



Politechnika Poznańska
Wydział Informatyki i Telekomunikacji
Instytut Informatyki

Streszczenie rozprawy

**ZASTOSOWANIE METOD OBLICZEŃ KWANTOWYCH DO
ROZWIĄZYWANIA PROBLEMÓW OPTYMALIZACYJNYCH.**

Tomasz Pecyna

Promotor

dr hab. inż. Rafał Różycki, prof. PP

Opiekun pomocniczy

dr hab. inż. Krzysztof Kurowski

Poznań, 2024

Streszczenie

1. Wprowadzenie

Informatyka kwantowa jest dziedziną nauki, w której, do wykonywania obliczeń, wykorzystuje się zjawiska kwantowe, takie jak superpozycja, splątanie i tunelowanie. Urządzenia, które przy zastosowaniu tych zjawisk są w stanie rozwiązywać uniwersalne problemy obliczeniowe, nazywane są komputerami kwantowymi. Podstawową jednostką informacji w komputerze kwantowym jest kubit, a podstawowymi elementami reprezentującymi możliwe do wykonania operacje na kubitach, są bramki kwantowe. Oprócz komputerów kwantowych istnieje wiele innych urządzeń kwantowych, które nie realizują w pełni założeń kwantowej maszyny Turinga, jednak znajdują zastosowania w specyficznych typach obliczeń. Do takich urządzeń zaliczamy m.in. kwantowe wyżarzacze oraz urządzenia realizujące próbkowanie bozonów.

Rozważane w rozprawie problemy optymalizacyjne należą do problemów obliczeniowych, w których celem jest znalezienie rozwiązań najlepszych (rozwiązaniem optymalnych) wśród rozwiązań spełniających określone ograniczenia (rozwiązań dopuszczalnych). Oceny rozwiązań dokonuje się na podstawie ustalonych kryteriów oceny, najczęściej wyrażonych za pomocą odpowiednich funkcji. Poszukiwane rozwiązania problemów wygodnie jest reprezentować za pomocą wektora niewiadomych, czyli tzw. zmiennych decyzyjnych. W takich przypadkach pojedyncze rozwiązanie stanowić będzie dowolne przypisanie wartości do tych zmiennych. Problemy optymalizacyjne można klasyfikować na różne sposoby, m.in. według typu użytych zmiennych, które mogą być ciągłe lub dyskretne. Jeśli w modelu problemu konieczne jest użycie obu typów zmiennych, problem taki nazywany jest mieszanym. Typ użytych w modelu problemu zmiennych wpływa na liczbę zbioru jego rozwiązań. Jeśli zbiór ten jest skończony lub policzalny, problem optymalizacyjny nazywamy kombinatorycznym. Ze względu na swoją złożoność, wiele problemów optymalizacyjnych, w tym kombinatorycznych, jest trudnych do rozwiązania przy użyciu współczesnych komputerów.

Informatyka kwantowa jest stosunkowo nową dziedziną nauki w porównaniu z informatyką klasyczną. Pierwsze komputery kwantowe z kilkoma kubitami powstały pod koniec lat 90. Konstrukowanie komputerów kwantowych jest trudne ze względu na wyzwania inżynierskie wynikające z mechaniki kwantowej. W efekcie, zastosowania obliczeń kwantowych do rozwiązywania problemów optymalizacyjnych są głównie teoretyczne i sprowadzają się najczęściej do prostych implementacji na małej liczbie kubitów, w środowisku dodatkowo obciążonym zaszumieniem wynikającym z istniejących ograniczeń technologicznych. Celem tych realizacji jest pokazanie potencjału podejść kwantowych, mimo problemów związanych z szumem i dekoherencją. Algorytmy kwantowe są probabilistyczne, co oznacza, że nie gwarantują znalezienia rozwiązań najlepszych (jeśli takowe istnieją), a jedynie zwracają je z określonym prawdopodobieństwem, zależnym od liczby pomiarów.

Jednym z dwóch najbardziej znanych algorytmów kwantowych jest bez wątpienia algorytm Grovera. Jest to jeden z pierwszych algorytmów, który wykazał potencjalną przewagę kwantową nad podejściami klasycznymi w rozwiązywaniu rzeczywistych problemów. Algorytm Grovera potrafi znaleźć element w nieustrukturyzowanej bazie danych szybciej (w stopniu wyrażonym za pomocą funkcji kwadratowej) w porównaniu do najlepszego algorytmu klasycznego. Dzięki swojej kwantowej przewadze i wszechstronności, algorytm Grovera często stosowany jest jako podprogram w bardziej złożonych algorytmach.

Mimo że obecne komputery kwantowe oferują ponad sto kubitów, co teoretycznie mogłoby pozwolić na wykazanie przewagi kwantowej nad komputerami klasycznymi dla wielu realnych problemów obliczeniowych, ich rzeczywiste możliwości są ograniczone do obliczeń na kilkudziesięciu kubitach i kilkudziesięciu warstwach kwantowych. Jest to znacznie mniej, niż potrzeba do skutecznego uruchomienia algorytmu Grovera, nie wspominając o jego rozszerzeniach. Algorytmy, które lepiej sprawdzają się na współczesnych komputerach kwantowych, to tzw. algorytmy wariacyjne, z których najbardziej znane to Variational Quantum Eigensolver (VQE) oraz Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA). Oba są algorytmami hybrydowymi - kwantowo-klasycznymi.

Ze względu na ograniczenia współczesnych komputerów kwantowych, obecne badania i zastosowania obliczeń kwantowych w problemach optymalizacyjnych można sklasyfikować w następujący sposób:

- Badania aplikacyjne koncentrują się głównie na pogłębianiu zrozumienia znanych algorytmów służących do rozwiązywania standardowych problemów, takich jak MaxCut, które mają jedynie ograniczone zastosowania, np. w produkcji układów scalonych.
- Aplikacje skoncentrowane na zastosowaniu już wcześniej wypracowanych podejść dla nieuniwersalnych urządzeń kwantowych (takich jak komputerów realizujących kwantowe wyżarzanie) do kolejnych rodzajów problemów.
- Badania aplikacyjne, które przenoszą sformułowania opracowane dla nieuniwersalnych urządzeń kwantowych bezpośrednio do uniwersalnych paradygmatów dla wybranych problemów świata rzeczywistego, bez przeprowadzania dogłębnej analizy lub pełnego wykorzystania potencjału komputerów kwantowych,

Liczba publikacji dotyczących rozważanego tematu, które nie mieszczą się w jednej z tych trzech grup, jest bardzo ograniczona.

Równocześnie środowisko obejmujące takie elementy, jak badania naukowe, zastosowania przemysłowe, szkolenie nowych użytkowników, rozwój oprogramowania i integracja sprzętu, tworzy optymalne warunki dla długoterminowych postępów w danej dziedzinie. W przypadku obliczeń kwantowych zaobserwować można aktywny rozwój badań naukowych. Dobrze rozwinięte są również narzędzia do programowania na poziomie bramek kwantowych. Wciąż jednak istnieje duża potrzeba rozwoju zastosowań przemysłowych i wysokopoziomowych abstrakcji, w szczególności tych zintegrowanych z klasycznymi superkomputerami, aby umożliwić użytkownikom skupienie się na aplikacjach, zamiast na przyswajaniu nowinek technicznych i ich implementacji.

Niniejsza praca doktorska koncentruje się na wspomnianych wcześniej brakach w obszarze informatyki kwantowej, w szczególności w zastosowaniach uniwersalnych (bramkowych) komputerów kwantowych oraz na braku wysokopoziomowych abstrakcji. Temat pracy, czyli zastosowanie metod obliczeń kwantowych do rozwiązywania problemów optymalizacyjnych, realizowany jest na kilka sposobów. Po pierwsze, skoncentrowano się na rozwiązaniu dobrze znanego problemu szeregowania, mającego szerokie zastosowanie w przemyśle. Dodatkowo wprowadzono i rozwiązano mniej znane

problemy, głównie z wykorzystaniem algorytmu QAOA i jego wariantów, zarówno na symulatorach komputerów kwantowych, jak i na sprzęcie rzeczywistym. Niektóre wyniki porównano z wynikami uzyskanymi za pomocą komputerów realizujących kwantowe wyżarzanie. Praca nie ogranicza się jedynie do opracowania reprezentacji Hamiltonianowej służącej do rozwiązywania problemów przez algorytmy kwantowe, ale proponuje również nowe podejścia do ich rozwiązywania. Wypracowane aplikacje są dostarczane w postaci dwóch wyspecjalizowanych, lecz przyjaznych dla użytkownika platform, z których każda korzysta z modułowego narzędzia QCG-QuantumLauncher. Narzędzie to zaprojektowano do uruchamiania algorytmów kwantowych i rozwiązywania różnorodnych scenariuszy na różnych docelowych architekturach kwantowych.

2. Prace Badawcze

2.1 Efektywność algorytmu QAOA w problemach kombinatorycznych

Jak wykazano, algorytm QAOA z domyślnie sformułowanymi Hamiltonianami może być z powodzeniem stosowany do rozwiązywania problemów kombinatorycznych. Pokazano, że jakość wyników uzyskanych na symulatorze nie różni się znacząco od tych uzyskanych na rzeczywistym sprzęcie. Zarówno w przypadku symulatorów kwantowych, jak i rzeczywistych komputerów, rozmiary rozwiązywanych instancji są obecnie ograniczone do kilkudziesięciu zmiennych. Na przykład, odpowiada to rozwiązywaniu instancji z 5 pojazdami dla problemu ładowania pojazdów elektrycznych na autostradzie. Na komputerze ibmq_toronto możliwe jest osiągnięcie 0.5% prawdopodobieństwa znalezienia dopuszczalnego rozwiązania dla takich instancji. Te rozmiary instancji są znacząco mniejsze w porównaniu do tych, które mogą być obecnie rozwiązywane przez komputery realizujące kwantowe wyżarzanie, zdolne do rozwiązywania instancji zawierających aż 50 pojazdów elektrycznych. Podobnie, dla problemu taktycznej dekonfliktacji statków powietrznych, instancje o rozmiarze 5×4 mogą być rozwiązywane z prawdopodobieństwem nie większym niż 0.01%.

Istotny okazał się dobór odpowiedniej głębokości algorytmu QAOA. Głębsze obwody (z większym parametrem p) lepiej przybliżają ewolucję adiabatyczną i mogą dawać lepsze wyniki. Jednak w przypadku rzeczywistego sprzętu kwantowego oraz symulatorów z szumem, głębsze obwody są bardziej podatne na szum, dekoherencję i interferencje. Dla problemu ładowania pojazdów elektrycznych wykazano, że najlepsze wyniki uzyskuje się przy obwodach o głębokości $p = 2$, ponieważ obwody o głębokości $p = 1$ nie są w stanie wystarczająco dobrze przybliżyć ewolucji adiabatycznej, a obwody o głębokości $p = 3$ lub większej nie są w stanie znaleźć dopuszczalnych rozwiązań. Warto jednak zauważyć, że wzrost głębokości obwodu nie wpływa znacząco na czas obliczeń potrzebnych do optymalizacji parametrów wariacyjnych; na przykład, czas obliczeń dla głębokości $p = 5$ jest tylko 1,43 razy dłuższy niż dla $p = 1$.

Kolejnym wnioskiem z eksperymentów nad algorytmem QAOA jest to, że kluczowe jest staranne sformułowanie Hamiltonianu kosztu, ponieważ prawdopodobieństwo sukcesu może znacznie się różnić w zależności od struktury instancji, nawet jeśli jej rozmiar pozostaje ten sam. Eksperymenty dla instancji problemu dekonfliktacji statków powietrznych o rozmiarze 12 zmiennych pokazały, że łatwiej jest znaleźć dopuszczalne rozwiązania, gdy jest więcej statków powietrznych, a mniej manewrów. Z kolei, gdy jest mniej statków powietrznych i więcej manewrów, prawdopodobieństwo sukcesu spada od 2 do 3 razy, mimo że iloczyn tych dwóch wartości pozostaje taki sam. Zmiana z problemów decyzyjnych na optymalizacyjne nie wydaje się natomiast zwiększać trudności w rozwiązywaniu problemu. Jest to zgodne z oczekiwaniami, ponieważ Hamiltoniany dla problemów decyzyjnych i optymalizacyjnych różnią się tylko w terminach jednokubitowych, nie wprowadzając dodatkowych splątań.

2.2 Połączenie algorytmu QAOA z klasycznymi zasobami superkomputerowymi

Związek między QAOA a ewolucją adiabatyczną sugeruje, że sekwencje parametrów wariacyjnych powinny monotonicznie wzrastać lub maleć wraz z głębokością obwodu. W rozprawie przebadano możliwość wykorzystania zasobów superkomputerów dostępnych w Poznańskim Centrum Superkomputerowym i Sieciowym do znalezienia optymalnych parametrów wariacyjnych dla problemu JSSP. W eksperymencie zaobserwowano 6,5-krotne skrócenie czasu optymalizacji między głębokościami $p = 3$ a $p = 4$. Efekt taki można uzyskać pod warunkiem wykorzystania optymalnych parametrów znalezionych dla obwodu QAOA o głębokości $p = 3$ jako punktów początkowych dla głębokości $p = 4$.

Warto również wspomnieć o związku między wartością energii a jakością rozwiązania w problemach optymalizacyjnych. Podobnie jak w sztucznej inteligencji, gdzie minimalizowana jest funkcja kosztu, w optymalizacji kwantowej minimalizowana jest energia. Wyniki pokazują, że w niektórych przypadkach rozwiązania niedopuszczalne mogą mieć energię niższą niż rozwiązania dopuszczalne, w szczególności w kontekście optymalizacji całkowitego czasu uszeregowania. Niemniej jednak ogólna zasada, że niższa energia odpowiada wyższemu prawdopodobieństwu uzyskania wysokiej jakości rozwiązań, pozostaje aktualna. W toku badań stwierdzono istotny potencjał dostosowywania parametrów decyzyjnych, takich jak maksymalny czas, w celu poprawy wyników.

2.3 Optymalizacja wykorzystująca jedynie obliczenia kwantowe

Podejście znajdowania optymalnych parametrów wariacyjnych jest kosztowne zarówno pod względem zasobów obliczeniowych, jak i całkowitego czasu obliczeń. Z drugiej strony, istnieje np. algorytm FALQON, którego istotą jest możliwość pominięcia klasycznej części obliczeń.

Wyniki przeprowadzonych eksperymentów wskazują, że algorytm FALQON może osiągać znacznie niższe poziomy energii w porównaniu do standardowego QAOA. Ważne jest jednak to, że podczas gdy liczba warstw QAOA pozostaje stała w trakcie obliczeń, FALQON wymaga iteracyjnego pogłębiania obwodu, co zwiększa prawdopodobieństwo ingerencji szumu w uzyskane rezultaty. Wyniki uzyskano przy użyciu symulatorów idealnych, co oznacza, że należy je traktować jako ciekawą inspirację do dalszych badań w przyszłości, a nie jako praktyczne podejście do wykorzystania na obecnych komputerach kwantowych.

2.4 Redukcja przestrzeni poszukiwań

Kolejnym sposobem, który pozwala na dalszą poprawę wyników w optymalizacji kwantowej, jest podejście oparte na włączeniu twardych ograniczeń w Hamiltonianie miksującym za pomocą algorytmu QAOA Ansatz. To podejście redukuje przestrzeń poszukiwań, zwiększając prawdopodobieństwo znalezienia rozwiązania dopuszczalnego. Odbywa się to jednak kosztem dodania większej liczby bramek dwukubitowych. Nie wszystkie twarde ograniczenia muszą być włączone do Hamiltonianu miksującego, ponieważ nie dla wszystkich ograniczeń jest to korzystne. W przypadku problemów decyzyjnych zazwyczaj nie można uwzględnić wszystkich ograniczeń. Jednak w odniesieniu do problemów omawianych w pracy udało się wyodrębnić podzbiór ograniczeń, które włączone do Hamiltonianu miksera, poprawiły skuteczność algorytmu.

W przypadku problemu taktycznej dekonflikcji statków powietrznych, włączenie twardego ograniczenia mówiącego, że każdy statek wykonuje dokładnie jeden manewr, do Hamiltonianu miksera zwiększyło prawdopodobieństwo pomiaru rozwiązania dopuszczalnego w instancji z 5

statkami powietrznymi, z których każdy miał 3 alternatywne manewry, z 11,69% do 77,33%, co stanowi ponad sześciokrotny wzrost. Jednakże to podejście nie poprawiło znacząco ogólnego kształtu rozkładu prawdopodobieństwa w optymalizacji mającej na celu minimalizację całkowitej liczby zmian wymaganych w pierwotnym planie lotów.

2.5 Złagodzenie ograniczeń w formułowaniu Hamiltonianów

Nieintuicyjne wydawać się może, że przyjęcie odwrotnego podejścia do ograniczenia przestrzeni poszukiwań może przynieść podobne rezultaty. Wykazano, że złagodzenie sformułowania problemu, aby uwzględnić szerszy zakres rozwiązań jako dopuszczalne, przy jednoczesnym zmniejszeniu liczby splątań, również wydaje się prowadzić do lepszych wyników. Jest to nowe podejście, opisane po raz pierwszy w niniejszej pracy doktorskiej. Polega ono na uproszczeniu Hamiltonianów generujących obwody posiadające wiele bramek dwukubitowych. Oznacza to, że w modelu problemu taktycznej dekonfliktacji dopuszcza się w danej chwili wykonanie przez statek powietrznych większej (niż standardowo - jeden) liczby manewrów jednocześnie. Dzięki tej modyfikacji zaobserwowano poprawę wydajności nie tylko w porównaniu do standardowych sformułowań Hamiltonianu, ale także do sformułowań kwadratowych (QUBO) znanych z komputerów opartych o kwantowe wyżarzanie, które obejmują najwyżej splątania drugiego stopnia. Przykładowo, w scenariuszu z 3 statkami powietrznymi i 5 manewrami zarejestrowano prawdopodobieństwo zmierzania dopuszczalnego rozwiązania wynoszące 0,0009%, w porównaniu do 0,0007% dla podejścia QUBO i 0,0001% dla standardowego sformułowania, w szczególnie trudnej instancji, gdzie istnieje tylko 5 wykonalnych rozwiązań spośród 215. Co ciekawe, wyniki te sugerują, że w przyszłości uniwersalne obliczenia kwantowe mogą stać się bardziej efektywne niż realizacje algorytmów kwantowego wyżarzania.

3. Prace wdrożeniowe

3.1 Portal QCG jako webowe narzędzie do rozwiązywania problemów kombinatorycznych na komputerach kwantowych i symulatorach

Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe, jako członek konsorcjum, brało udział w projekcie EuroHPC-PL, którego celem było zbudowanie krajowej infrastruktury do obliczeń dużej skali dla badań i przemysłu. PCSS było odpowiedzialne za opracowanie platformy do kwantowych badań operacyjnych i optymalizacji dyskretnych, a także za uzyskanie dostępu do infrastruktury do kwantowej optymalizacji kombinatorycznej. Pierwszy z tych elementów, o poziomie gotowości technologicznej (TRL) 9, był centralnym punktem badań wdrożeniowych w tej pracy. Cele projektu zrealizowano poprzez rozszerzenie i integrację istniejącego zestawu oprogramowania QCG oraz opracowanie nowych, nieistniejących wcześniej komponentów.

Podczas realizacji projektu stworzono warstwę dostępową do osadzania szablonów aplikacji oraz aplikacji zorientowanych na problem, oferując elastyczną i dostosowywalną platformę do różnych zastosowań. Platforma ta została zbudowana na komponencie QCG-Portal, umożliwiając użytkownikom przeglądanie, kontrolowanie i monitorowanie zadań za pomocą interfejsu webowego. Została ona również zintegrowana z QCG-Templates, co pozwoliło na dostosowanie widoków aplikacji poprzez parametryzację. Ponadto, wykorzystano QCG-API i QCG-Agent do autoryzacji i przesyłania zadań.

Opracowana platforma zawiera kilka wstępnie zdefiniowanych aplikacji graficznych, które pozwalają użytkownikom definiować instancje wybranych i zaimplementowanych problemów optymalizacji kombinatorycznej, takich jak problem MaxCut, problem Exact Cover oraz JSSP. Interfejs

umożliwia użytkownikom określenie rozmiaru i rodzaju instancji za pomocą intuicyjnego interfejsu graficznego lub tekstowego, bądź przez wczytanie wcześniej istniejących danych z pliku. Platforma wspiera również przysyłanie ogólnych zadań obliczeniowych dla dowolnego problemu optymalizacji poprzez wprowadzenie macierzy QUBO w interfejsie tekstowym lub przez wgranie jej z pliku. Użytkownicy mogą następnie wybrać architekturę, na której problem zostanie wykonany, w tym rzeczywiste komputery kwantowe lub symulatory wdrożone podczas projektu PRACE-LAB2. Dodatkowe opcje umożliwiają wybór odpowiedniego algorytmu optymalizacyjnego oraz dostosowanie jego hiperparametrów. Warto również zauważyć, że klasyczne części algorytmów hybrydowych zostały przygotowane do równoległego przetwarzania, co umożliwia ich wykonywanie na klastrach HPC lub superkomputerach, znacząco przyspieszając obliczenia.

Aplikacje dla wybranych problemów optymalizacji dyskretnej są dostępne za pośrednictwem QCG-Portal, który został zaadaptowany i funkcjonalnie rozszerzony na potrzeby projektu. QCG-Portal służy również jako narzędzie do zarządzania zasobami, uwierzytelniania użytkowników, przysyłania zadań do systemu kolejkowania oraz pobierania metadanych dotyczących przesłanych zadań. Opracowane szablony w ramach platformy ułatwiają również analizę wyników zadań za pomocą interaktywnego interfejsu graficznego, który prezentuje wyniki w formie wykresów dostosowanych do konkretnego problemu, algorytmu oraz architektury kwantowej. Należy zauważyć, że komponenty QCG wymagały dodatkowego rozszerzenia, aby w pełni obsługiwać przypadki użycia związane z obliczeniami kwantowymi. Konieczne było także wdrożenie widoków specyficznych dla tych zastosowań. Jednym z zaawansowanych narzędzi, które musiały zostać opracowane od podstaw, był QCG-QuantumLauncher (QCG-QL). Biblioteka ta umożliwia łatwe wykonywanie problemów kombinatorycznych na różnych komputerach kwantowych z użyciem wybranych algorytmów kwantowych.

3.2 Skydodge: menadżer ruchu lotniczego

Projekt EuroHPC PL skupiał się na dostarczeniu użytkownikom narzędzia do rozwiązywania wybranych problemów optymalizacji kombinatorycznej lub własnych macierzy QUBO na maszynach kwantowych. Chociaż te rozwiązania zostały pomyślnie wdrożone w ramach projektu, w niektórych scenariuszach wymagana była bardziej szczegółowa i specyficzna integracja z istniejącymi procesami. Tak było w przypadku projektu Quantum Air Traffic Management (QATM) (TRL 6), gdzie opracowano rozwiązanie kwantowe wspierające kontrolerów ruchu lotniczego.

Produkt opracowany w ramach projektu składa się z trzech modułów: logicznej warstwy kwantowej, która przetwarza dane wejściowe dotyczące statków powietrznych i generuje rozwiązanie problemu, QCG-Template, dostępnego przez QCG-Portal - umożliwiającego uruchamianie obliczeń na sprzęcie kwantowym lub klasycznych symulatorach, oraz SkyDodge - interaktywnego interfejsu monitorującego sytuację w przestrzeni powietrznej i wizualizującego potencjalne rozwiązania znalezione przez maszyny kwantowe. Kwantowa warstwa logiczna opiera się na efektach badań zebranych w opublikowanych artykułach i podsumowanych we wcześniejszych punktach.

Moduł kwantowy składa się z dwóch podmodułów: podmodułu generatora oraz podmodułu dekonfliktacji. Te podmoduły są zintegrowane na zasadzie działania w pętli. Generator tworzy scenariusze ruchu lotniczego z konfliktami i generuje możliwe trasy dla samolotów. Te trasy są następnie przysyłane do podmodułu dekonfliktacji, który identyfikuje konflikty i wykorzystuje sprzęt kwantowy do wyboru tras bezkonfliktowych, spełniających dodatkowe ograniczenia. Proces powtarza się, a generator aktualizuje scenariusze, dodaje sytuacje losowe (między innymi takie jak burze) i generuje nowe trasy, aż do zakończenia symulacji. Podmoduł dekonfliktacji umożliwia także przypisywanie wag do tras na podstawie preferencji użytkownika, co pozwala na optymalizację, taką

jak chociażby minimalizacja zużycia paliwa lub priorytetyzacja określonych lotów. Takie podejście zapewnia dużą elastyczność w zarządzaniu sytuacjami w przestrzeni powietrznej i umożliwia analizę oraz rozwiązywanie konfliktów w czasie bliskim rzeczywistemu.

Dobre praktyki ustalone podczas pracy nad projektem EuroHPC PL ułatwiły efektywne zaprojektowanie i wdrożenie widoku QCG-Portal. Interfejs ten pozwala użytkownikom na przesyłanie zadań na różne architektury kwantowe, w tym architekturę bramkową. Ponadto użytkownicy mają możliwość generowania instancji z wybraną liczbą statków powietrznych i manewrów oraz doboru parametrów sterowania, takich jak czas pętli odpowiedzi. System wizualizacji, SkyDodge, działa w trybie odtwarzania i przetwarza cały scenariusz ruchu lotniczego aż do jego zakończenia. System potrafi wizualizować trasy statków powietrznych, oznaczać sytuacje konfliktowe, wyświetlać wybrane alternatywne trasy, dostosowywać prędkość odtwarzania, przewijać scenariusz od wybranego momentu, filtrować podzbiory statków powietrznych oraz prezentować dodatkowe informacje o locie i warunkach powietrznych. Został on zaprojektowany w taki sposób, aby jasno pokazać działania kontrolera lub systemu dekonfliktacji oraz umożliwić szczegółową analizę podjętych decyzji.

3.3 QCG-QuantumLauncher: modułowy zestaw narzędzi do zarządzania kwantowymi scenariuszami aplikacyjnymi

Wstępne eksperymenty mające na celu zbadanie możliwości technologii kwantowych ujawniły znaczącą lukę w rozwiązaniach programistycznych wysokiego poziomu, które ułatwiłyby przeprowadzanie takich eksperymentów. Po pierwsze, oprócz podstawowych zasad formułowania Hamiltonianów w problemach optymalizacyjnych, nie istniało żadne narzędzie, które automatyzowałoby ten proces, co wymagało ręcznego tłumaczenia funkcji logicznych na Hamiltoniany. W związku z tym zdecydowano się opracować wewnętrzne narzędzie do tłumaczenia funkcji logicznych na Hamiltoniany, nazwane QCG-Hampy. Po drugie, dla każdego kolejnego podejścia eksperymentalnego cała ścieżka przetwarzania, w tym odczyt danych, wybór backendu kwantowego, wybór algorytmu, zapisywanie wyników itp., musiała być ponownie implementowana w kodzie. Aby uprościć ten proces, opracowano bibliotekę programistyczną o nazwie QCG-QuantumLauncher (QCG-QL), której QCG-Hampy został częścią, a która przekształciła się w dojrzałe i modułowe rozwiązanie do rozwiązywania klasycznych problemów obliczeniowych przy użyciu algorytmów kwantowych na komputerach kwantowych.

Główną korzyścią płynącą z użycia QCG-QL, którą można zaobserwować na pierwszy rzut oka, jest znaczące uproszczenie, jakie oferuje w zakresie wykonywania algorytmów kwantowych do rozwiązywania konkretnych problemów na różnych maszynach kwantowych. Jedną z zauważalnych zalet jest znaczne zmniejszenie wymaganej liczby linii kodu. W typowych eksperymentach QCG-QL redukuje kod z kilkuset linii do zaledwie kilku. Przykładowo, typowa implementacja QAOA rozwiązująca JSSP na bramkowym komputerze kwantowym, w tym proste zapisywanie wyników, zazwyczaj wymaga około 400 linii kodu. Używając QCG-QL, wystarczą jedynie 5 linii kodu. Redukcja ta nie byłaby tak imponująca, gdyby QCG-QL jedynie opakowywał konkretne bloki kodu w funkcje lub klasy. Jednak QCG-QL oferuje pełną modularność i elastyczność. Jego kluczową zaletą w porównaniu do podobnych bibliotek oprogramowania kwantowego jest możliwość przełączania się między różnymi architekturami kwantowymi. Użytkownicy mogą przełączyć się z bramkowego komputera kwantowego na komputer oparty o kwantowe wyżarzanie lub komputer realizujący próbkowanie bozoniczne za pomocą zaledwie jednej linii kodu. To samo dotyczy przełączania między różnymi problemami optymalizacyjnymi lub użytymi do ich rozwiązywania algorytmami. Wszystkie

wymagane procesy obsługiwane są przez QCG-QL w sposób niewidoczny dla użytkownika, przy minimalnym jego zaangażowaniu.

Chociaż narzędzie zostało po raz pierwszy publicznie zaprezentowane dopiero niedawno podczas wystąpienia konferencyjnego, było ono już wcześniej wykorzystywane do celów wewnętrznych. QCG-QL okazało się nieocenione w przeprowadzaniu eksperymentów dla prac zajmujących się problemem taktycznej dekonfliktacji statków powietrznych a także problemem ładowania pojazdów z silnikiem elektrycznym. QCG-QL służył także jako komponent kwantowy dla pełnych produktów i wyników projektów QATM i EuroHPC PL. Dzięki swojej dużej elastyczności i rozszerzalności QCG-QL umożliwił wdrożenie koncepcji integracji superkomputerów z komputerami kwantowymi w celu opracowania algorytmu hybrydowego, opisanego w następnym punkcie. Ponadto QCG-QL stanowi fundament dla przyszłych projektów integracyjnych. Biorąc pod uwagę wymienione zastosowania w wielu obszarach, QCG-QL można uznać za skuteczne narzędzie wspierające zastosowanie metod obliczeń kwantowych w rozwiązywaniu problemów optymalizacyjnych.

3.4 Rozszerzenia QCG-QL do rozwiązywania problemów kombinatorycznych w systemach hybrydowych

Jednym ze szczególnie istotnych obszarów badań z zakresu obliczeń kwantowych jest rozwój hybrydowych algorytmów klasyczno-kwantowych. Mało prawdopodobne jest, aby komputery kwantowe realizowały obliczenia niezależnie. Bardziej prawdopodobnym scenariuszem jest synergiczne współdziałanie komputerów klasycznych i kwantowych. Spodziewać się należy, że komputery kwantowe będą wykonywały pewne specyficzne obliczenia, przyspieszając obliczenia klasyczne, ale również obliczenia klasyczne będą stanowiły wsparcie dla obliczeń kwantowych.

W przypadku tego specyficznego, lecz szerokiego obszaru hybrydowych obliczeń klasyczno-kwantowych, QCG-QL również wykazuje swoją przydatność. W połączeniu z narzędziem QCG-PilotJob (QCG-PJ), usługą QCG zaprojektowaną do efektywnego wykonywania wielu zadań w ramach jednej alokacji, QCG-QL został wykorzystany do opracowania hybrydowego algorytmu, który wykorzystuje zasoby superkomputerowe do przyspieszenia procesu znajdowania optymalnych parametrów wariacyjnych dla algorytmu QAOA. Znalezienie optymalnych parametrów wariacyjnych dla QAOA jest trudne i kosztowne obliczeniowo. W omawianym podejściu narzut obliczeniowy jest nierównomierny, ponieważ większość obliczeń koncentruje się na początkowym etapie. To podejście ma również istotną wadę, polegającą na konieczności ustalenia liczby punktów początkowych podczas inicjalizacji algorytmu. Może to prowadzić do nadmiarowych obliczeń, jeśli optymalny zestaw parametrów zostanie znaleziony wcześniej. Z drugiej strony, jeśli liczba punktów początkowych okaże się niewystarczająca, algorytm może nie znaleźć optymalnych parametrów wariacyjnych.

Nowe podejście zapewnia efektywne wykorzystanie zasobów w ramach alokacji, ponieważ głębsze obwody kwantowe zazwyczaj wymagają większej mocy obliczeniowej niż płytsze. Należy zauważyć, że każdy blok optymalizujący parametry wariacyjne, reprezentuje hybrydową klasyczno-kwantową optymalizację QAOA. Ponieważ oczekuje się, że obliczenia kwantowe będą znacznie szybsze niż klasyczne, dostęp do kilku zasobów kwantowych wystarczy aby uruchomić dziesiątki takich procesów. Komputer kwantowy może być współdzielony między procesami klasycznymi i nie pozostaje bezczynny podczas klasycznej optymalizacji, co miałyby miejsce, gdyby każdy zasób kwantowy był powiązany z jedną jednostką klasyczną.

4. Podsumowanie

Niniejsza dysertacja podsumowuje prace przeprowadzone w trakcie czteroletnich studiów doktoranckich. Rozprawa rozpoczyna się od przeglądu obecnego stanu wiedzy w przedmiotowej dziedzinie badań oraz identyfikacji kluczowych problemów. Kolejne badania doprowadziły do opracowania specjalistycznych narzędzi, które następnie wykorzystano do przyspieszenia dalszych prac badawczych, tworząc pętlę, która umożliwiła realizację praktycznych aplikacji. Mimo że nie wszystkie wyzwania w tej dziedzinie zostały rozwiązane, praca ta wnosi istotny, spójny i uporządkowany wkład, zwłaszcza w zakresie wiedzy naukowej, narzędzi wspierających użytkowników oraz aplikacji do optymalizacji kwantowej.

Zastosowanie komputerów kwantowych w praktycznych zastosowaniach do rozwiązywania problemów optymalizacyjnych jest wciąż na początkowym etapie rozwoju. Większość obecnych rozwiązań dotyczy problemów o ograniczonym zastosowaniu. Problem ten wynika częściowo z nowości samej technologii, ale także z wysokiego progu wejścia dla specjalistów z przemysłu, spowodowanego brakiem narzędzi o wysokim poziomie abstrakcji, które ułatwiłyby przeprowadzanie obliczeń. Dodatkowo sytuację komplikuje istnienie różnych paradygmatów kwantowych, które wymagają podejść dedykowanych.

Pierwszą luką w dotychczasowych badaniach, którą zidentyfikowano i zajęto się w tej pracy, były eksperymenty z algorytmem QAOA. Sformułowano dedykowane Hamiltoniany dla JSSP, problemu ładowania pojazdów elektrycznych i problemu taktycznej dekonflikcji. Przeprowadzono eksperymenty dotyczące QAOA, obejmujące analizę strategii interpolacji optymalnych parametrów wariacyjnych, porównanie z kwantowym wyżarzaniem oraz badanie związku między energią a długością znalezionej uszeregowania zadań. Eksperymenty te pokazały praktyczne zastosowanie komputerów kwantowych do rozwiązywania rzeczywistych problemów optymalizacyjnych, a także przyczyniły się do wczesnego wykorzystania narzędzia QCG-QL oraz opracowania warstwy logicznej dla portalu EuroHPC PL i pomyślnego zakończenia projektu QATM.

Podczas prac badano także rozszerzenia algorytmów QAOA. Czysto kwantowa optymalizacja z użyciem algorytmu FALQON radziła sobie lepiej niż QAOA, szczególnie w przypadku długich obwodów, które jednak nie są możliwe do realizacji na obecnych komputerach kwantowych. Algorytm ograniczający przestrzeń poszukiwań okazał się obiecującą alternatywą, wykazując lepszą skuteczność w rozwiązywaniu problemów. Z kolei całkowicie nowe podejście, stojące w opozycji do obecnych, znanych algorytmów, a polegające na eksploracji większej liczby rozwiązań, także okazało się lepsze od standardowej wersji algorytmu QAOA. Co więcej, okazało się przewyższać tradycyjną metodę QUBO stosowaną na komputerach realizujących kwantowe wyżarzanie. Prowadzenie szerszych eksperymentów w ramach pracy było znacznie ułatwione dzięki wcześniej zaimplementowanym narzędziom, takim jak QCG-Hampy i QCG-QL.

Prace badawcze były ściśle powiązane z rozwojem aplikacji, co stworzyło samonapędzającą się pętlę. Główną siłą napędową tej pętli było narzędzie QCG-QL, które powstało z potrzeby bardziej efektywnych badań, a ostatecznie stało się przedmiotem zainteresowania szerszego grona odbiorców. W pierwszej kolejności, QCG-QL rozwiązało problem powtarzalności kodu przy przeprowadzaniu wielu eksperymentów z różnymi problemami, algorytmami lub komputerami kwantowymi. Po drugie, QCG-QL dostarczyło warstwę wysokopoziomowej abstrakcji, ukrywając przed użytkownikami szczegóły implementacyjne, pozostawiając jednocześnie otwartą możliwość dla bardziej zaawansowanych badaczy, którzy mogą rozszerzać moduły bazowe QCG-QL w celu prowadzenia bardziej zaawansowanych badań.

QCG-QL stanowiło kwantową bazę logiczno-obliczeniową dla dwóch projektów: EuroHPC PL i QATM. Projekt EuroHPC PL zakończył się zaprojektowaniem i wdrożeniem platformy

do rozwiązywania problemów optymalizacji kombinatorycznej, która umożliwia użytkownikom korzystanie z graficznego interfejsu do definiowania zadań oraz łatwego dostępu do dostępnych komputerów kwantowych. Platforma została zintegrowana z narzędziem QCG-Portal, co pozwoliło na organizację zadań, analizę wyników oraz monitoring.

Projekt QATM był drugim projektem, który zakończył się sukcesem, w ramach którego QCG-QL stanowił bazę logiczno-obliczeniową. Rozwiązania wypracowane w pracach badawczych umożliwiły taktyczną dekonfliktację statków powietrznych za pomocą algorytmów kwantowych, z możliwością optymalizacji kryteriów, takich jak minimalizacja zużycia paliwa czy liczba zmian trajektorii dla lotów o wysokim priorytecie. Wzięto pod uwagę również czynniki środowiskowe, takie jak burze, oraz ograniczenia administracyjne. Kwantowe rozwiązanie zostało wdrożone w usłudze QCG-Portal, stanowiąc naturalne rozszerzenie rozwiązań opracowanych w ramach projektu EuroHPC PL. Dodatkowo opracowano specjalne narzędzie o nazwie SkyDodge do wizualnej analizy procesu dekonfliktacji w trybie odtwarzania, które może ostatecznie służyć jako wsparcie dla kontrolerów lotów.



© 2024 Tomasz Pecyna

Politechnika Poznańska
Wydział Informatyki i Telekomunikacji
Instytut Informatyki

Typeset using L^AT_EX in Computer Modern.

BibT_EX:

```
@mastersthesis{ key,  
  author = "Tomasz Pecyna",  
  title = "{Zastosowanie metod obliczeń kwantowych do rozwiązywania problemów  
optymalizacyjnych.}",  
  school = "Poznan University of Technology",  
  address = "Pozna{\n}, Poland",  
  year = "2024",  
}
```