

DEVELOPMENT OF HEURISTIC METHODS ON REVERSIBLE AND QUANTUM COMPUTERS

Teză de doctorat – Rezumat

pentru obținerea titlului științific de doctor la

Universitatea Politehnică Timișoara

în domeniul de doctorat Calculatoare și Tehnologia Informației

autor ing. Sebastian Mihai ARDELEAN

conducător științific Prof.univ.dr.ing. Mihai UDRESCU-MILOSAV

luna septembrie anul 2024

Această teză de doctorat abordează dezvoltarea și optimizarea algoritmilor euristici pe platforme computaționale cuantice, cu un accent deosebit pe algoritmi genetici cuantici. Noutatea tezei constă în implementarea algoritmului Reduced Quantum Genetic Algorithm (RQGA) [1] pentru rezolvarea problemelor NP și în prezentarea unui nou algoritm hibrid care combină un algoritm genetic clasic cu RQGA—denumit Hybrid Quantum Algorithm with Genetic Optimization (HQAGO).

În primul capitol sunt prezentate motivația și obiectivele tezei. Algoritmii euristici și în special Algoritmii Genetici (GA) au beneficiat de o atenție semnificativă în cercetare și sunt recunoscuți ca fiind una dintre cele mai utilizate metode de calcul evolutiv [2]. Algoritmii genetici (GA) sunt tehnici adaptive de căutare euristică, bazate pe principiile geneticii și ale selecției naturale, utilizați în rezolvarea problemelor de optimizare [2] [3] [4]. Pe de altă parte, calculul cuantic prezintă performanțe îmbunătățite datorită proprietăților sale distinctive și fenomenelor precum entanglementul, interferența și paralelismul exponențial [2] [5]. Pe măsură ce legea lui Moore tinde să își atingă limitele, căutarea unor soluții alternative pentru a satisface nevoia de putere de calcul și performanță s-a intensificat [6]. Calculul cuantic a devenit astfel una dintre soluțiile cele mai promițătoare iar o soluție care combină algoritmi genetici și calculul cuantic devine viabilă și benefică [1]. Prin simularea în diverse modele de zgomot a circuitelor cuantice care implementează algoritmi genetici precum și prin posibilitatea de a rula acești algoritmi pe procesoare cuantice, putem analiza acești algoritmi pentru rezolvarea problemelor NP [5] [7].

Capitolul 2, *Background*, este împărțit în două părți: *Calcul Cuantic* și *Algoritmi Genetici*. Literatura prezintă numeroase referințe la calculul cuantic, din care menționăm [5], [7] și [8], utilizate în prezentarea acestei secțiuni. Comparativ cu sistemele de calcul actuale, calculul cuantic are potențialul de a îmbunătăți semnificativ performanța aplicațiilor în domenii diferite, de la comerț [9], industrie [10] și finanțe [11] până la chimie [12], biologie [13], medicină [14], modelare climatică [15] și chiar inteligență artificială [16].

În domeniul algoritmilor genetici, menționăm [2] și [17] ca referințe notabile, care stau la baza definirii secțiunii *Algoritmi Genetici*.

În Capitolul 3 prezentăm o analiză a literaturii de specialitate în domeniul algoritmilor genetici cuantici. De asemenea, prezentăm fundamentele teoretice care stau la baza algoritmului Reduced Quantum Genetic Algorithm (RQGA) precum și cercetarea privind utilizarea

calculului cuantic în rezolvarea problemei colorării grafurilor [18].

Capitolul 4 îl dedicăm prezentării unei noi soluții de simulare a circuitelor cuantice care se bazează pe modelarea comportamentală a circuitelor. În comparație cu simulatoarele care utilizează modelarea structurală a circuitelor cuantice, soluția propusă prezintă avantajul unui consum redus de memorie, astfel fiind posibilă simularea unor circuite cuantice complexe. În plus, în acest capitol prezentăm și arhitectura software a simulatorului propus.

Capitolul 5 este dedicat implementării algoritmului Reduced Quantum Genetic Algorithm (RQGA) și prezentării rezultatelor experimentale. Am implementat algoritmul pentru rezolvarea problemei colorării grafurilor și a problemei rucsacului, ambele fiind probleme NP. De asemenea, am comparat rezultatele obținute în urma simulării algoritmului RQGA cu rezultatele obținute de către alte soluții care utilizează calculul cuantic. Algoritmul RQGA rezolvă problema colorării grafurilor în $\mathcal{O}(\sqrt{N})$. Implementare propusă rezolvă atât problema colorării nodurilor, cât și de cea a muchiilor și poate stabili valoarea cromatică a grafului (numărul minim de culori necesare pentru a colora un graf). Astfel, în urma simulărilor făcute utilizând Qiskit și a analizei convergenței algoritmului confirmăm că euristicele cuantice pot aborda probleme computaționale complexe, fiind mai eficiente decât metodele convenționale. În plus, prezentăm o analiză a complexității circuitului care implementează RQGA din perspectiva numărului de qubiți și a numărului de operatori cuantici utilizați.

În Capitolul 6 introducem algoritmul Hybrid Quantum Algorithm with Genetic Optimization (HQAGO) ca o optimizare a RQGA. Noul algoritm combină algoritmi genetici clasici cu RQGA, fiind o optimizare clasică a unui algoritm genetic pur cuantic. Astfel, utilizăm algoritmi genetici clasici pentru a determina o valoare fixă unor qubiți, reușind să reducem spațiul de căutare al algoritmului pur cuantic. În acest capitol detaliem circuitele care implementează noul algoritm. De asemenea, prezentăm și o analiză teoretică a complexității algoritmului temporale și spațiale a algoritmului, precum și rezultatele experimentale prin care confirmăm evaluările teoretice.

Algoritmi Genetici Cuantici (QGA) îmbină algoritmi genetici și calculul cuantic pentru a rezolva problemele de căutare și optimizare. Majoritatea soluțiilor QGA au la bază algoritmi genetici clasici ai căror operatori, precum selecția, încrucișarea și mutația, sunt optimizați prin implementarea acestora pe procesoare cuantice [3]. În comparație cu aceste soluții, Reduced Quantum Genetic Algorithm (RQGA) este diferit fiind un algoritm pur cuantic [1] [3], în care spațiul de căutare (populația) este codificat ca o suprapunere a tuturor soluțiilor posibile (cromozomi). Astfel populația este reprezentată într-un registru cuantic iar funcția de fitness operează pe acest registru cuantic. RQGA utilizează algoritmul de căutare a lui Grover pentru a determina perechea formată din cromozom și valoarea fitness-ului care reprezintă soluția problemei. Complexitatea algoritmului de căutare a lui Grover [19] este de $\mathcal{O}(\sqrt{N})$, unde N dimensiunea spațiului de căutare. Astfel, RQGA operează pe un spațiu de căutare exponențial ($N = 2^n$, cu n fiind dimensiunea registrului cuantic în care sunt reprezentați indivizii), rezultând o complexitate exponențială de $\mathcal{O}(2^{n/2})$. Prin urmare, este necesară dezvoltarea unei soluții prin care complexitatea algoritmului RQGA să fie redusă. HQAGO permite controlarea complexității algoritmului RQGA prin utilizarea unui algoritm genetic clasic pentru a fixa un număr limitat de biți clasici din registrul indivizilor. În plus, reușim să îmbunătățim performanța RQGA prin eliminarea soluțiilor necorespunzătoare și restrângerea spațiului de căutare. Astfel, noul algoritm Hybrid Quantum Algorithm with Genetic Optimization (HQAGO) are o complexitate de $\mathcal{O}(2^{(n-k)/2})$, unde k reprezintă numărul de biți clasici fixați în registrul

indivizilor.

Capitolul 7 prezintă metode de utilizare a calculului cuantic și a algoritmilor cuantici în Big Data. Capitolul este împărțit în două subcapitole. În subcapitolul *Quantum random number generator* prezentăm o soluție software pentru interacțiunea cu dispozitivele IDQ Quantis Appliance [20]. Soluția software este alcătuită dintr-o bibliotecă implementată în limbajul de programare C, interfețe pentru limbajul de programare Python, precum și o aplicație în linie de comandă pentru solicitarea de numere aleatoare. Al doilea subcapitol, *Analyzing drug datasets using quantum technologies*, este dedicat analizei rețelelor complexe de medicamente construite cu informații din baza de date DrugBank [21].

Ultimul capitol este dedicat prezentării concluziilor, evidențiind contribuțiile aduse în cercetare, precum și prezentarea unor direcții noi de cercetare rezultate. În această teză am prezentat implementarea algoritmului Reduced Quantum Genetic Algorithm (RQGA) și utilizarea acestuia în rezolvarea problemei colorării grafurilor folosind biblioteca Qiskit [22] [23], prezentând astfel o abordare euristica pur cuantică care rezolvă problema cu o complexitate de $\mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{2^n}{M}}\right)$. În plus, soluția propusă rezolvă problemele colorării nodurilor și muchiilor unui graf și determină valoarea cromatică a grafului. De asemenea, prezentăm o analiză a complexității circuitului din punct de vedere al numărului de qubiți și al numărului de operatori cuantici utilizați. În plus, propunem o soluție pentru optimizarea RQGA prin care putem controla complexitatea algoritmului cuantic prin reducerea spațiului de căutare. Astfel, soluția denumită Hybrid Quantum Algorithm with Genetic Optimization (HQAGO) poate rezolva probleme NP, având o complexitate de $\mathcal{O}(\sqrt{2^{n-k}})$. HQAGO permite rezolvarea problemelor utilizând un număr mai mic de qubiți în detrimentul adăugării unor circuite adiționale pentru implementarea algoritmului genetic clasic. Posibilele direcții noi de cercetare presupun atât utilizarea algoritmului HQAGO în modelarea moleculară (molecular docking) precum și cercetarea în domeniile circuitelor cuantice evolutive și al circuitelor cuantice reconfigurabile.

Bibliografie

- [1] M. Udrescu, L. Prodan and M. Vlăduțiu, "Implementing quantum genetic algorithms: a solution based on Grover's algorithm," in *Conference Proceedings of the 3rd Conference on Computing Frontiers*, 2006.
- [2] L. Spector, *Automatic Quantum Computer Programming: a genetic programming approach*, vol. 7, Springer Science & Business Media, 2004.
- [3] R. Lahoz-Beltra, "Quantum genetic algorithms for computer scientists," vol. 5, no. 4, p. 24, 2016.
- [4] R. Matoušek, "Genetic algorithm and advanced tournament selection concept," pp. 189-196, 2009.
- [5] M. A. Nielsen and I. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, American Association of Physics Teachers, 2002.

- [6] T. Häner, D. S. Steiger, M. Smelyanskiy and M. Troyer, "High performance emulation of quantum circuits," in *SC'16: Conference Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, 2016.
- [7] N. S. Yanofsky and M. A. Mannucci, *Quantum computing for computer scientists*, Cambridge University Press, 2008.
- [8] J. D. Hidary, *Quantum computing: an applied approach*, vol. 1, Springer, 2019.
- [9] F. Bova, A. Goldfarb and R. G. Melko, "Commercial applications of quantum computing," vol. 8, no. 1, p. 2, 2021.
- [10] A. Bayerstadler, G. Becquin, J. Binder, T. Botter, H. Ehm, T. Ehmer, M. Erdmann, N. Gaus, P. Harbach, M. Hess and others, "Industry quantum computing applications," vol. 8, no. 1, p. 25, 2021.
- [11] R. Orús, S. Mugel and E. Lizaso, "Quantum computing for finance: Overview and prospects," vol. 4, p. 100028, 2019.
- [12] P. J. Ollitrault, A. Miessen and I. Tavernelli, "Molecular quantum dynamics: A quantum computing perspective," vol. 54, no. 23, pp. 4229-4238, 2021.
- [13] L. Marchetti, R. Nifosì, P. L. Martelli, E. Da Pozzo, V. Cappello, F. Banterle, M. L. Trincavelli, C. Martini and M. D'Elia, "Quantum computing algorithms: getting closer to critical problems in computational biology," vol. 23, no. 6, p. bbac437, 2022.
- [14] J. Davids, N. Lidströmer and H. Ashrafian, "Artificial Intelligence in Medicine Using Quantum Computing in the Future of Healthcare," Springer, 2022, pp. 423-446.
- [15] F. Tennie and T. N. Palmer, "Quantum Computers for Weather and Climate Prediction: The Good, the Bad, and the Noisy," vol. 104, no. 2, pp. E488-E500, 2023.
- [16] V. Dunjko and H. J. Briegel, "Machine learning & artificial intelligence in the quantum domain: a review of recent progress," vol. 81, no. 7, p. 074001, 2018.
- [17] M. Melanie, *An introduction to genetic algorithms. A Bradford book*, The MIT Press Cambridge, MA, 1999.
- [18] S. Mahmoudi and S. Lotfi, "Modified cuckoo optimization algorithm (MCOA) to solve graph coloring problem," vol. 33, pp. 48-64, 2015.
- [19] L. K. Grover, "A fast quantum mechanical algorithm for database search," in *Conference Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, 1996.
- [20] *Quantis Appliance 2.0*.
- [21] D. S. Wishart, Y. D. Feunang, A. C. Guo, E. J. Lo, A. Marcu, J. R. Grant, T. Sajed, D. Johnson, C. Li, Z.

Sayeeda and others, "DrugBank 5.0: a major update to the DrugBank database for 2018," vol. 46, no. D1, pp. D1074-D1082, 2018.

- [22] M. S. ANIS, H. Abraham and et al., *Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing*, 2021.
- [23] R. Wille, R. Van Meter and Y. Naveh, "IBM's Qiskit Tool Chain: Working with and Developing for Real Quantum Computers," in *2019 Design, Automation & Test in Europe Conference & Exhibition (DATE)*, 2019.