

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE MÉTODOS QUÂNTICOS VARIACIONAIS NA SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO COMBINATÓRIA

Nicole Carreta Nouer¹, Roberto Baginski Batista Santos²

¹ Departamento de Engenharia de Produção, Centro Universitário FEI

² Departamento de Física, Centro Universitário FEI

nicole.nouer@gmail.com, rsantos@fei.edu.br

Resumo: Este estudo avaliou experimentalmente o desempenho de um algoritmo quântico, simulado em ambiente clássico, em comparação com um algoritmo clássico, na resolução de instâncias difíceis do problema binário da mochila. Os resultados indicam que o método clássico apresentou melhor desempenho na solução de instâncias menores. No entanto, apesar das limitações da plataforma, que tornam a simulação clássica de um algoritmo quântico ineficiente, conclui-se que o método quântico tende a superar o clássico em condições apropriadas, especialmente quando o número de itens na instância é suficientemente grande, a partir de $n = 22$ itens no caso estudado.

1. Introdução

Problemas de otimização são aqueles que buscam alcançar a melhor solução possível dentro de diversas opções de escolhas sujeitas a limitações. Um exemplo importante é o problema binário da mochila (Binary Knapsack Problem – BKP) igualmente conhecido como 0-1 Knapsack Problem [1]. Uma formulação do problema consiste em imaginar que uma organização possui orçamento C para a realização de projetos, cada qual com custo w_i para ser realizado e capacidade de geração de valor igual a v_i , se realizado. A organização deve selecionar os projetos que maximizam o valor total $V_{\max} = \sum x_i v_i$ que os projetos selecionados geram sem exceder o orçamento ($W = \sum x_i w_i \leq C$). As variáveis binárias x_i indicam se o projeto i foi selecionado ($x_i = 1$) ou descartado ($x_i = 0$).

Este problema é classificado como NP-hard, isto é, as soluções conhecidas para este problema demandam, no pior caso, recursos que aumentam exponencialmente com o número de itens [1]. Ainda assim, o problema binário da mochila é considerado um dos problemas NP-hard mais simples porque a maioria de suas instâncias é fácil, podendo ser resolvidas por programação dinâmica, por algoritmos gulosos ou branch-and-bound [1,2].

Neste trabalho, avaliamos a capacidade do algoritmo quântico QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) determinar soluções ótimas para o problema binário da mochila no caso de instâncias difíceis do problema.

2. Metodologia

As instâncias difíceis para o problema binário da mochila foram construídas usando a prescrição de Chvátal [1]. Nesta prescrição, $v_i = w_i$ para todos os n itens, os custos w_i são escolhidos aleatoriamente entre $w_{\min} = 1$ e $w_{\max} = \lfloor 10^{n/2} \rfloor$ e o orçamento é dado por $C = \lfloor \frac{1}{2} \sum w_i \rfloor$.

Estas instâncias são difíceis porque a amplitude de valores para w_i e v_i é muito grande, a seleção de um item

de dado valor acarreta um custo equivalente e o orçamento não é nem muito pequeno, o que permitiria eliminar muitos itens rapidamente, nem muito grande, o que permitiria selecionar quase todos os itens.

A solução clássica do problema foi obtida usando o algoritmo variacional “NumpyMinimunEigensolver” do pacote NumPy para Python. O ambiente de execução escolhido foi Google Colab com unidades de processamento tensoriais (TPUs – Tensor Processing Units) de 334,6GB (RAM) e 225,3GB (HD).

A solução quântica foi baseada no seguinte procedimento. Inicialmente, o problema binário da mochila foi transformado em um problema de otimização binária quadrática irrestrita (QUBO – Quadratic Unconstrained Binary Optimization) com a introdução de variáveis de folga para transformar a restrição original $W \leq C$ sobre o custo total da carteira de projetos em uma igualdade com a introdução de penalidades quadráticas para inviabilizar soluções que não satisfaçam a restrição.

Em seguida, o problema QUBO é transformado em um hamiltoniano $\mathcal{H}$ para um modelo de Ising equivalente [4]. Um modelo de Ising descreve as interações magnéticas entre spins e pode ser simulado em um computador quântico [4].

O algoritmo QAOA é um método variacional cujo objetivo é minimizar a energia do sistema de spins descrito pelo modelo de Ising, o que corresponde à solução do problema inicial [3]. Para isso, parte-se da solução tentativa

$$|\psi_p(\vec{\gamma}, \vec{\beta})\rangle = e^{-i\beta_p \mathcal{H}_B} e^{-i\gamma_p \mathcal{H}_C} \dots e^{-i\beta_1 \mathcal{H}_B} e^{-i\gamma_1 \mathcal{H}_C} |s\rangle \quad (1)$$

em que $|s\rangle$ é o produto das superposições $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ dos estados da base computacional.

O conjunto de $2p$ parâmetros γ e β são parâmetros variacionais que devem ser determinados por um otimizador clássico para minimizar a função objetivo $\langle \psi_p(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) | \mathcal{H}_C | \psi_p(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) \rangle$, que corresponderia ao valor médio do hamiltoniano de custo $\mathcal{H}_C$ formado a partir da função objetivo do problema inicial. Escolhido um conjunto de valores para os parâmetros, a função objetivo é calculada pela execução de um circuito quântico em torno de 4000 vezes para que seja possível obter uma boa estimativa. Em seguida, os parâmetros são variados e o procedimento é repetido até que sejam encontrados os valores dos parâmetros que minimizam a função objetivo.

O hamiltoniano $\mathcal{H}_B$ é chamado de hamiltoniano de mistura e atua como uma perturbação que garante que a função objetivo $\langle \psi_p(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) | \mathcal{H}_C | \psi_p(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) \rangle$ depende dos parâmetros variacionais, o que não aconteceria se o estado variacional fosse obtido apenas pela evolução sob o hamiltoniano $\mathcal{H}_C$. Neste caso, apenas a fase do estado

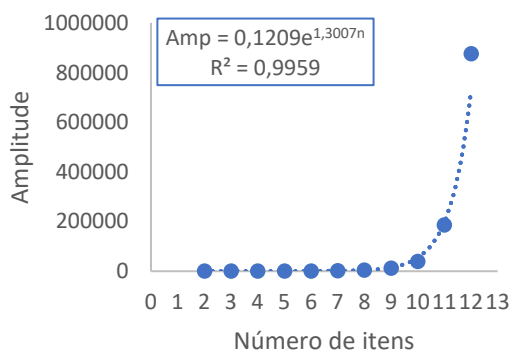
inicial seria modificada, o que não afetaria a função objetivo.

Uma das características da solução quântica do problema é que cada variável binária do problema QUBO, incluindo as variáveis de folga, deve ser representada por um qubit no modelo de Ising. Estas condições dificultaram que a solução quântica fosse testada completamente em um processador quântico real por causa das restrições existentes para número de qubits e tempo de uso contínuo disponíveis gratuitamente. Neste caso, a avaliação foi realizada por meio de uma simulação da execução do método quântico usando o pacote Qiskit para computação quântica no Google Colab incluindo ruídos e erros compatíveis com os existentes em processadores quânticos reais.

3. Resultados

A figura 1 mostra a amplitude dos valores de w_i de cada instância em função do número de itens n da instância. Observa-se que a amplitude do problema aumenta exponencialmente com o número de itens, isto é, os valores de w_i e de $v_i = w_i$ estão distribuídos em uma faixa de valores muito ampla, o que torna o problema difícil de ser resolvido.

Figura 1. Amplitude da instância em função do número de itens.



Fonte: autoria própria.

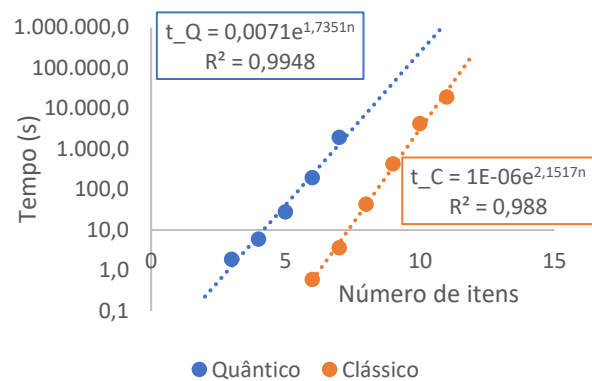
A dificuldade das instâncias esgotou a capacidade do ambiente de execução Google Colab para processar as soluções. No caso clássico, foi possível resolver variacionalmente instâncias com até 11 itens antes que a memória RAM se esgotasse e o processamento fosse interrompido. No caso quântico, foi possível simular a solução de instâncias com até 7 itens.

Um primeiro resultado relevante é que o método quântico conseguiu encontrar as soluções ótimas encontradas pelo método clássico para todas as instâncias analisadas.

A figura 2 apresenta o logaritmo do tempo de processamento necessário para obter as soluções em função do número de itens da instância. Observa-se que o método quântico apresenta desempenho pior do que o método clássico para as instâncias testadas. Porém, como a taxa de crescimento do tempo de processamento para o método quântico é menor do que a taxa de crescimento para o método clássico, estimamos que o desempenho do

método quântico simulado deve superar o desempenho do método clássico a partir de $n = 22$ itens.

Figura 2. Logaritmo do tempo em função do número de itens.



Fonte: autoria própria.

É importante lembrar que os resultados apresentados para o método quântico são para uma simulação clássica de seu funcionamento podendo haver vantagem adicional se o algoritmo QAOA for executado em um processador quântico real.

4. Conclusões

A simulação das instâncias difíceis do problema binário da mochila em um sistema clássico revelou sua incapacidade de operar com tal nível de complexidade. Os resultados mostram que, para cada item adicionado, tanto a amplitude da instância quanto o tempo de solução crescem exponencialmente, limitando o desempenho do método clássico a $n = 11$ e do quântico a $n = 7$. Embora o método quântico tenha mostrado eficiência inferior, sua taxa de crescimento exponencial, sendo menor que a do clássico, sugere que, a partir de $n = 22$ itens, ele ultrapasse o desempenho do método variacional clássico. Essa tendência indica que, em um processador quântico real, o algoritmo QAOA poderia apresentar vantagem adicional.

5. Referências

- [1] KELLERER, H; PFERSCHY, U.; PISINGER, D. **Knapsack Problems**. Berlin: Springer, 2004.
- [2] CHVÁTAL, V. **Operations Research** v.28, p.1402-1411, 1980.
- [3] FARHI, E.; GOLDSTONE, J.; GUTMANN, S. A **Quantum Approximate Optimization Algorithm**. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/1411.4028>>. Acesso em: 10 ago. 2024.
- [4] LUCAS, A. **Frontiers in Physics** v.2, p.5-1, 2014.

Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI pelas condições para a realização do projeto.

¹ Aluna de IC do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq (bolsa PIBIC-CNPq). Projeto com vigência de 09/23 a 08/24.