

SOLUÇÕES DE ALGUMAS INSTÂNCIAS DO PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE POR MEIO DO MÉTODO VARIACIONAL DE RAYLEIGH–RITZ APLICADO NA PLATAFORMA IBMQ

Gabriel Krzyzanowsky¹, Rodrigo Bloot¹, Anton Simen Albino²

¹Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA), Foz do Iguaçu-PR,

Brasil, gabrielkrzyzanowski@outlook.com

²Kipu Quantum, Roonstraße 23a, 76137 Karlsruhe, Germany

Resumo: O problema do Caixeiro Viajante é um dos mais conhecidos problemas da classe NP-hard. Neste trabalho, foi estudada sua formulação em termos do Hamiltoniano de Ising e algumas instâncias do problema simétrico foram resolvidas utilizando o método variacional dado pelo algoritmo híbrido denominado Variational Quantum Eigensolver. Os experimentos foram comparados com as respostas fornecidas por uma rotina baseada no método Simplex. Os resultados apresentados indicam um cenário encorajador para o uso de tecnologias quânticas na solução deste problema.

Palavras-chave: Problema do Caixeiro Viajante; Hamiltoniano de Ising; Algoritmos Quânticos Variacionais.

INTRODUÇÃO

O uso de computadores quânticos para resolver problemas de várias áreas do conhecimento é uma promessa que justificou diversos estudos e motivou esforços para a construção de dispositivos capazes de atingir a tão sonhada *Supremacia Quântica* (Preskill, 2012). Várias empresas e entidades governamentais estão investindo quantias consideráveis de recursos nestas novas tecnologias.

Entretanto, a situação atual dos computadores quânticos reais ainda está longe do idealizado e são pouco úteis em aplicações de larga escala. Foi neste cenário que Preskil (2018) criou o termo *Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) Computers*, para referir-se aos computadores quânticos da era pré supremacia quântica.

Nesse contexto, estudos vêm sendo feitos para compreender os problemas que podemos atacar com tais dispositivos. Segundo Cerezo et al. (2021), os Algoritmos Variacionais se apresentam como melhores candidatos para a obtenção de alguma vantagem computacional utilizando computadores quânticos da era NISQ. Um dos algoritmos quânticos variacionais mais conhecidos é o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), introduzido por

Peruzzo et al. (2014). Para uma satisfatória utilização do VQE em problemas de otimização binária é necessário a correta formulação do problema em termos de suas restrições por meio do uso de penalidades equivalentes.

A introdução de penalidades na restrição permite converter um problema restrito em uma forma irrestrita, no sentido da definição. No caso de variáveis binárias, tais problemas são conhecidos como QUBO (do inglês “Quadratic Unconstrained Binary Optimization”).

O Problema do Caixeiro Viajante (PCV), pode ser caracterizado a partir do seguinte questionamento: Dado um grupo de cidades e o custo para viajar entre pares do grupo, qual é o caminho mínimo que passa por todas as cidades e retorna ao ponto inicial minimizando o custo total atrelado à viagem? No caso simétrico $d_{ij} = d_{ji}$, sendo d_{ij} o custo, ou distância, da viagem de i para j .

No presente trabalho, aplicamos um procedimento utilizando o algoritmo VQE na resolução de instâncias do PCV para o caso simétrico. Na seção MATERIAL E MÉTODOS, estabelecemos como será o quadro de trabalho descrevendo de forma sucinta as ferramentas utilizadas.

Na seção EXEMPLO ILUSTRATIVO, introduzimos um exemplo didático simplificado com o objetivo de tornar clara a metodologia usada. Na sequência, aplicamos este “framework” no problema alvo comparando os resultados com os obtidos através de um solver baseado em Programação Linear. Encerramos o trabalho com uma discussão e conclusão.

MATERIAL E MÉTODOS

Uma descrição detalhada das ferramentas e procedimentos adotados na computação quântica podem ser encontrados em detalhes na referência Mermin (2007). Uma exposição curta e didática sobre os algoritmos canônicos também pode ser encontrada em Anton et al. (2020).

As simulações foram feitas utilizando o kit de desenvolvimento de software (SDK) open-source QISKit (criado pela IBM), onde é possível trabalhar com circuitos quânticos a nível de pulsos. A linguagem de programação usada para as implementações foi a Python, e o método de solução implementado no simulador foi o Variational Quantum Eigensolver (VQE).

O VQE é utilizado para encontrar o valor aproximado de energia do estado fundamental referente a um operador Hamiltoniano que descreve o problema em questão. Uma função custo, cujo valor mínimo contém a solução do problema, é escrita como o valor esperado desse operador. Utilizando então o princípio variacional de Rayleigh-Ritz encontra-se o estado fundamental do sistema, e consequentemente, uma aproximação para o autovalor mínimo do operador.

O valor esperado do Hamiltoniano é calculado através do princípio variacional realizando a medida de um número polinomial de valores esperados de produtos tensoriais de matrizes de Pauli e da matriz identidade (Peruzzo et al. 2014). O VQE atua sobre os operadores Hamiltonianos independentemente de suas expressões. Porém, no caso do problema abordado no presente trabalho, é necessário escrever o Hamiltoniano no formato de Ising.

Para medir o valor esperado do operador Hamiltoniano utilizamos um circuito variacional, o qual é parametrizado por um conjunto de ângulos, sendo denominado como *Ansatz*. A forma variacional deste circuito possui forte impacto nos resultados.

O PCV é usualmente formulado como um problema de programação linear binária restrita, onde procura-se encontrar a configuração que minimize uma função custo sujeita a um conjunto de restrições. Devemos então transformar o problema restrito em um problema sem restrições e, posteriormente, apresentá-lo como um Hamiltoniano de Ising.

Para isso, empregaremos o princípio de penalização externa bem conhecido das técnicas de otimização (Ribeiro e Karas, 2013).

Também utilizaremos o procedimento estudado por Glover et al. (2018), onde para cada restrição, somamos a função custo uma penalidade equivalente, cuja forma depende da restrição em questão. Na Tabela 1 estão ilustradas algumas penalidades equivalentes conhecidas. O valor da constante P deve ser escolhido de maneira a adequar o modelo, sendo usualmente um valor grande escolhido, de modo que o “impacto” da penalidade equivalente na função custo seja significativo. Assim, ao final do procedimento obtemos uma função custo irrestrita no formato QUBO.

Tabela 1. Relação restrição/penalidade para alguns casos conhecidos.

Restrição	Penalidade equivalente
$x + y \leq 1$	$P(xy)$
$x + y \geq 1$	$P(1 - x - y + xy)$
$x + y = 1$	$P(1 - x - y + 2xy)$
$x_1 + x_2 + x_3 \leq 1$	$P(x_1x_2 + x_1x_3 + x_2x_3)$

Finalmente, é utilizada a transformação introduzida por Andrew Lucas (2014) para obter um Hamiltoniano de Ising a partir de um problema QUBO. Com esse método somos capazes de resolver o PCV através do VQE.

No entanto, como o problema é formulado como um QUBO e o ansatz possui uma arquitetura independente do problema, uma forma mais eficiente de se calcular o valor esperado do Hamiltoniano é dada simplesmente pela soma dos custos referentes a cada autoestado (bitstring) medido, ponderado pelas suas respectivas probabilidades.

EXEMPLO ILUSTRATIVO

Para tornar claro o entendimento dos procedimentos descritos na seção anterior introduziremos um exemplo didático com o uso de duas variáveis binárias. Mostraremos todos os passos, incluindo expressões explícitas em cada etapa. O exemplo em questão é um problema trivial de otimização linear restrita, que não possui nenhuma relação direta com o problema de otimização alvo do presente trabalho.

Considere o problema abaixo:

$$\text{Minimizar} \quad y = 3x_1 + 2x_2 \quad (1)$$

$$\text{sujeita a} \quad x_1 + x_2 = 1 \quad (2)$$

$$x_i \in \{0, 1\}, i = 1, 2.$$

Trata-se de um problema cuja solução pode ser determinada de forma simples e está ilustrada na Tabela 2.

Tabela 2. Solução do problema exemplo proposto. A configuração que minimiza a função custo está destacada em azul, assim como o valor mínimo.

x_1	x_2	y
0	0	0
0	1	2
1	0	3
1	1	5

O problema proposto pode ser escrito na forma de um QUBO por meio da introdução de penalidades externas já estabelecidas, resultando no seguinte problema equivalente:

$$\text{Min } q = 3x_1 + 2x_2 + P(1 - x_1 - x_2)^2 \quad (3)$$

$$x_i \in \{0, 1\}, i = 1, 2.$$

Introduzindo a penalidade $P = 10$ obtemos:

$$\text{Min } q = 10 - 7x_1 - 8x_2 + 20x_1x_2. \quad (4)$$

Este problema possui a mesma solução que o original, que pode ser observada na Tabela 3.

Tabela 3. Solução do problema exemplo proposto através da segunda formulação. A configuração que minimiza a função custo está destacada em azul, assim como o valor mínimo.

x_1	x_2	q
0	0	10
0	1	2
1	0	3
1	1	15

O objetivo agora é converter o problema para uma nova forma dada em termos do Hamiltoniano de Ising seguindo a abordagem de Andrew Lucas (2014). Esta técnica consiste em representar as variáveis binárias como variáveis de spin a ponto de utilizar operadores de Pauli, já conhecidos da computação quântica (Mermin, 2007).

Vamos realizar uma mudança de variáveis saindo da variável binária $x_i \in \{0, 1\}$ para a variável de spin $z_i \in \{-1, 1\}$ com $i = 1, 2$. Tal transformação de variáveis obedece a regra abaixo:

$$x_1 = \frac{1-z_1}{2} \quad \text{e} \quad x_2 = \frac{1-z_2}{2}. \quad (5)$$

Fazendo a mudança proposta obtemos o problema reformulado dado por:

$$\text{Min } h = 7,5 - 1,5z_1 - z_2 + 5z_1z_2 \quad (6)$$

$$z_i \in \{-1, 1\}, i = 1, 2.$$

Utilizando o produto tensorial de Kronecker e os operadores de Pauli dados por I e Z com as equivalências $\mathbf{1} \rightarrow I \otimes I$, $z_1 \rightarrow Z \otimes I$, $z_2 \rightarrow I \otimes Z$ e $z_1 z_2 \rightarrow Z \otimes Z$ obtemos o seguinte Hamiltoniano de Ising:

$$H = 7,5I \otimes I - 1,5Z \otimes I - I \otimes Z + 5Z \otimes Z, \quad (7)$$

o qual corresponde a uma matriz diagonal com elementos da diagonal principal especificados por:

$$H = \begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15 \end{bmatrix} \quad (8)$$

O operador já é dado em termos de bases de Pauli I e Z tornando simples o procedimento de medida, levando em conta que na plataforma da IBM as medidas são todas realizadas nesta base. Vamos aplicar o VQE neste operador utilizando o ansatz two-local da Qiskit. O Ansatz escolhido é ilustrado na Fig. 1 e é definido por meio de 2-qubits.

Ao utilizarmos o princípio variacional de Rayleigh-Ritz, transformamos um problema de 2 variáveis binárias em um com 8 variáveis contínuas, cujos valores iniciais são escolhidos de forma aleatória. Para as simulações feitas, foram utilizados 1024 “tiros”, e o estado final obtido pode ser observado na Fig. 2.

Detalhes sobre a preparação da forma variacional podem ser encontrados em Cerezo et al. (2021). Neste trabalho os autores fazem uma análise profunda sobre métodos variacionais.



Figura 1. Circuito quântico representando o ansatz denominado por *Two-Local*, que pertence à classe de ansatz eficientes da biblioteca da Qiskit.

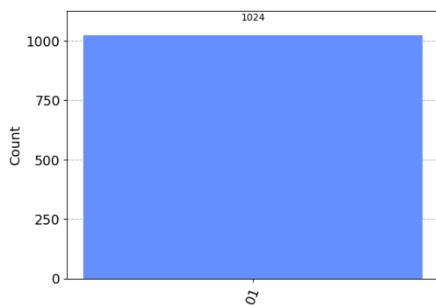
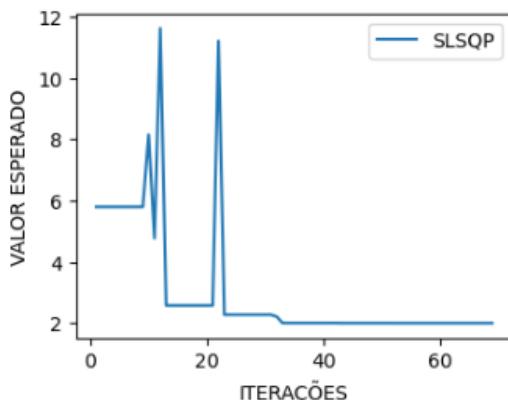


Figura 2. Histograma com estados medidos

Associando cada variável binária a um estado do qubit medido, consequentemente teríamos a resposta corresponde ao estado $|01\rangle$. Neste caso a resposta obtida coincide com o resultado ilustrado das Tabelas 1 e 2. A convergência do otimizador clássico adotado é dada na Fig. 3. Nessa figura podemos ver que o método converge satisfatoriamente para o valor mínimo do problema original. Adotando a mesma estratégia, vamos resolver algumas instâncias do PCV, onde o número de qubits a ser utilizado é maior, implicando em uma maior dimensão do operador Hamiltoniano de Ising.

Figura 3. Convergência do VQE para o valor mínimo do valor esperado utilizando o *Two-Local* como Ansatz.

PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE

Vamos aplicar a metodologia descrita na seção anterior ao Problema do Caixeiro Viajante (PCV) simétrico cuja configuração é descrita na Fig. 4 através de um grafo com 4 vértices representando as cidades, e 6 arestas representando as respectivas distâncias entre pares de cidades.

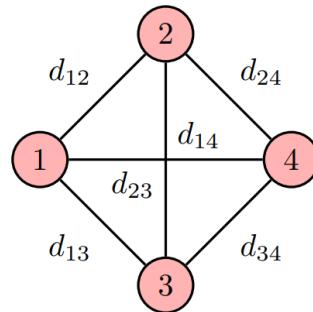


Figura 4. PCV para 4 cidades.

A formulação para o PCV simétrico pode ser descrita em termos de um problema linear binário com as variáveis de decisão x_{ij} assumindo valores 0 ou 1, onde $x_{ij} = 1$ se a aresta ij faz parte do conjunto solução e $x_{ij} = 0$ caso contrário. O problema em sua forma operacional é descrito abaixo seguindo a formulação DFJ (Dantzig et al, 1954) dada por:

$$\begin{aligned} \text{Min } & z = d_{12}x_{12} + d_{13}x_{13} + d_{14}x_{14} \\ & + d_{23}x_{23} + d_{24}x_{24} + d_{34}x_{34} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \text{sujeita a } & x_{12} + x_{13} + x_{14} = 2 \\ & x_{12} + x_{23} + x_{24} = 2 \\ & x_{13} + x_{23} + x_{34} = 2 \\ & x_{14} + x_{24} + x_{34} = 2 \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & x_{12} + x_{13} \geq 1 \\ & x_{12} + x_{14} \geq 1 \\ & x_{13} + x_{14} \geq 1 \\ & x_{23} + x_{24} \geq 1 \\ & x_{ij} \in \{0, 1\}. \end{aligned} \quad (11)$$

O problema linear acima pode ser resolvido por meio do conhecido método Simplex, também introduzido por George Dantzig. Nossa parâmetro de comparação são as soluções fornecidas pelo solver baseado nesta técnica.

Como estamos tratando do caso simétrico, o problema apresenta seis variáveis de decisão para serem determinadas. Usando as penalidades equivalentes estabelecidas em Glover et al. (2018), neste caso o problema é convertido em um QUBO e posteriormente em um Hamiltoniano de Ising

seguindo o quadro de trabalho apresentado na seção anterior.

Como já mencionado, Glover et al. (2018) fez um estudo detalhado sobre restrições e penalidades equivalentes que podem ser usadas. Nas restrições de igualdade, dadas por (10), o procedimento é o mesmo realizado em penalidade externa. No caso das restrições de desigualdade, dadas por (11), não será necessário introduzir variáveis de folga. Vamos usar as equivalências da Tabela 1. Para tornar mais simples a notação faremos as seguintes convenções:

$$(d_{12}, d_{13}, d_{14}, d_{23}, d_{24}, d_{34}) \rightarrow (d_1, d_2, d_3, d_4, d_5, d_6)$$

$$(x_{12}, x_{13}, x_{14}, x_{23}, x_{24}, x_{34}) \rightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6).$$

O problema de minimização equivalente dado em forma de um QUBO é descrito abaixo:

$$\begin{aligned} \text{Min } q = & d_1 x_1 + d_2 x_2 + d_3 x_3 + d_4 x_4 + d_5 x_5 + d_6 x_6 \\ & + P(4 - 3x_1 - 3x_2 - 3x_3 + 2x_1 x_2 + 2x_1 x_3 + 2x_2 x_3) \\ & + P(4 - 3x_1 - 3x_4 - 3x_5 + 2x_1 x_4 + 2x_1 x_5 + 2x_4 x_5) \\ & + P(4 - 3x_2 - 3x_4 - 3x_6 + 2x_2 x_4 + 2x_2 x_6 + 2x_4 x_6) \\ & + P(4 - 3x_3 - 3x_5 - 3x_6 + 2x_3 x_5 + 2x_3 x_6 + 2x_5 x_6) \\ & + P(1 - x_1 - x_2 + x_1 x_2) + P(1 - x_1 - x_3 + x_1 x_3) \\ & + P(1 - x_2 - x_3 + x_2 x_3) + P(1 - x_4 - x_5 + x_4 x_5) \end{aligned} \quad (12)$$

Tabela 4. Instâncias e respectivas distâncias entre cidades.

Instância	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6
TSP01	12	7	123	4	21	34
TSP02	10	15	20	3	1	7
TSP03	2	5	4	6	1	12
TSP04	4	25	14	9	11	22

Tabela 5. Caminhos mínimos obtidos utilizando o método Simplex.

Instância	<i>Tour mínimo</i>
TSP01	74
TSP02	33
TSP03	16
TSP04	49

Adotaremos a penalidade $P = 20$ para garantir que o problema original e a nova formulação QUBO tenham a mesma solução para todas as instâncias

selecionadas para os testes. A conversão para o Hamiltoniano de Ising segue os mesmos passos descritos na seção anterior. As instâncias, as quais são um total de quatro, em que vamos comparar os resultados do Simplex e do VQE são descritas nas Tabelas 4 e 5.

Os valores de distância mínima foram obtidos por meio de uma rotina que realiza “força bruta” (busca por todos os possíveis caminhos).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para obter as soluções do PVC usando VQE foi adotada uma versão do ansatz two-local com 6 qubits obedecendo uma estrutura similar à apresentada na Fig.1. Os resultados obtidos usando o solver Simplex estão ilustrados na Tabela 6.

O ansatz two-local com 6 qubits possui um aumento de dimensão de busca e, neste caso, estamos considerando um total de 48 parâmetros para serem otimizados na busca do mínimo em um circuito com profundidade considerável.

Tabela 6. Resultados do solver Simplex.

Instância	solução ótima	Resposta
TSP01	110011	74
TSP02	110011	33
TSP03	011110	16
TSP04	101101	49

A performance da convergência do VQE para a instância TSP01 está ilustrada na Fig. 5. O gráfico apresenta a evolução do valor esperado em termos das iterações necessárias para garantir a convergência do algoritmo que neste caso convergiu para a resposta correta.

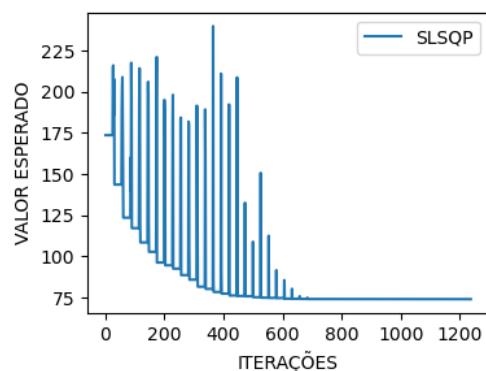


Figura 5. Convergência do VQE para o valor mínimo do valor esperado para a instância TSP01.

Podemos observar na Fig. 6 que o estado medido possui a *string* que coincide com a solução ótima para o problema dado na Tabela 6.

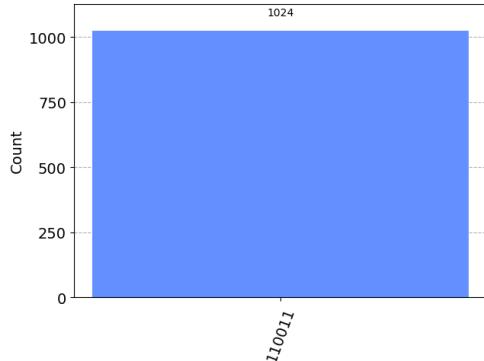


Figura 6. Histograma com estados medidos para a instância TSP01 e TSP02 .

Na Fig. 7 temos o gráfico da convergência para o VQE com relação a TSP02 o qual obtém o valor ótimo exato. O estado resposta é o mesmo que foi obtido na instância anterior (coincidentemente) coincidindo também com a resposta do solver.

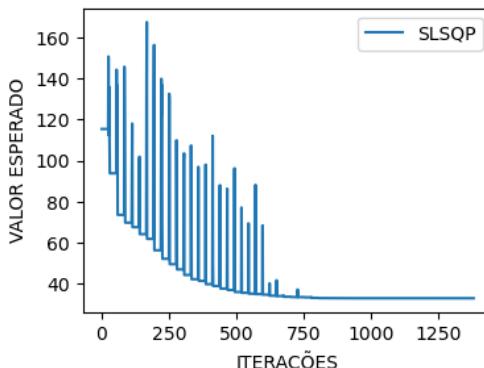


Figura 7. Convergência do VQE para o valor mínimo do valor esperado para a instância TSP02.

Nas Figs. 8 e 10 estão as convergências para as duas últimas instâncias, as quais também obtêm o resultado exato. Em ambos casos podemos ver a boa convergência do VQE. As strings obtidas e ilustradas nas Figs. 9 e 11 mostram que os resultados obtidos também são iguais aos fornecidos pelo solver.

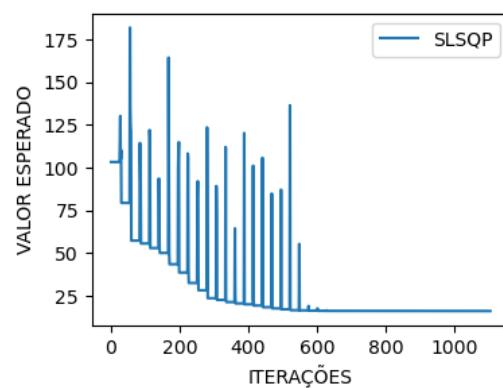


Figura 8. Convergência do VQE para o valor mínimo do valor esperado para a instância TSP03.

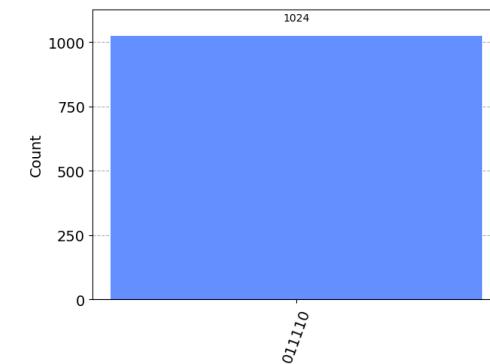


Figura 9. Histograma com estados medidos para a instância TSP03 .

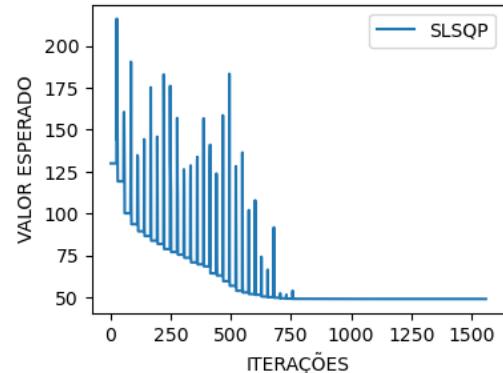


Figura 10. Convergência do VQE para o valor mínimo do valor esperado para a instância TSP04 .

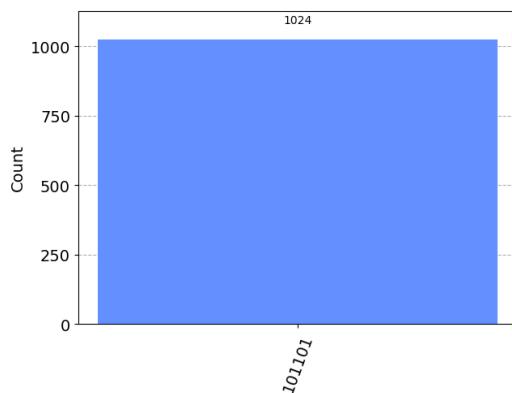


Figura 11. Histograma com estados medidos para a instância TSP04.

Tratando-se de uma prova de conceito, podemos ver que ao menos nos simuladores a convergência do VQE para a resposta correta ocorreu de forma satisfatória. O histograma dado de forma não esparsa indica, a princípio, que não seriam necessárias na prática uma quantidade exponencial de medidas para a obtenção da resposta correta. No entanto, cabe ressaltar que no simulador existe a condição tácita em que os qubits estão todos conectados, algo que não é necessariamente verdadeiro em dispositivos reais.

Finalmente, um importante aspecto a ser observado é a troca de um problema de otimização com seis variáveis binárias por outro onde são otimizados quarenta e oito parâmetros reais.

A princípio pode parecer que não existe vantagem em tal procedimento. Entretanto, é possível observar que a nova formulação variacional do problema possui uma função objetivo suave.

Com um design eficiente de um ansatz com menos parâmetros a serem otimizados podemos, no futuro, usar tais técnicas em problemas com uma maior escala. Em tais modelos os efeitos do PCV ser NP-hard podem ser sentidos e em tais casos as técnicas clássicas podem ter dificuldade para obter respostas. O uso de algoritmos variacionais em computadores quânticos efetivos pode ser uma possibilidade.

CONCLUSÃO

Computadores Quânticos são uma aposta para resolução de problemas difíceis de serem abordados por máquinas clássicas atuais. Em especial o Problema do Caixeiro Viajante é de interesse em diversas aplicações e escala consideravelmente em situações reais.

No presente trabalho, em uma prova de conceito, avaliamos a viabilidade do uso do algoritmo quântico variacional conhecido como VQE na busca de soluções para o problema linear binário restrito que

descreve o PCV. Para os exemplos abordados o método se mostrou eficiente, com o algoritmo convergindo para os mesmos resultados obtidos pelo solver clássico baseado no método Simplex.

Não está claro se este padrão se manterá em problemas de larga escala e com o uso de dispositivos físicos devido a problemas relacionados com o crescimento exponencial do operador Hamiltoniano.

Como o método abordado pode introduzir novas variáveis ao operador (a depender das restrições), necessitariam definir um Ansatz mais complexo, e com mais profundidade, aumentando os erros gerados por efeitos como a decoerência e baixa conectividade entre qubits.

Outro possível problema está relacionado à existência de platôs no espaço de busca que podem inviabilizar a convergência do VQE. No entanto, os bons resultados obtidos encorajam pesquisas mais abrangentes neste campo de estudos.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos a IBM Quantum por permitir o uso de suas plataformas online para propósitos acadêmicos bem como pela assistência disponibilizada através de tutoriais.

REFERÊNCIAS

Albino A. S. et al. Programação na plataforma IBMQ e análise comparativa da performance de computadores quânticos. In: Anais do I Congresso Brasileiro Interdisciplinar em Ciência e Tecnologia, 2020, Online.

Cerezo, M. et al. Variational Quantum Algorithms. Nature Communications, v.3, p.625-644, 2021.

Dantzig, G. et al. Solution of a large-scale traveling-salesman problem. Journal of the operations research society of America, v.2, p.339-410, 1954.

Mermin, N. D. Quantum Computer Science An Introduction. Cambridge University Press. New York, NY, USA, 2007.

Glover, F. et al. Quantum Bridge Analytics I: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models. arXiv Preprint arXiv:1811.11538, 2018.

Lucas, A. Ising Formulation of many NP Problems. Frontiers in Physics, v.2, 2014.

Preskill, J. Quantum Computing and the Entanglement Frontier. arXiv Preprint arXiv:1203.5813 , 2012.

Preskill, J. Quantum Computing in the nisq era and beyond. arXiv Preprint arXiv:1801.00862, 2018.

Peruzzo, A. et al. A Variational quantum eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, 2014.

Ribeiro, A. A., Karas, E. W. Otimização Contínua: Aspectos teóricos e computacionais, Cengage learning, 2013.