

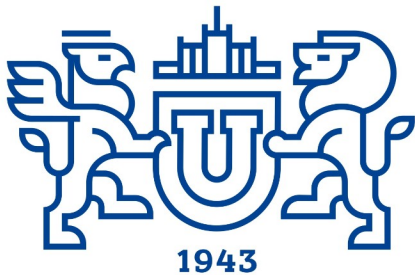


Russian Supercomputing Days

Семинар «Квантовые вычисления»

$$(1, 2, \dots) = \sum_{=1} \sum_{\geq}$$

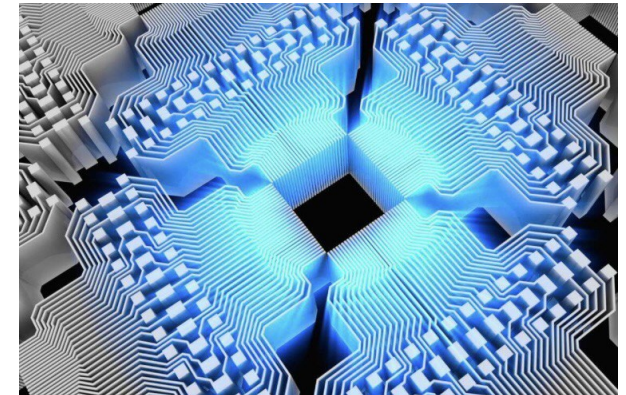
Квантовые и квантово-инспирированные отжигатели и алгоритмы реконструкции изображений на основе квантового отжига



ЮУрГУ

Николай Владимирович Малетин,
Лаборатория «Квантовая инженерия света»
Южно-Уральского Государственного Университета
MaletinNV@my.msu.ru, MaletinNV@susu.ac.ru
Telegram: @MaletinNV

24 сентября 2024 года
Москва



Основные типы квантовых компьютеров

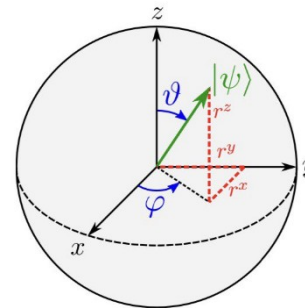
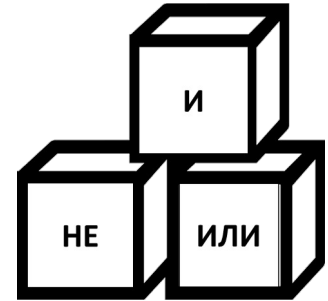
<p>GTQC (Gate-Type Quantum Computers) квантовые компьютеры вентильного типа</p>	<p>ATQC-QA (Adiabatic-Type Quantum Computers - Quantum Annealers) квантовые компьютеры адиабатического типа – квантовые отжигатели</p>
<p>Перспективы</p>	
<p>В перспективе 20+ лет кандидат № 1 на полномасштабные универсальные FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computers)</p>	<p>В перспективе нишевый специализированный инструмент только для решения задач оптимизации</p>
<p>Текущий момент</p>	
<p>Плохо эмулируется на классическом компьютере (30-50 кубитов, 1 бинарная переменная 1 кубит)</p>	<p>Современные эмуляторы уже работают с 10⁵-10⁷ бинарных переменных</p>

Квантовые компьютеры вентильного типа

Аналогия с цифровым классическим компьютером:

алгоритм классического компьютера собирается из логических вентилях трех типов;

алгоритм GTQC собирается из квантовых вентилях.



Математически:

кубит – это единичный вектор в 3D пространстве

$$= \cos(\vartheta/2) + e^{i\phi} \sin(\vartheta/2)$$

однокубитные вентили поворачивают вектор кубита на определенные углы относительно осей координат X, Y и Z;

двухкубитные вентили поворачивают вектор целевого кубита при условии, что вектор управляющего кубита направлен по направлению оси Z.

Квантовые компьютеры адиабатического типа – квантовые отжигатели. Система Изинга.

Аналоговый вычислитель на основе системы Изинга

Система Изинга - физическая система, которую можно описать моделью Изинга.

Модель Изинга

Граф с вершинами

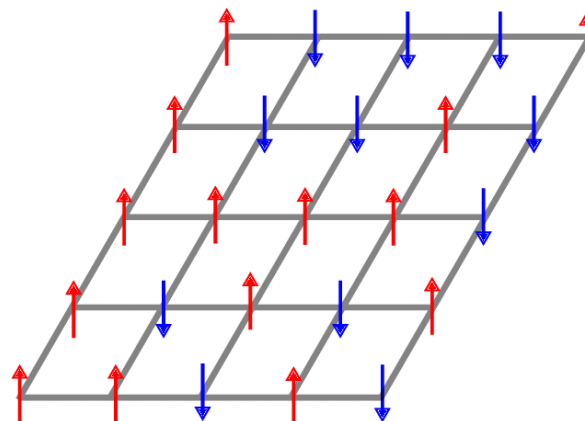
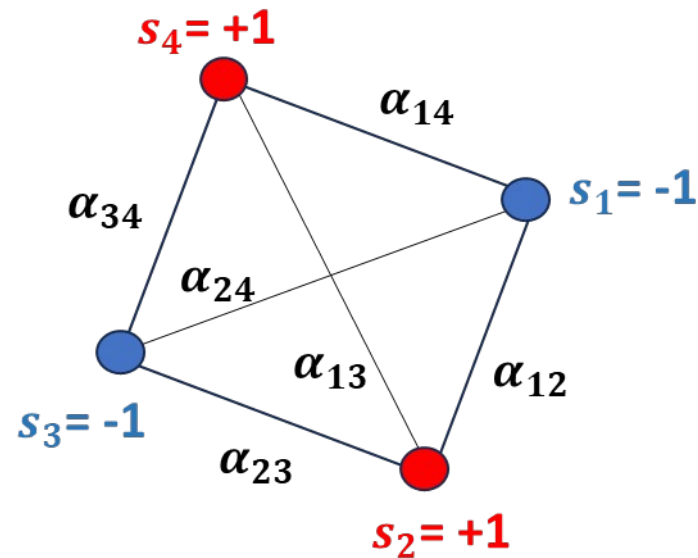
✓ каждая вершина находится в одном из двух состояний, характеризующихся числом (спином)

✓ ребра имеют постоянные веса (коэффициенты связи) ;

✓ величина спина вероятностно зависит от взвешенной суммы других спинов

(1)

– вероятность того, что в момент времени спин вершины $= +1$.



Динамика системы Изинга

Без внешних воздействий система Изинга эволюционирует в состояние с минимальной энергией

(2)

Система Изинга как аналоговый вычислитель

- ✓ кодируем переменные нашей задачи спинами :
- ✓ кодируем условия нашей задачи весами так, чтобы решению задачи соответствовали минимизирующие .

Квантовые компьютеры адиабатического типа – квантовые отжигатели. Адиабатическая теорема.

Адиабатическая теорема: при адиабатическом (\approx очень медленном) изменении параметров квантовая система, приготовленная в основном состоянии (состоянии с минимальной энергией), остается в нем.

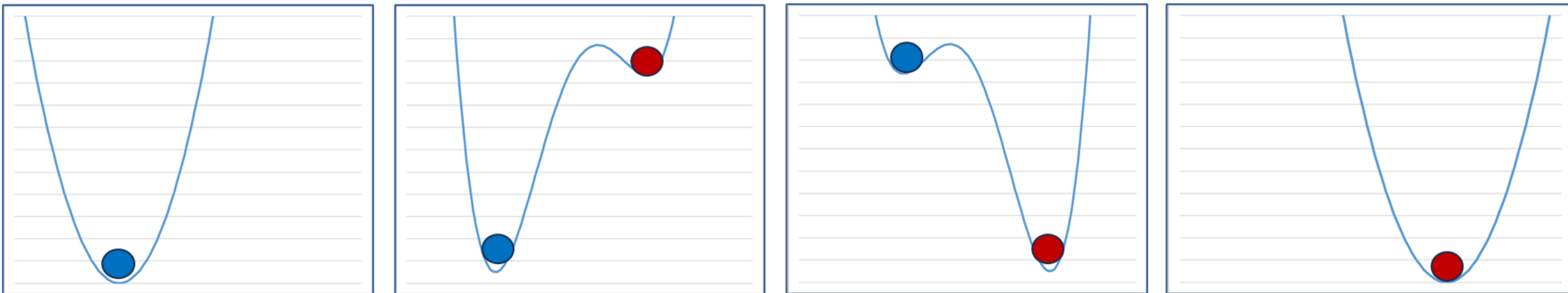
$$(\vec{r}, \vec{s}) = (\mathbf{1} - \dots) \quad 0^+$$

– вектор всех коэффициентов связи ,
– вектор всех спинов .

– гамильтониан системы с параметрами = ,
при которых ее легко приготовить в основном состоянии

– гамильтониан системы с параметрами = , кодирующими нашу задачу

При очень медленном изменении коэффициентов связи от = до= (= изменению параметра от 0 до 1), гамильтониан перейдет в оставаясь при этом в основном состоянии.



Эмуляция квантовых вычислений

Эмуляция вычислений

на вентилях

Программные эмуляторы

- 30-50 кубитов;
- основная проблема:
+1 кубит = RAM 2.

Тензорные сети (ПО)

- принцип действия:
аппроксимация многомерных массивов тензорным разложением;
- симулирование до 70 кубитов с fidelity 95%;

Эмуляция квантового отжига

Гибридный отжигатель

D::WAVE

- квантовая часть – 5760 кубитов;
- 1 млн. бинарных переменных;
- 200 млн. ненулевых связей.

Оптоэлектронная когерентная машина Изинга



- 100 тыс. бинарных переменных;
- 0,5 млрд. ненулевых связей.

Цифровой отжигатель

TOSHIBA

- 10 млн. бинарных переменных;
- 1 млрд. ненулевых связей.

Программные эмуляторы квантового отжига

Количество бинарных переменных ограничивается объемом памяти, но эффективно до 50 тыс.

Математика квантового отжига

Задачи QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization)

= , (1)
– бинарные переменные

QUBO = Ising

QUBO: Ising:
замена переменных:
(2)

Бинарная дискретизация (для задач с непрерывными переменными)

Простой пример:

(3)

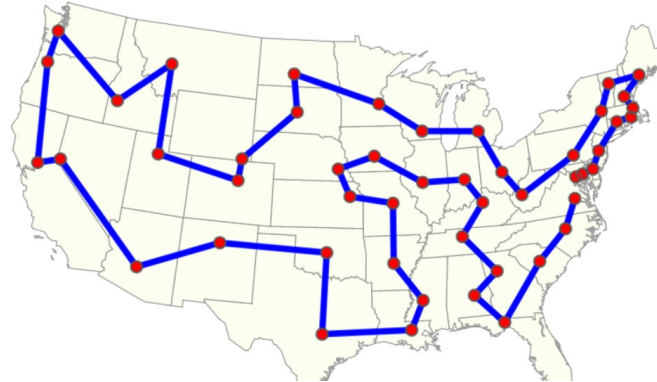
Общая формула:

, (4)

где – бинарные переменные.

Когда QUBO + QA > Classic?

Задачи комбинаторной дискретной оптимизации



Задачи оптимизации непрерывных функций со сложным ландшафтом



$$C(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} w_{ij} \sum_p x_{i,p} x_{j,p+1} + A \sum_p \left(1 - \sum_i x_{i,p}\right)^2 + A \sum_i \left(1 - \sum_p x_{i,p}\right)^2$$

Бизнес:

- ✓ логистика,
- ✓ финансы.



Наука:

- ✓ модели на решетках,
- ✓ биоинформатика.



Бизнес:

- ✓ финансы.

Наука:

- ✓ задачи параметризации сложных моделей различной природы.

Примеры задач оптимизации в бизнесе, решаемых с использованием гибридных и цифровых отжигателей

ЛОГИСТИКА

Компании Groovenauts и Mitsubishi Estate : **оптимизация сбора отходов** в районе Токио Маруноути.
Инструмент: **D-Wave**.

Параметры	До	После	Эффект
Маршрут сбора отходов, км	2296	1004	-56%
Количество транспортных средств	75	31	-59%

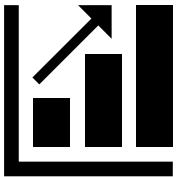


Компания SavantX: **оптимизация логистики в порту Лос-Анджелеса**.
Инструмент: **D-Wave**.

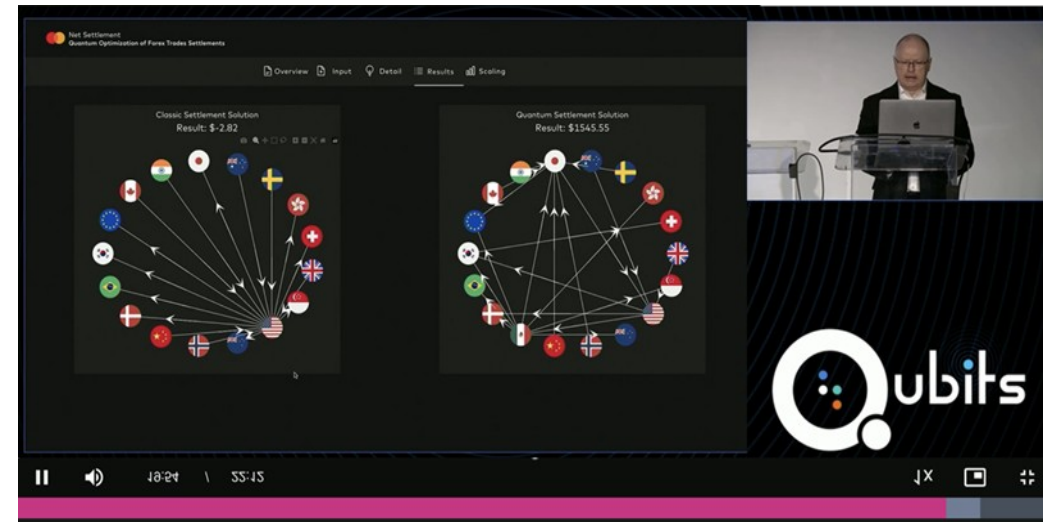
Параметры	До	После	Эффект
Загрузка крана, %	45	72	60%
Время возврата грузовика, мин.	66	58	-12%
Среднее расстояние между кранами, м.	8900	6200	-30%

ФИНАНСЫ

Компании National Westminster Bank , Fujitsu, 1QBit: **оптимизация портфеля активов** на сумму £120 млрд.
Результат: ускорение оптимизации в 300 раз.
Инструмент: **Fujitsu Digital Annealer**



Компания Mastercard: **оптимизации трансграничных расчетов**. Инструмент: **D-Wave**.

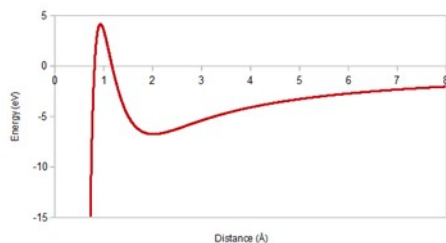


Mastercard на конференции **D-Wave** в декабре 2022г.

Направления возможного научно-практического применения отжигателей

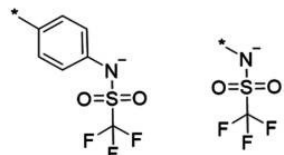
Задачи вычислительного материаловедения

Параметризация потенциалов межмолекулярного взаимодействия



N.V.Maletin, V.V.Dremov, I.I. Klebanov, On the possibility of using quantum annealers to solve problems of parametrization of intermolecular interaction potentials. *Laser Phys.* 2023 Lett. 20 115205, DOI [10.1088/1612-202X/acfd8e](https://doi.org/10.1088/1612-202X/acfd8e)

Молекулярный дизайн

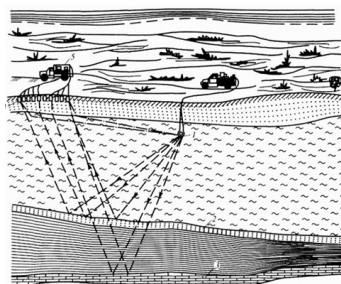


Sulfonylimide

Hatakeyama-Sato K, Uchima Y, Kashikawa T, Kimura K, Oyaizu K. Extracting higher-conductivity designs for solid polymer electrolytes by quantum-inspired annealing. *RSC Adv.* 2023 May 15;13(21):14651-14659. doi: [10.1039/d3ra01982a](https://doi.org/10.1039/d3ra01982a).

Задачи реконструкция внутренней структуры объектов и сред

Инверсия сейсмических данных



Малетин Н.В., О возможности решения масштабных одномерных задач инверсии сейсмических данных на современных квантовых отжигателях», *Геофизика*, 2023, 2, 102, DOI: [10.34926/geo.2023.59.58.012](https://doi.org/10.34926/geo.2023.59.58.012)

Реконструкция КТ/МРТ-изображений



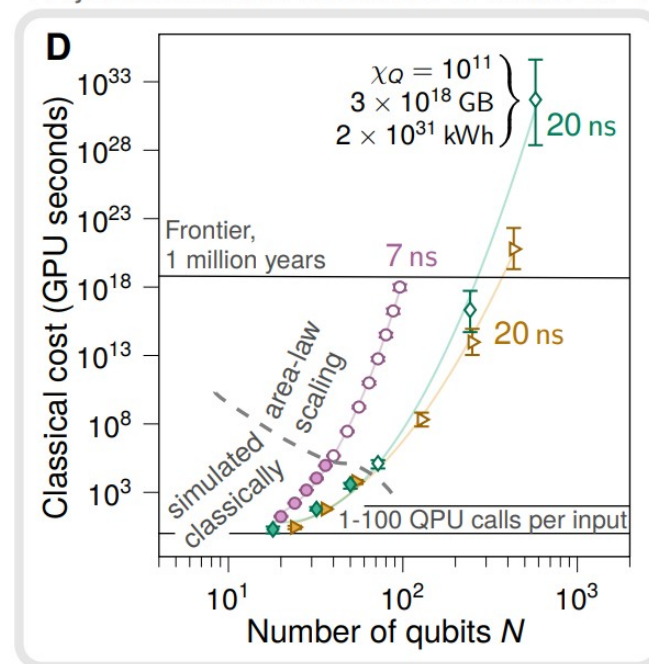
Nau MA, Vija AH, Gohn W, Reymann MP, Maier AK. Exploring the Limitations of Hybrid Adiabatic Quantum Computing for Emission Tomography Reconstruction. *J Imaging.* 2023 Oct 11;9(10):221. doi: [10.3390/jimaging9100221](https://doi.org/10.3390/jimaging9100221)

Модели на решетках

Моделирование квантовой динамики модели Изинга с поперечным полем

King A. D. et al. Computational supremacy in quantum simulation. arXiv preprint 2024. <https://arxiv.org/abs/2403.00910>

Projected classical resources to match QPU



Применение QA для задач реконструкции КТ-изображений

QA более устойчив к шумам в данных, чем классические алгоритмы реконструкции

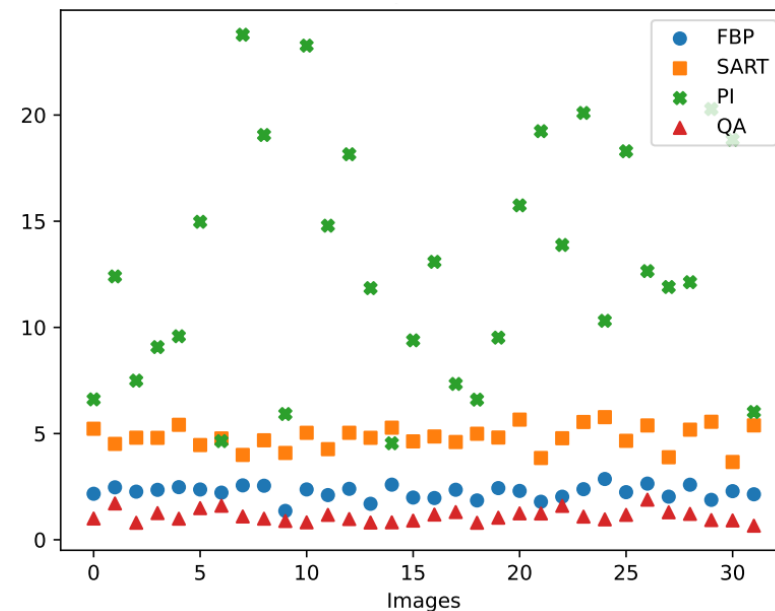
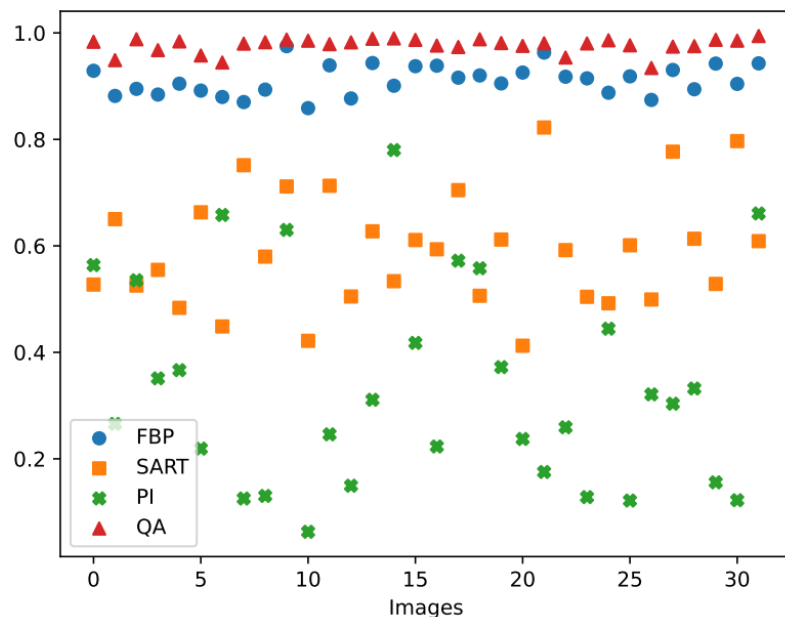
SSIM (Structural Similarity Index Measure) – индекс структурного соответствия

при использовании QA

VS

при использовании классических алгоритмов

SSIM (слева) и RMSE (справа) 32-х изображений 8 на 8 пикселей с 4-битным цветом из датасета UCI в присутствии случайного шума в данных измерения



Nau, M.A and al. Exploring the Limitations of Hybrid Adiabatic Quantum Computing for Emission Tomography

Reconstruction. *J. Imaging* 2023, 9, 221. <https://doi.org/10.3390/jimaging9100221>



Quantum Annealing (QA)

Classic Algorithms:

Filtered Backprojection (FBP),

Simultaneous Algebraic

Reconstruction Technique (SART),

Moore-Penrose Pseudoinverse (PI).

Если результат удастся масштабировать, то это открывает перспективу снижения лучевой нагрузки на пациентов, что важно для некоторых категорий пациентов и ряда заболеваний

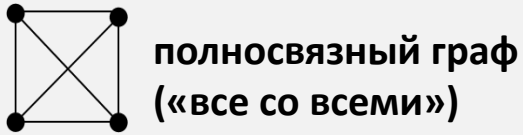
Проблема масштабирования

Низкая связность (0,04%)

D-Wave: 1 млн. бин. переменных, но лишь 200 млн. из 500 млрд. возможных связей = **полносвязная задача с ~ 20 тыс. бинарных переменных** = изображение 50 на 50 с 8-битным цветом

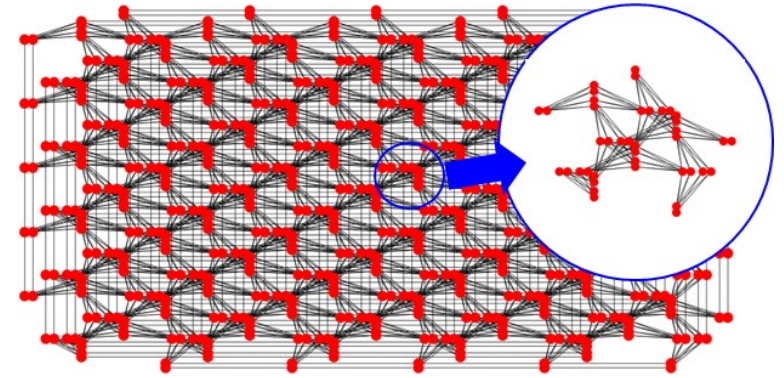
К-т связности = 200 млн./500 млрд.=0,04%

Полносвязная задача QUBO – задача QUBO, все коэффициенты в гамильтониане которой не равны нулю. Многие практические задачи являются **полносвязными или сильносвязными**.



При большом количестве проекций **измерений** задача реконструкции КТ-изображений **полносвязная**.

Существующие **универсальные алгоритмы приближенного решения больших задач QUBO** посредством понижения их размерности/декомпозиции на задачи меньших размеров **плохо применимы для больших задач**, т.к. **точность** получаемых решений резко **ухудшается** с ростом масштаба задачи.



Топология Pegasus QA D-Wave Advantage

50×50

максимальная размер КТ-изображения с 8-битным цветом, которое можно реконструировать на D-Wave, 50 на 50 пикселей

Текущий стандарт КТ-изображений: 8-битный цвет, 512 на 512 пикселей

↓
512 × 512

QA-алгоритм улучшения качества реконструкции КТ-изображений

50×50



Максимальный размер КТ-изображения с 8-битным цветом, которое можно реконструировать на D-Wave, 50 на 50 пикселей

128×128



Первое экспериментальное доказательство работоспособности нашего подхода - изображение 128 на 128 пикселей с 8-битным цветом

Текущий стандарт КТ-изображений: 512 на 512 пикселей с 8-битным цветом



512×512

Верхний ряд слева направо: истинное изображение, FBP-реконструкция и QA-тюнинг.

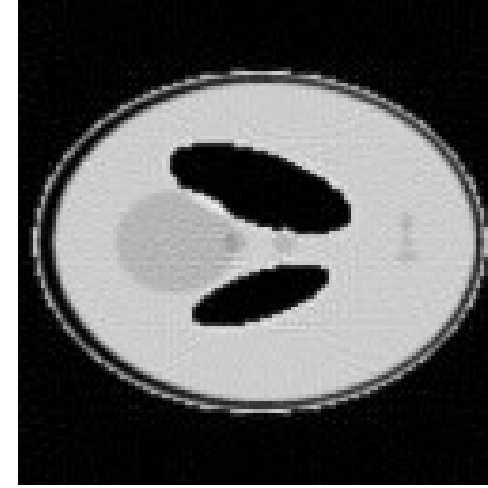
Нижний ряд: абсолютная величина попиксельного расхождений между различными изображениями в «растянутой» в 50 раз шкале, т.е. умноженной на 50



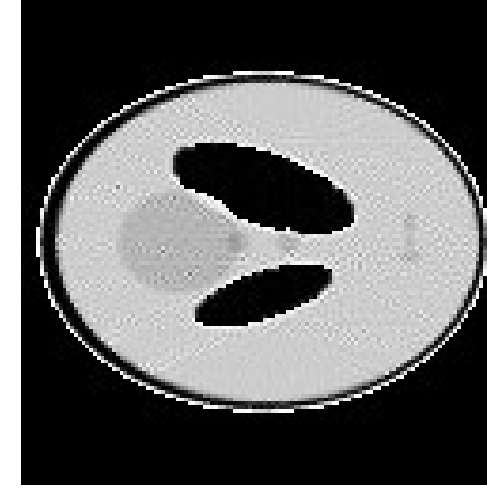
True image



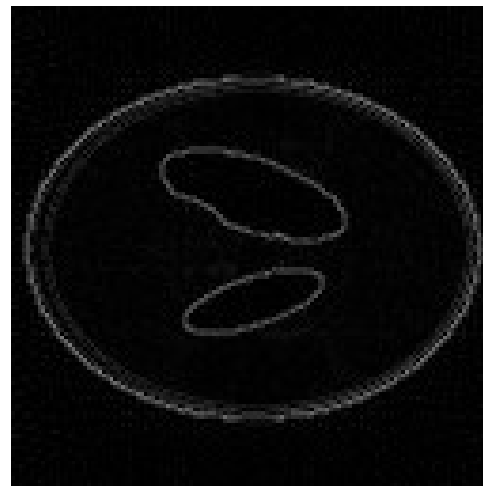
FBP-reconstruction
NRMSE = 6,7%



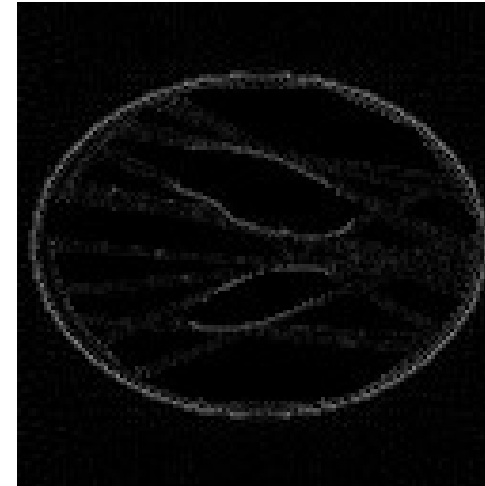
QA-tuning
NRMSE = 3,2%



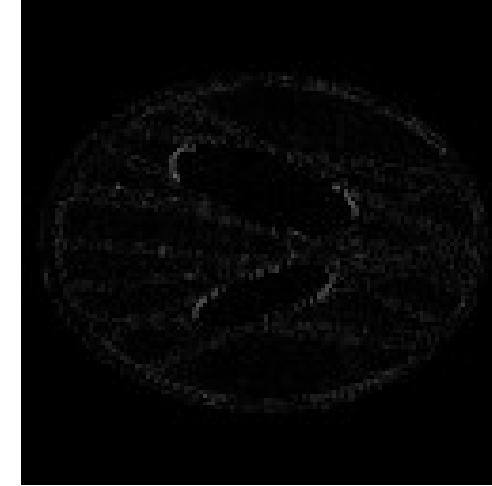
|*50



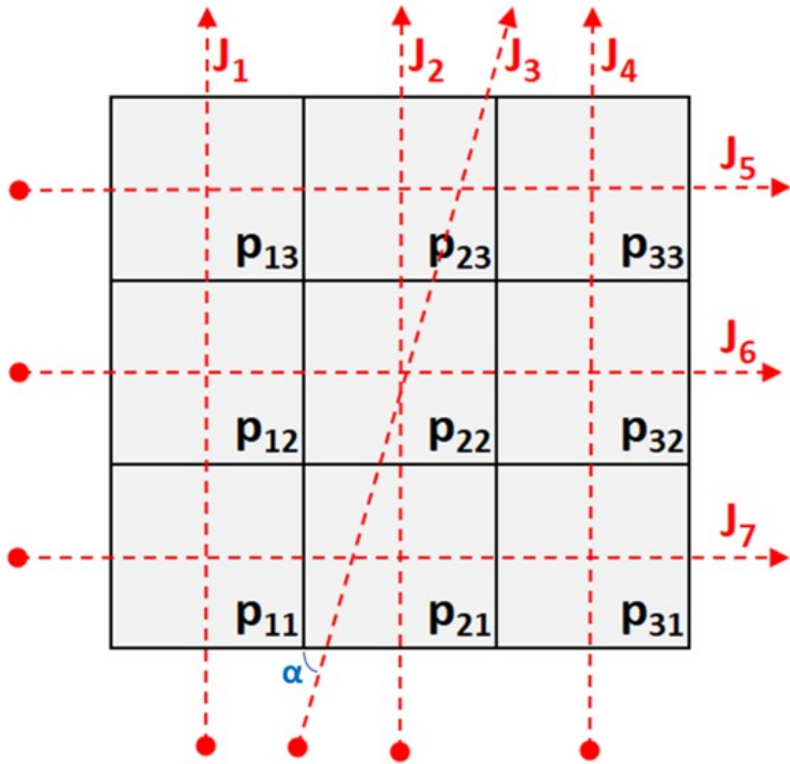
|*50



|*50



Математическая постановка задачи реконструкции КТ-изображений



I_0 – интенсивность луча перед входом в объект.

– интенсивность луча, прошедшего расстояние d через объект с постоянным коэффициентом поглощения x .

– интенсивность k -го луча, прошедшего через поле изображения, разбитого на пиксели с постоянными коэффициентами поглощения (цветом) .

Задачу реконструкции теперь можно сформулировать как задачу оптимизации с ограничениями

где для любых i и j .

Бинарная дискретизация:

Задача QUBO:

Применение QA к задаче инверсии сейсмических данных

Задача инверсии сейсмических данных – определения структуры и состава геологических пород посредством анализа данных об отраженных акустических волнах.

Модельная задача: акустическое 1D приближение для горизонтально-слоистой среды с априорной информацией о параметрах слоев, выраженной произвольными функциями.

Математическая модель. Минимизируемый функционал:

+

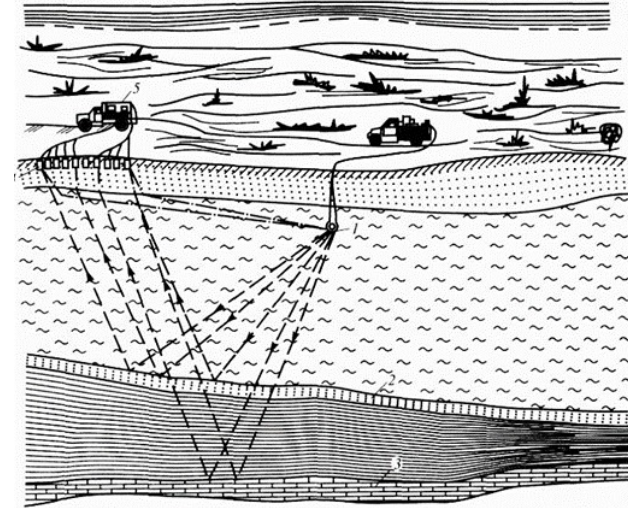
.

Шаг 1. Декомпозиция исходной задачи на более простые подзадачи на уравнение от одной неизвестной + функционал более простого вида

+

.

Шаг 2. Сведение к задачи QUBO с минимальным количеством бинарных переменных



Размер задачи QUBO $K = M/\varepsilon^2$ бинарных переменных, где M – количество слоев, ε – точность дискретизации.

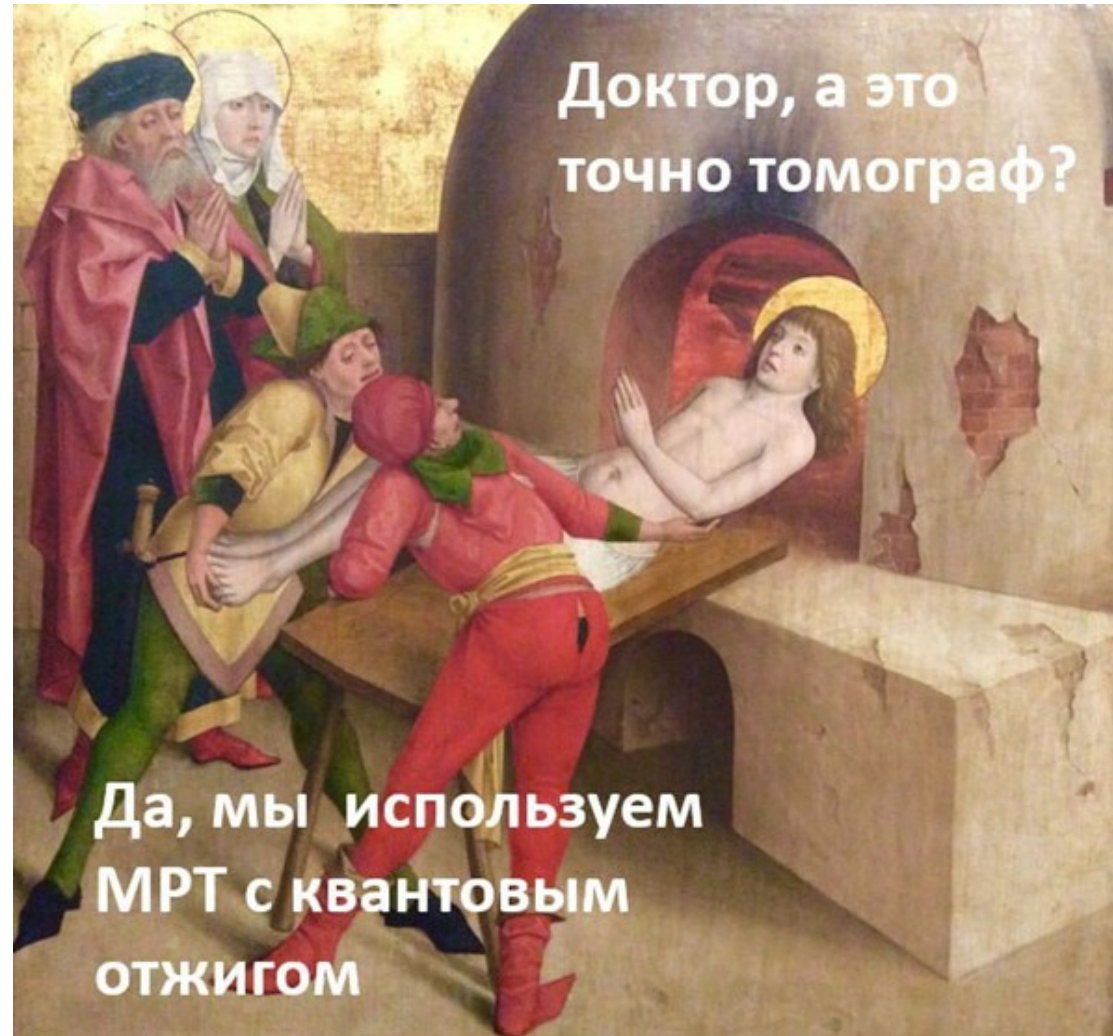
При $M = 100$, $\varepsilon = 0,1$ получаем $K = 10\,000$.

Оценка времени расчета на D-Wave среднего месторождения (10 x 10 км, сетка с шагом 25 м) ~ 1,5 мес.

Малетин Н.В., «О возможности решения масштабных одномерных задач инверсии сейсмических данных на современных квантовых отжигателях», *Геофизика*, 2023, 2, 102,

DOI: [10.34926/geo.2023.59.58.012](https://doi.org/10.34926/geo.2023.59.58.012)

Thanks for your attention!



We are waiting for you again!