Козырев А.Н.
Москва, ЦЭМИ РАН, МФТИ, ГУУ

КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЭКОНОМИКЕ

Квантовые вычисления в настоящее время воспринимаются чаще всего либо как фантастика, либо как нечто из очень отдаленного будущего, не имеющее отношения к практическим задачам экономики. Однако это не совсем так или, точнее, совсем не так. И очень многое зависит от того, что понимать под квантовым компьютером и квантовыми вычислениями. Есть разные квантовые эффекты и разные способы их использования и в компьютерах, и в вычислениях. Например, квантовые эффекты давно используются в вычислительной технике, на них основаны многие запоминающие устройства, например, диски SSD и привычные всем флэшки. Как о будущем имеет смысл говорить лишь о создании мощных и надежных процессоров, использующих квантовые эффекты, об использовании специфических квантовых эффектов непосредственно в вычислениях и о специальных квантовых алгоритмах, ориентированных на такие процессоры.

Если говорить о квантовых эффектах, то прежде всего о квантовом параллелизме, лежащем в основе работы классических (цифровых) квантовых компьютеров универсального назначения, и о туннельном эффекте в адиабатических квантовых компьютерах.

Идею вычислений, использующих квантовый параллелизм, и создания специальных алгоритмов впервые высказал родоначальник квантовой информатики Ю.И. Манин еще в 80-х годах прошлого века [1], а В.П. Маслов написал книгу [2], выступал с докладами о квантовых эффектах в самой экономике. Сегодня квантовая информатика – одно из бурно развивающихся научных направлений, квантовая экономика пока еще нет.

В последнее время наблюдается значительный прогресс в разработке квантовых компьютеров обоих типов – и адиабатических, и классических (цифровых). Большинство публикуемых в прессе новостей посвящено именно классическим квантовым компьютерам, где ожидания много больше, но продвижение идет медленнее, а сообщения об успехах противоречивы. Гораздо дальше продвинулись работы по созданию аналоговых (адиабатических) компьютеров. Адиабатические квантовые компьютеры канадской фирмы D-Wave Systems уже несколько лет производятся и продаются, причем их производительность быстро растет (см. таблицу 1).

Таблица 1. Адиабатические квантовые компьютеры фирмы D-Wave Systems

Год выпуска	2011	2013	2015	2017
Модель	D-Wave One	D-Wave Two	D-Wave 2X	D-Wave 2000Q
Число кубитов	128	512	1024	2048
Покупатели	Lockheed-Martin	Google и NASA	–	TDS

Признать адиабатические компьютеры D-Wave полноценными квантовыми компьютерами мешает лишь то обстоятельство, что они по своей сути аналоговые. Все они основаны на методе квантового отжига, а потому приспособлены для решения относительно узкого класса задач, сводимых к задаче квадратичной булевской оптимизации без ограничений. К этой категории относятся практически все задачи на графах и, что самое важное, – задачи целочисленной оптимизации, включая задачи с ограничениями в виде неравенств [6]. Вопрос лишь в том, во что обойдется сведение той или иной задачи к нужной форме и будет ли в итоге решение каких-то задач на адиабатическом квантовом компьютере более эффективным, чем на обычном компьютере достаточно большой мощности.

Математическая задача, к которой надо свести исходную задачу, имеет довольно специфический вид

$$min\left(\sum_{i>j} s_i J_{ij} s_j + \sum_i h_i s_i\right), \quad s_i\{0,1\}, \quad i = \overline{1,n}. \quad (1)$$

Выражение в скобках называется функцией Изинга по имени Эрнста Изинга – создателя одноименной модели ферромагнетизма [3, 5]. Легко заметить, что в линейном члене формулы (1) можно заменить s_i на ${s_i}^2$, результат не изменится, поскольку 0 в квадрате равен 0, а 1 в квадрате равно 1. На самом деле тут имела место обратная операция. Изначально была матрица с диагональными элементами h_i и вне-диагональными элементами J_{ij}. Диагональные элементы матрицы – локальное поле, вне-диагональные элементы – силы взаимодействия между частицами.

Модель Изинга давно используется в агент-ориентированных математических моделях, где все взаимодействуют со всеми, в том числе в моделях финансовых рынков [4], иначе говоря, задолго до появления устойчиво работающих адиабатических квантовых компьютеров D-Wave. Все расчеты делались на обычных компьютерах. Однако появление адиабатических квантовых компьютеров сулит здесь новые перспективы. Самые большие ожидания связаны с эффективным решением NP-трудных задач типа задачи коммивояжера, где точное решение в общем случае можно получить только полным перебором вариантов, а их число растет экспоненциально с ростом числа пунктов посещения. Иначе говоря, речь идет о задачах, где с ростом объема входа происходит комбинаторный взрыв.

В адиабатических квантовых компьютерах большие достоинства сочетаются с большими недостатками. С одной стороны, появляется перспектива решения NP-трудных задач большой размерности, поскольку задача решается целиком (без перебора вариантов). С другой стороны, есть целый веер проблем. Во-первых, точное решение получается лишь с большой вероятностью, а не гарантированно. Во-вторых, задачи с ограничениями надо приводить к форме (1), заменяя ограничения функциями штрафов. При этом приходится вводить дополнительные переменные, их может быть достаточно много, а это влечет возрастающие требования к количеству кубитов в чипе компьютера. В результате получается, что преимущества адиабатического квантового компьютера перед обычным (не квантовым) компьютером не так очевидны, но ожидаемы.

В качестве примера рассмотрим типичную для моделей экономики знаний задачу булевской оптимизации с ограничениями в виде неравенств и операцией логического сложения вместо обычного сложения. В качестве легенды примем соглашение, что речь идет об исследовательских проектах как о способе производства знаний (результатов исследований).

Пусть заданы $N = \{1,2,\dots,n\}$ – множество всех возможных исследовательских проектов, а $M = \{1,2,\dots,m\}$ – множество возможных результатов, получаемых при выполнении всех этих проектов. Каждому проекту $j \in N$ соответствуют множество получаемых результатов $\mathcal{K}_s(j)$ и множество результатов, требуемых для его выполнения $\mathcal{K}_c(j)$. При этом, разумеется, $\mathcal{K}_s(j) \cap \mathcal{K}_c(j) = \emptyset$. Получается $m \times n$ матрица связей между исследовательскими проектами и получаемыми результатами (знаниями):

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} +1 \text{ если } i \in \mathcal{K}_c(j) \\ -1 \text{ если } i \in \mathcal{K}_s(j) \\ 0 \text{ если } i \notin \mathcal{K}_c(j) \cup \mathcal{K}_s(j) \end{cases}$$

Ее можно представить в виде:

$$A = C - B,$$

где матрицы B и C состоят только из единиц и нулей. Кроме того, каждому проекту j соответствует v_j – заявленная цена проекта j, которая положительна, если от реализации проекта ожидается прибыль, или отрицательна, если для его выполнения требуются вложения. Задача максимизации добавленной стоимости по отобранным проектам имеет вид:

$$\pi^* = max \sum_{j=1}^{n} v_j x_j \tag{2}$$

при условиях

$$\max_{j=1,\dots,n} [\alpha_{ij} x_j] + \min_{j=1,\dots,n} [\alpha_{ij} x_j] \le 0 \quad \text{для всех } i = 1,\dots,m \tag{3}$$

$$x_j \in \{0,1\} \qquad \text{для всех } j = 1,\dots,n.$$

Ограничения становятся более понятными, если переписать их, используя логические операции.

$$\exists k \in N: c_{ik} x_k = 1 \Longrightarrow \exists l \in N: b_{il} x_l = 1, \;\; \forall i \in M \tag{4}$$

или, как вариант,

$$c_{i1}x_1 \vee c_{i21}x_2 \vee \dots \vee c_{in}x_n = 1 \Rightarrow b_{i1}x_1 \vee b_{i2}x_2 \vee \dots \vee b_{in}x_n = 1, \ \ \forall i \in M \ (5)$$

Выражение (5) переводится в функцию штрафа стандартным способом, подробно описанным в работах [6, 7]. Дизъюнкция $\alpha \vee \beta$ заменяется формулой $\alpha - \alpha\beta + \beta$, которая, как легко видеть, содержит квадратичный член. Дизъюнкция $\alpha \vee \beta \vee \gamma$ заменяется формулой, содержащей кубический член, и так далее. Чтобы этого избежать, приходится вводить новые переменные, а для их представления в компьютере – дополнительные кубиты. В данном случае вводим $2nm$ дополнительных переменных

$$y_{i1} = b_{i1}x_1; \ \ y_{ij} = y_{ij-1} - y_{ij-1}b_{ij}x_j + b_{ij}x_j \quad j = \overline{2,n};$$

$$z_{i1} = c_{i1}x_1; \ \ c_{ij} = z_{ij-1} - z_{ij-1}c_{ij}x_j + c_{ij}x_j \quad j = \overline{2,n}.$$

С учетом переменных x_j, число которых равно n, находим, что для рассматриваемой задачи требуется $2nm + n$ кубитов только для хранения переменных. Требуемый объем ресурсов растет как квадратичная функция от размерности задачи, если предполагать рост n и m примерно пропорциональным. А потому, при дальнейшем росте мощности адиабатических квантовых компьютеров их преимущества должны довольно скоро перевесить недостатки при решении такого рода задач.

Чтобы завершить преобразование (5) в штрафную функцию, заметим, что $y_{in} = 1$, если $b_{ij} = 1$ хотя бы для одного $j = \overline{1,n}$;. $y_{in} = 0$, если $b_{ij} = 0$ для любого j. Аналогично, $z_{in} = 1$, если $c_{ij} = 1$ хотя бы для одного $j = \overline{1,n}$; $z_{in} = 0$, если $c_{ij} = 0$ для любого j. Теперь из двух этих переменных надо получить 1, если $y_{in} = 1$, $z_{in} = 0$ и 0 для всех остальных сочетаний. Это и будет означать, что штраф равен 1, если знание с номером i потребляется, но не производится, а в остальных случаях штраф равен 0, то есть штрафа нет. Соответствующая штрафная функция для i имеет довольно простой вид

$$f_i = y_{in}(1 - z_{in}), \ \ i = \overline{1,m},$$

а для системы в целом это будет

$$F = \sum_i y_{in}(1 - z_{in}).$$

Если положить также

$$E = -\sum_{j=1}^{n} v_j x_j,$$

то задача для компьютера D-Wave принимает вид

$$E + \lambda * F \to min,$$

где λ – множитель, выбираемый с учетом того, что размер штрафа должен быть соразмерным другим параметрам задачи. С одной стороны, потери на штрафах должны перекрывать возможный выигрыш от нарушения. С другой стороны, штрафы не должны быть такими большими, что целевая функция исходной задачи (2) перестанет играть какую-либо роль. Ту же задачу можно переписать более подробно

$$\left[\lambda * \sum_{i=1}^{m} y_{in}(1 - z_{in}) - \sum_{j=1}^{n} v_j x_j\right] \to min, \qquad (6)$$

где все переменные принимают значения 0 или 1. Выражение (6) в квадратных скобках – вход для компьютера D-Wave. Строго говоря, тут должны присутствовать члены типа $\lambda * J_{ikl} y_{ik} z_{il}$, но у нас $J_{ikl} = 0, k \neq n, l \neq n.$

До сих пор ничего не было сказано о том, что дает основания ожидать от адиабатических квантовых компьютеров высокой скорости при решении NP-трудных задач и почему это не панацея от всех проблем. Чтобы осмысленно ответить на эти вопросы, надо немного погрузиться в то, как происходит адаптация задачи к решению на таком компьютере и процесс вычислений. Вся необходимая для этого математическая техника уже разработана [7], а в основе метода лежит некоторый трюк на основе квантовой механики, причем в относительно простом варианте.

Предположим, что у нас есть квантовый Гамильтониан H_{p}, основное состояние которого кодирует решение интересующей задачи, и другой Гамильтониан H_0, основное состояние которого «легко» как найти, так и подготовить в экспериментальной установке. Если теперь мы приводим квантовую систему в основное состояние H_0, а затем Гамильтониан адиабатически изменяется за время t в соответствии с формулой

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_0 + \frac{t}{T} H_p \quad 0 \leq t \leq T, \qquad (7)$$

тогда при достаточно большом T и условии, что H_0 и H_{p} не коммутируют, квантовая система будет постоянно оставаться в основном состоянии согласно адиабатической теореме квантовой механики. Измерение квантового состояния в момент времени T даст решение нашей задачи. Примечательно, что при этом возникает туннельный эффект, то есть переход осуществляется из одного локального минимума в другой, минуя состояния, не являющиеся локальными минимумами.

На практике состояние H_0 устанавливает сам компьютер D-Wave. Гамильтониан в виде матрицы строить, вообще говоря, тоже не требуется, поскольку уже есть язык программирования для этой линейки компьютеров. Интересно было бы также проверить эффективность данного подхода на практике, но такая возможность пока отсутствует, поскольку компьютеры D-Wave – товар штучный.

С классическими квантовыми компьютерами все еще сложнее. По оптимистическим оценкам ведущих разработчиков появление пригодных к практическому использованию классических квантовых компьютеров универсального назначения ожидается примерно через 3 года. Работающие экспериментальные образцы уже есть у Google, IBM и ряда других фирм, а также в нескольких ведущих университетах (см. таблицу 2).

Таблица 2

	2009	2016	2017	2018
Google			49 qubits	72 qubits
IBM	2 qubits	5 qubits	50 qubits	
Maryland			53 qubits	–
Harvard			51 qubits	–

Как легко заметить, данные очень неполны и неоднозначны.

Хотя у IBM уже есть компьютер на 50 кубит, а Google объявил в 2018 году о создании квантового компьютера на 72 кубита, все это, так или иначе, пока игрушки. При этом IBM также продолжают развивать квантовую экосистему, разрабатывая программные инструменты с открытым кодом, приложения, учебные материалы[1], и предоставляет желающим возможность поэкспериментировать на небольшом компьютере (5 кубит, а в текущем 2018 году обещают предоставить 20 кубит). Уже более 60 тыс. клиентов воспользовались возможностями IBM Q и провели 1,7 млн экспериментов. На их основании были написаны 35 публикаций. Среди зарегистрированных участников числятся 1500 университетов, 300 школ и 300 частных организаций. В руководстве IBM убеждены, что это важно для развития квантовых вычислений.

Список использованной литературы:

1. Манин Ю.И., Вычислимое и невычислимое. — М.: Сов. радио, 1980. — С. 15
2. Маслов В.П., Квантовая экономика, М.: Наука, 2006. – 92с.
3. Мейлихов Е.З., Трагическая и счастливая жизнь Эрнста Изинга // Природа, №7, 2006 г.
4. Попов В.Ю., Шаповал Н.Б., Гисин В. Б., Лунева Е. П., Моделирование финансовых рынков и прогноз, Отчет по научно-исследовательской работе, Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Финансовая академия при Правительстве Российской Федерации» (Финакадемия) 2008. – 18 с.
5. 1sing E. //Zeitschriftf Physik. 1925. Bd.31. S.253—258.
6. Lucas, A., 2014. Ising formulations of many NP problems. Front. Phys. 2 Article 5, 15 pages. DOI:10.3389/fphy.2014.00005
7. Warren, R. H. 2018. Mathematical Methods for a Quantum Annealing Computer. Journal of Advances in Applied Mathematics, Vol. 3, No. 3, July 2018

[1] http://www.research.ibm.com/ibm-q/learn/what-is-quantum-computing/