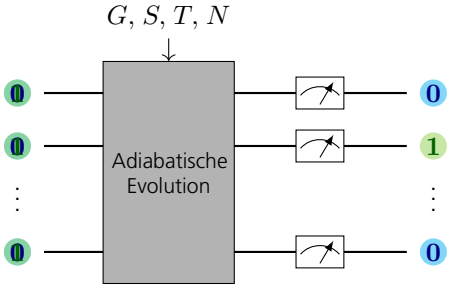


Adiabatischer Quantencomputer

- „analoger Quantencomputer“
  - kann nur einen „Algorithmus“ ausführen
  - abhängig von Problem- und Ausführungsparametern
  - Startzustand festgelegt: alle Qubits in Superposition

- Quantenschaltkreise effizient simulierbar
  - ➔ äquivalent zu konventionellem QC

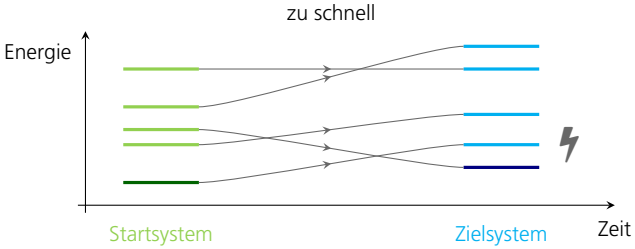
- Ausgangspunkt: Adiabatisches Theorem der Quantenmechanik



Das Adiabatische Theorem

- Quantensysteme haben diskrete Energieniveaus (Beispiel Atom)
  - Grundzustand: niedrigste Energie
- Überführung von einem Quantensystem in ein anderes
  - durch Änderung äußerer Einflüsse
  - Beibehalten des Energielevels bei adiabatischer Zustandsänderung
- minimale Laufzeit abhängig vom „Spectral Gap“

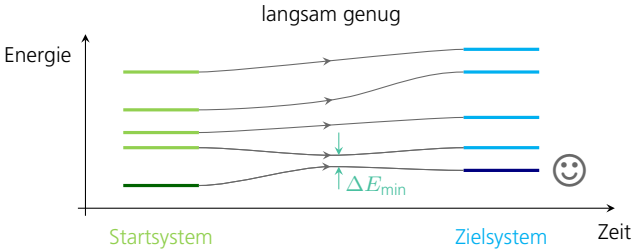
$$\approx const \cdot \frac{1}{\Delta E^2_{\text{min}}}$$



Das Adiabatische Theorem

- Quantensysteme haben diskrete Energieniveaus (Beispiel Atom)
  - Grundzustand: niedrigste Energie
- Überführung von einem Quantensystem in ein anderes
  - durch Änderung äußerer Einflüsse
  - Beibehalten des Energielevels bei adiabatischer Zustandsänderung
- minimale Laufzeit abhängig vom „Spectral Gap“

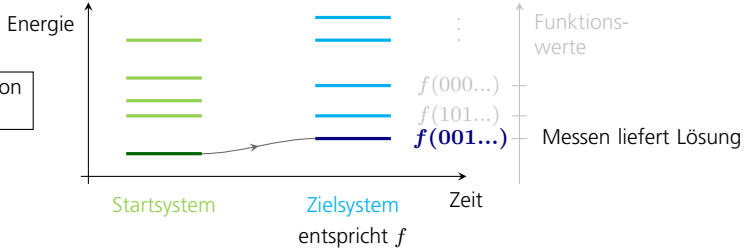
$$\approx const \cdot \frac{1}{\Delta E_{\text{min}}^2}$$



Adiabatische Optimierung

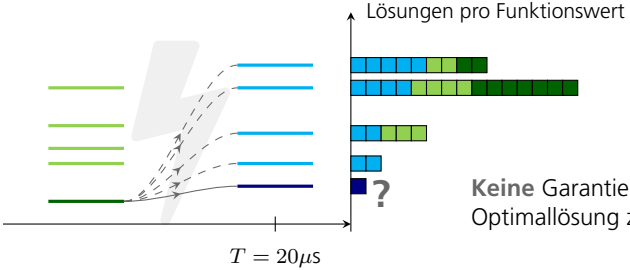
- Lösen von Minimierungsproblemen über adiabatische Entwicklung
  - Kodieren der Lösung im Grundzustand eines Quantensystems
  - Präparieren eines Startsystems mit bekannten Grundzustand
  - Langsame Überführung liefert Zielgrundzustand

Minimiere Funktion
$f : \{0,1\}^n \to \mathbb{R}$



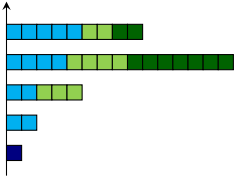
Quantum Annealer

- Theorie vs. Praxis: Imperfekter Adiabatischer Quantencomputer
  - Optimale Evolutionszeit nicht a priori bestimmbar ➔ festgelegte Zeit
  - Idealbedingungen nie realisierbar ➔ äußere Einflüsse ➔ Fehler
  - Heuristischer Löser ➔ mehrfache Durchläufe
  - Begriff angelehnt an Simulated Annealing



Keine Garantie die Optimallösung zu treffen!

Erfolg und „Laufzeit“



- Statistische Auswertung im Nachhinein
  - Erfolgswahrscheinlichkeit

$$p = \frac{\text{Anzahl Optimallösung getroffen}}{\text{Gesamtzahl Durchläufe}} = \frac{1}{32} = 0.03125$$

  - Anzahl Durchläufe / Zeit bis 99% Sicherheit, dass Lösung gefunden

$$N_{99} = \left\lceil \log_{1-p}(1-0.99) \right\rceil = \lceil 145.05 \rceil = 146$$

$$T_{99} = N_{99} T_{\text{anneal}} = 146 \cdot 20\mu\text{s} = 2.9\text{ms}$$

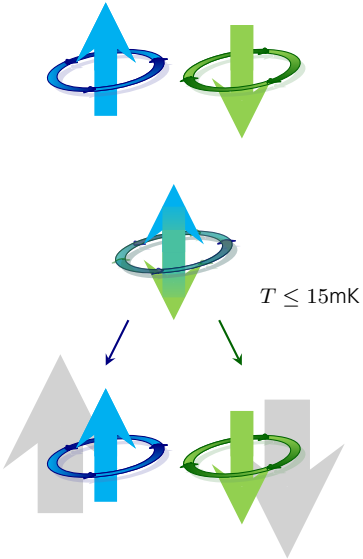
→ Nur wenn Optimallösung gefunden und Optimalität/Güte klassisch nachgewiesen!

→ Nur grobe Abschätzung für ähnliche Instanzen, stark problemspezifisch!

Realisierung der Qubits

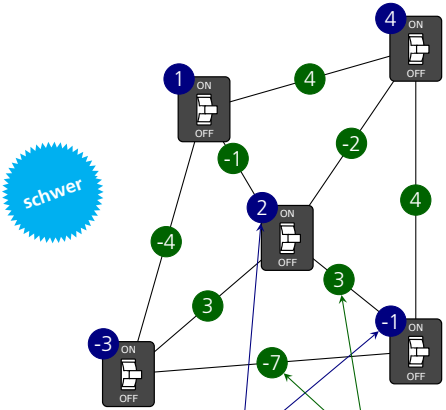
- über Supraleitende Schleifen
  - elektrischer Fluss induziert einen Spin
  - bei sehr tiefen Temperaturen Spins in Superposition
  - QC Systeme tendieren zu diesem Zustand niedrigster Energie
- äußeres Magnetfeld beeinflusst Spins
- paarweise Kopplung von Qubits
  - Magnetismus einstellbar
  - ferromagnetisch – in gleiche Richtung
  - antiferromagnetisch – in unterschiedliche Richtungen

→ System beschreibbar durch quadratische Funktion



Optimierer für QUBO-Probleme

- Quadratic Unconstrained Binary Optimization
  - mit binären Variablen
  - über quadratischen Zielfunktion
  - ohne Nebenbedingungen
  - Input: Gewichte G_i's und Stärken S_{ij}'s

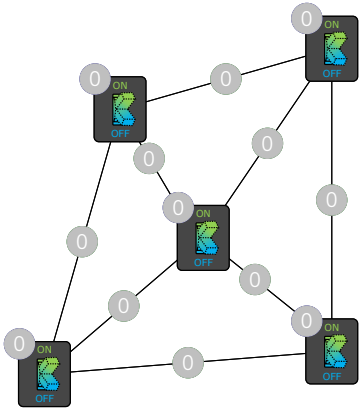


minimiere $\sum_i G_i \; x_i + \sum_{i<j} S_{ij} \; x_i x_j$

für $x_i \in \{0, 1\}$

Optimierer für QUBO-Probleme

- Quadratic Unconstrained Binary Optimization
  - mit binären Variablen
  - über quadratischen Zielfunktion
  - ohne Nebenbedingungen
  - Input: Gewichte G_i's und Stärken S_{ij}'s
- Entwicklung:
  - Start mit allen Qubits in Superposition und Gewichte und Stärken auf 0
  - Anschalten der Gewichte
  - Auflösen der Superpositionen
- Lösung: konkrete Belegung der x_i's

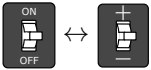


minimiere $\sum_i G_i \; x_i + \sum_{i<j} S_{ij} \; x_i x_j$

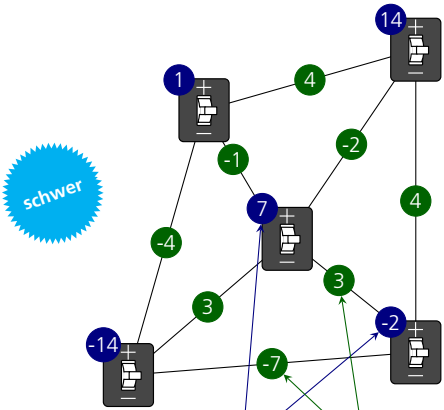
für $x_i \in \{0, 1\}$

QUBO- vs. Ising-Problem

- Ising-Problem
  - mit Spin-Variablen
  - über quadratischen Zielfunktion
  - ohne Nebenbedingungen
  - Input: Gewichte H_i's und Stärken J_{ij}'s



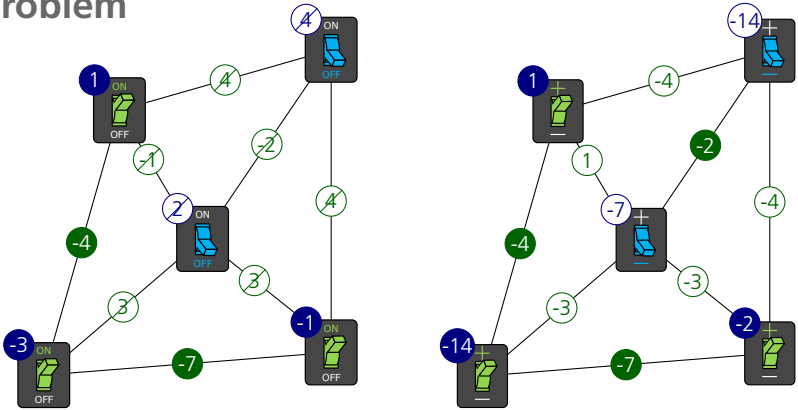
x_i	s_i
0	-1
1	$+1$



minimiere $\sum_i H_i \; s_i + \sum_{i<j} J_{ij} \; s_i s_j$

für $s_i \in \{-1, +1\}$

QUBO- vs. Ising-Problem



- Umrechnung

$$s_i = 2x_i - 1$$

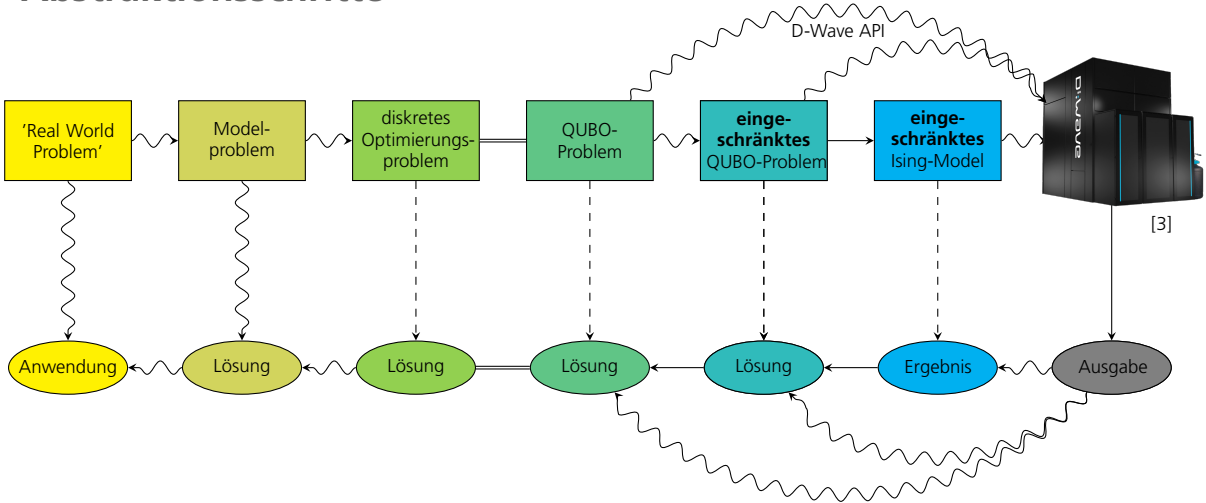
$$x_i = \frac{1}{2}(s_i - 1)$$

minimiere $\sum_i G_i \; x_i + \sum_{i<j} S_{ij} \; x_i x_j$ für $x_i \in \{0, 1\}$

$=$

minimiere $\sum_i \frac{1}{4} H_i s_i \; + \sum_{i<j} \frac{1}{4} J_{ij} s_i s_j + c$ für $s_i \in \{-1, +1\}$

Abstraktionsschritte



Reduktionen

beliebiges diskretes Optimierungsproblem

minimiere $\boxed{f(x)}$

mit $\ell_1 \leq g_1(x) \leq r_1,$

$\ldots,$

$\ell_m \leq g_m(x) \leq r_m,$

für $\boxed{x_i \in \mathbb{Z}}$

↓

QUBO-Problem

minimiere $\sum_i G_i x_i + \sum_{i<j} S_{ij} x_i x_j$

für $x_i \in \{0, 1\}$

- Variablen binär kodiert?
  - Ersetzen von ganzzahligen Variablen, beispielsweise

$$11 = 1 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0 \quad \rightarrow \quad 1011$$

$$x_i = y_3 \cdot 2^3 + y_2 \cdot 2^2 + y_1 \cdot 2^1 + y_0 \cdot 2^0 \quad \rightarrow \quad y_3 y_2 y_1 y_0$$

für $0 \leq x_i \leq 15$

- Zielfunktion maximal quadratisch?
  - Ersetzen von Produkten durch neue Variablen

$$x_i x_j = r_{ij}$$

und Hinzufügen der Nebenbedingung

→ Hinzufügen von Knoten zu Interaktionsgraph

Reduktionen

beliebiges diskretes Optimierungsproblem

minimiere $f(x)$

mit $\ell_1 \leq g_1(x) \leq r_1,$
$\ldots,$
$\ell_m \leq g_m(x) \leq r_m,$

für $x_i \in \mathbb{Z}$

↓

QUBO-Problem

minimiere $\sum_i G_i x_i + \sum_{i<j} S_{ij} x_i x_j$

für $x_i \in \{0, 1\}$

- Nebenbedingungen
  - werden in Zielfunktion integriert

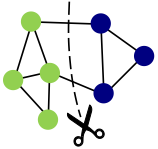
$$f(x) + \lambda_1 t_1(x) + \ldots + \lambda_m t_m(x)$$

  - durch Strafterm

$$t_n(x) \begin{cases} = 0, & \text{wenn } x \text{ erfüllt Nebenbedingung } n, \\ > 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

    mit Strafgewicht λ_n für alle $n = 1, \ldots, m$
  - ➔ Hinzufügen von Kanten zu Interaktionsgraph
- Validierung nach Annealing:
  - Erfüllt die gefundene Lösung die Nebenbedingungen?
  - ➔ Sonst Strafgewichte zu gering

Anwendungen

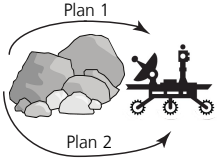


- (Akademische) Kombinatorische Optimierungsprobleme
  - Graphpartitionierung
  - Erfüllbarkeitsproblem
  - ...
  - → Viele Formulierungen bekannt

$$(x \wedge y) \vee (x \wedge \bar{y}) = wahr?$$

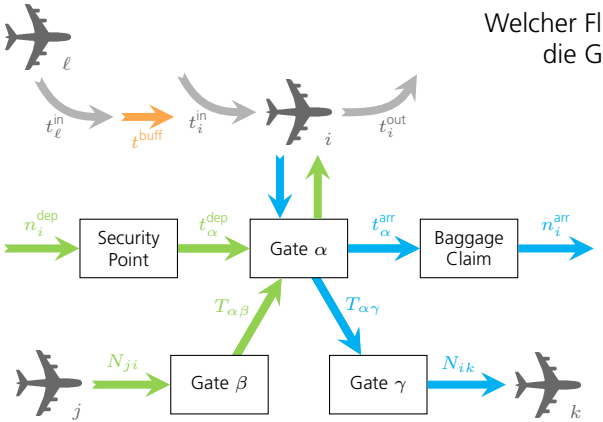
[4]

- Fortgeschrittene Anwendungen
  - Planungsprobleme: Machine-Job-Scheduling,
    Mars-Lander Operations (NASA)
  - Maschinelles Lernen
  - ...
  - → Einige Standardmethoden etabliert



[5]

Anwendung: Flight Gate Assignment

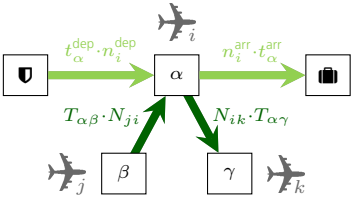


Welcher Flug wird welchem Gate zugeordnet, so dass die Gesamttransitzeit der Passagiere minimal ist?

$$A : F \to G$$

- F, G sets of flights and gates
- $n_i^{\text{dep/arr}}$ passengers which depart/ arrive with flight i
- N_{ij} transfer passengers from flight i to j
- $t_i^{\text{in/out}}$ arrival/departure time of flight i
- $T_{\alpha\beta}$ average time to get from gate α to β
- $t_\alpha^{\text{dep/arr}}$ average time to arrive at/ leave from gate α
- t^{buff} buffer time between two flights at the same gate

FGA: Binäres Optimierungsproblem



- binäre Variablen $x \in \{0,1\}^{F \times G}$ mit

$$x_{i\alpha} = \begin{cases} 1, & \text{wenn Flug } i \text{ an Gate } \alpha, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

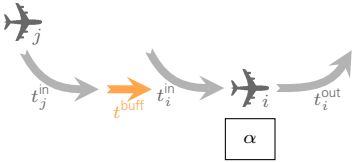
- Minimieren der Gesamttransitzeit mit Zielfunktion

$$\begin{aligned} T(x) &= T_{\text{arr}}(x) + T_{\text{dep}}(x) + T_{\text{transfer}}(x) \\ &= \underbrace{\sum_{i\alpha} n_i^{\text{arr}} t_\alpha^{\text{arr}}\, x_{i\alpha} + \sum_{i\alpha} n_i^{\text{dep}} t_\alpha^{\text{dep}}\, x_{i\alpha}}_{\text{linear}} + \underbrace{\sum_{ij\alpha\beta} N_{ij} T_{\alpha\beta}\, x_{i\alpha}\, x_{j\beta}}_{\text{quadratisch}} \end{aligned}$$

→ **Quadratic Assignment Problem**

- fundamentales Problem in kombinatorischer Optimierung, NP-schwer
- scheint mögliche Vorteile der D-Wave Maschine auszunutzen

FGA: Nebenbedingungen und Strafterme



1. Nur ein Gate pro Flug: $\sum_{\alpha \in G} x_{i\alpha} = 1 \qquad \forall i \in F$

2. Verschiedene Gates, wenn Standzeiten der Flüge überlappen:

$$x_{i\alpha} + x_{j\alpha} \leq 1 \qquad \forall \alpha \in G \;\; \forall (i,j) \in F^2 : t_i^{\text{in}} < t_j^{\text{in}} < t_i^{\text{out}} + t^{\text{buff}}$$

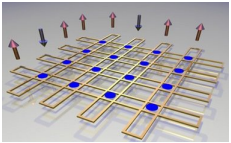
➔ Strafterme: $C_{\text{one}}(x) = \sum_{i \in F} \left(\sum_{\alpha \in G} x_{i\alpha} - 1 \right)^2,$

$$C_{\text{not}}(x) = \sum_{\alpha \in G} \sum_{(i,j) \in P} x_{i\alpha} x_{j\alpha} \quad \text{mit} \quad C_{\text{one/not}} \begin{cases} > 0, & \text{wenn NB verletzt,} \\ = 0, & \text{wenn NB erfüllt,} \end{cases}$$

➔ **QUBO**: $Q(x) = T(x) + \lambda_{\text{one}} C_{\text{one}}(x) + \lambda_{\text{not}} C_{\text{not}}(x)$ mit $\lambda_{\text{one}}, \lambda_{\text{not}}$ groß genug!

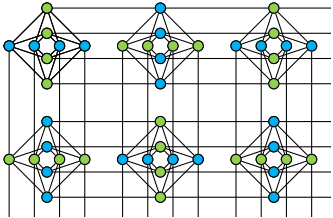
Eingeschränkte Hardwarestruktur

- D-Waves Quanten-Chip
  - besteht aus überlappenden supraleitenden Schleifen
  - mit Kopplungen an Überlappungen



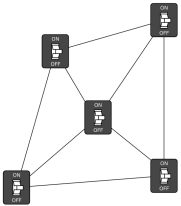
[6]

- Definiert Chimera-Interaktionsgraph $C_{n,m}$
  - 8 Qubits pro Einheitszelle formen $K_{4,4}$
  - Einheitszellen im Schachbrettmuster angelegt
  - n Reihen und m Spalten von Einheitszellen
  - bipartit, maximaler Grad von $4 + 2$



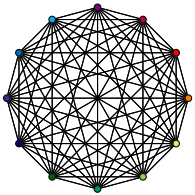
- Aktuelle Chimera-Architektur DW2000Q
  - $C_{16,16}$ mit 16 x 16 Einheitszellen
  - 2048 Qubits und 6016 Kopplungen

Einbettung in den Chimera-Graph

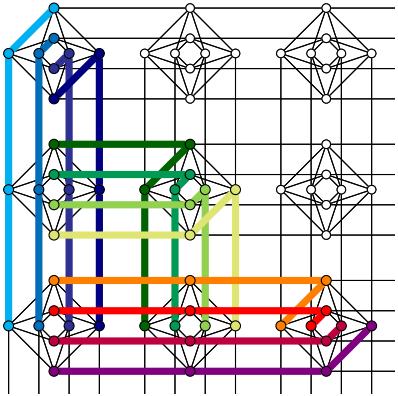


?

„virtueller Hardwaregraph“
als Zwischenschritt

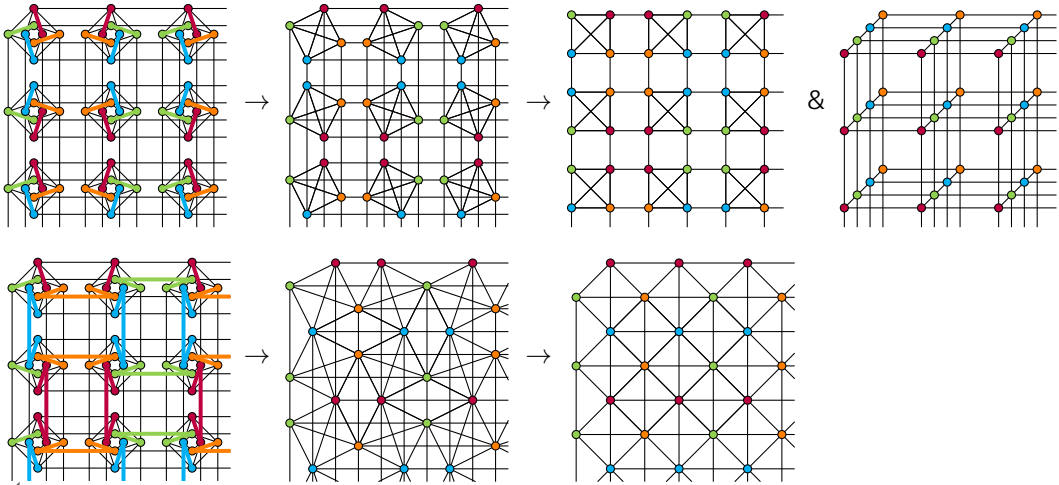


quadratischer
Overhead

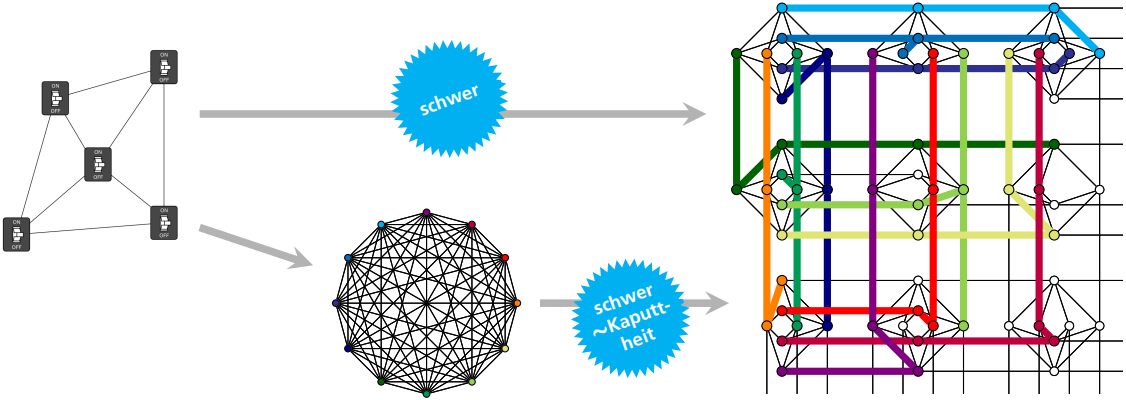


→ nur 64 vollständig verbundene Knoten in DW2000Q

Minoren des Chimera-Graphen



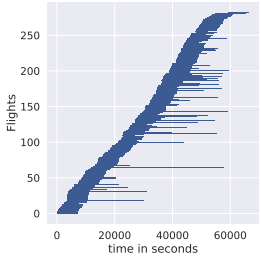
Einbettung in den kaputten Chimera-Graph

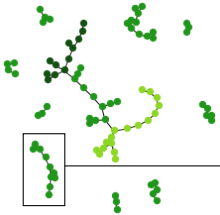


- „kaputte“ Qubits
  - abgeschaltet durch Software da Abweichung von Erwartungswerten
  - konstant bis Neukalibrierung (≥ 1 Jahr)

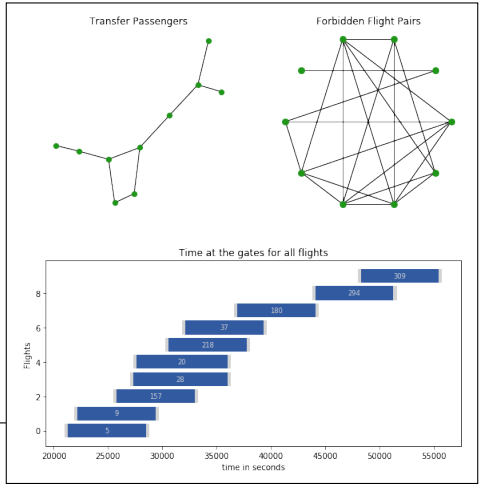
→ D-Wave Heuristik

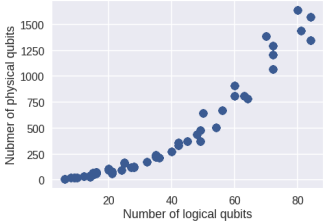
FGA: Partitionierung & Einbettung





flights with transfer passengers



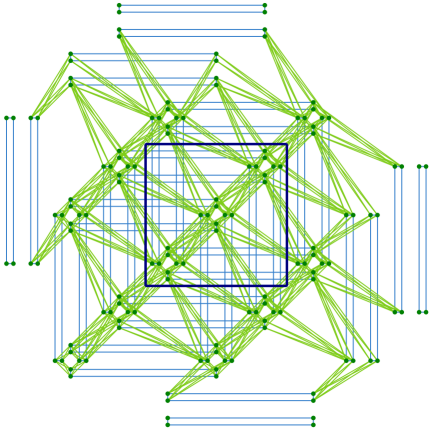


Einbettung der Teilinstanzen über D-Wave Heuristik in Chimera-Graph

Neuer Hardwaregraph

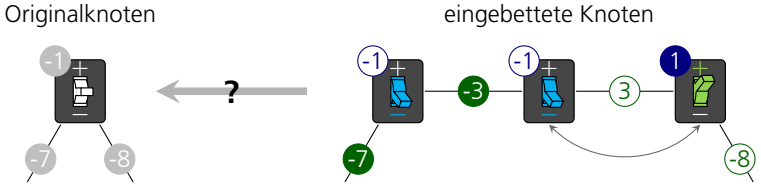
- Der Pegasus-Interaktionsgraph
  - 24 Qubits pro Einheitszelle
  - abgeleitet vom Chimera (enthalten als Subgraph)
  - höherer Grad von 15
- D-Wave Advantage System
  - P_{16} mit 16 x 16 Einheitszellen
  - 5760 Qubits, $\geq$ 35 000 Kopplungen
  - vollständiger Graph mit 282 Knoten (im nicht-kaputten Pegasus)
  - 224 kaputte Qubits aktuell

→ Einbettung bleibt relevant



[7]

Starke Kopplungen



$$= -1 - 0 - 15 = -16$$

- Kopplungen zwischen eingebetteten Knoten
  - erzeugen nur Verschiebung der Zielfunktion ➔ beliebig wählbar
  - müssen ausreichend groß gewählt sein
- Validierung nach Annealing:
  - Haben die Kopplungen bei der gefundenen Lösung gehalten?
  - ➔ Sonst Kopplungen zu gering

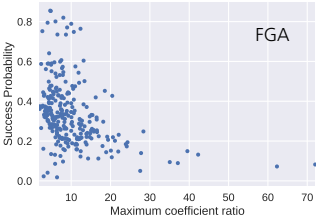
Parameterspezifikation

- Höhe der Gewichte und Stärken: $-2 \leq H_i \leq 2$, $-1 \leq J_{ij} \leq 1$
  - Skalierung der gesamten Zielfunktion
- Begrenzte Parameterpräzision
  - Maschine kann Werte nicht auflösen ➔ Problem ist falsch spezifiziert
  - keine Lösungen zum Originalproblem ➔ Erfolgswahrscheinlichkeit entscheidend beeinflusst
- entscheidender Wert „Maximales Parameterverhältnis“

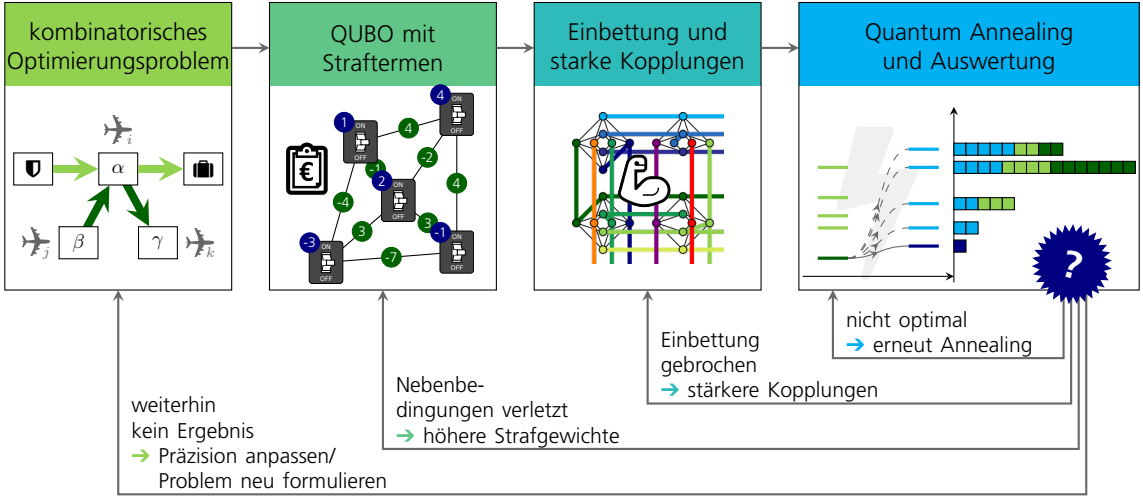
$$R = \frac{\max\{|H_i|, |J_{ij}|\}}{\min\{|H_i|, |J_{ij}|\}}$$

  - abhängig von Parametern des ursprünglichen Problems
  - durch zu hohe Strafgewichte und Kopplungsstärken erhöht

➔ Check nach Einbettung: Ist Problem geeignet?



Zusammenfassung



Nachweise

[1] http://ohwow.news/the-death-of-moores-law-and-quantum-computers/

[2] https://www.nzz.ch/wissenschaft/quantenannealer-von-d-wave-in-juelich-rechnen-jetzt-die-quanten-ld.1667906

[3] https://support.dwavesys.com/hc/en-us/articles/360009806693-What-is-the-QPU-s-Operating-Environment-

[4] https://techblog.aimms.com/2012/11/13/scheduling-example-narrowing-time-window-for-smaller-jobs/

[5] http://www.aaai.org/ocs/index.php/WS/AAAIW16/paper/view/12664

[6] http://web.eecs.utk.edu/ bmaclenn/Classes/494-594-UC-F19/presentations/CS594_UC_Dwave_FinalPresentation.pdf

[7] https://www.dwavesys.com/media/jwwj5z3z/14-1026a-c_next-generation-topology-of-dw-quantum-processors.pdf

Fragen?

Elisabeth Lobe

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

elisabeth.lobe@dlr.de

DLR