

waarbij k overeenkomt met de effecten. Dus via f_i hebben we een proxy van de verdeling over de mogelijke acties die actor i kan ondernemen. Een directe vergelijking van de waarden van parameterschattingen is mogelijk, maar houd er rekening mee dat dit niet-gestandaardiseerde coëfficiënten zijn (Ripley et al., 2011).

De parameterschatting heeft de grootste absolute waarde voor het *outdegree*-effect. De negatieve schatting kan worden verklaard door het feit dat het een inspanning kost om vriendschappen en connecties te onderhouden. Het effect is significant, zoals blijkt uit de p -waarde. Uit het resultaat blijkt ook dat er sprake is van een hoge mate van transitiviteit. Dit geeft aan dat het principe 'vrienden van mijn vrienden zijn mijn vrienden' in dit netwerk op zijn plaats is.

De parameter voor sentimentovereenkomst is positief en significant. Dit betekent dat actoren met sentiment scores die vergelijkbaar zijn, meer kans hebben om een verbinding met elkaar aan te gaan. Aangezien dit sociale netwerk is geconstrueerd op basis van personages die samen in een filmscène zitten, zouden ze bovendien de positieve of negatieve ervaring delen en daarom waarschijnlijk een vergelijkbare sentiment score hebben.

De parameterschattingen voor evenwicht en populariteit zijn laag, maar significant. Voor evenwicht betekent dit dat er een lichte voorkeur is voor de personages om een connectie te hebben met andere personages die veel van dezelfde connecties hebben als ze al hebben. De positieve schatting van de populariteit wijst op een lichte voorkeur om een connectie te maken met populaire personages. De reden hiervoor kan zijn dat de hoofdpersonen in de film het meest voorkomen in scènes en daarom als populair kunnen worden beschouwd. Omdat het verhaal om hen draait, creëren ze ook meer nieuwe banden. De schatting voor 4-cycli is negatief, wat wijst op een neiging om niet uit clusters van grootte vier te komen.

Conclusie

In dit artikel zijn gegevens uit de film *The Lord of the Rings: The Fellowship of the Ring* gebruikt om het sociale netwerk en sentiment scores van de personages te extraheren. Voor de extractie van het karaktersentiment werd

gebruik gemaakt van het AFINN Lexicon Based Model. Vervolgens werd een sociale netwerkanalyse uitgevoerd met behulp van SIENA. We vonden een positieve parameterwaarde voor sentiment die significant verschilt van nul.

Meestal kwamen onze bevindingen met behulp van de modellen overeen met wat we weten over het verhaal. Er zijn echter nog steeds uitdagingen bij het toepassen van sentimentanalyse en sociale-netwerkanalyse. Bij sociologisch empirisch onderzoek is het daarom noodzakelijk om de resultaten van de analyse te interpreteren en na te denken over wat de data-analyses je wel en niet kunnen laten zien. We weten bijvoorbeeld dat de film om de ring draait. Het is echter niet eenvoudig om hiermee rekening te houden bij het uitvoeren van de analyse.

Voor toekomstig onderzoek kan dezelfde analyse worden uitgevoerd met andere filmscripts uit verschillende genres. Bovendien zou dit onderzoek kunnen worden uitgevoerd met behulp van echt bestaande sociale netwerken. In het echte leven zal het echter moeilijk zijn om gegevens te verzamelen. Hoewel de filmgegevens erg waardevol zijn omdat er geen ontbrekende gegevens zijn en het mogelijk is om resultaten te valideren, weerspiegelt het niet helemaal een situatie in het echte leven.

NOOT

1. Dit artikel is gebaseerd op de masterscriptie van Demi de Kort voor haar studie Econometrie & Operations.
2. Het volledige filmscript is te vinden op <https://www.imsdb.com/scripts/Lord-of-the-Rings-Fellowship-of-the-Ring-The.html>.

LITERATUUR

- Snijders, T. A. B., van de Bunt, G. G., & Steglich, C. E. G. (2010). Introduction to stochastic actor-based models for network dynamics. *Social Networks*, 32, 44–60.
- Ripley, R. M., Snijders, T. A. B., Boda, Z., Vörös, A., & Preciado, P. (2020). *Manual for SIENA version 4.0*. University of Oxford, Department of Statistics; Nuffield College.

JADÉ DIETEREN is forecasting business analyst bij Amazon en PhD student aan de Vrije Universiteit.
E-mail: jjdd@amazon.cz

DEMI DE KORT is data scientist bij izi. Met hun analyses willen de data scientists van izi bijdragen aan een betaalbare en doelmatige zorg in Nederland.
E-mail: demidekort@hotmail.com



COMBINATORISCHE OPTIMALISATIE EN QUANTUM COMPUTING

De Quantum Computer komt met rasse schreden dichterbij. Eén van de veelbelovende toepassingsgebieden is optimalisatie. Voor Operations Research practitioners is het van belang deze ontwikkeling te volgen, aangezien ze binnen een aantal jaren quantum algoritmes aan hun gereedschapskist zullen kunnen toevoegen. In dit artikel bespreken we twee manieren waarop optimalisatieproblemen kunnen worden aangepakt met de Quantum Computer.

FRANK PHILLIPSON

Een nieuwe computer die in slechts enkele seconden het antwoord op vragen kan geven waar de huidige generatie computers vele jaren mee bezig zou zijn. Dat is wat er beloofd wordt door de wetenschappers die, onder anderen

in Delft, werken aan de Quantum Computer (QC). Deze QC maakt gebruik van kwantummechanische verschijnselen, zoals superpositie en verstrengeling, om bewerkingen uit te voeren.

Superpositie is de bekendste eigenschap die gebruikt wordt door de QC. Waar klassieke computers vereisen dat de gegevens worden gecodeerd in binaire cijfers (bits), die elk altijd in een van de twee toestanden (0 of 1) zijn, gebruikt de QC quantum bits, qubits genaamd, die zich schijnbaar in beide toestanden tegelijkertijd kunnen bevinden. Deze staat van een qubit heet superpositie. Op het moment dat de positie van de qubit wordt waargenomen zal hij, schijnbaar willekeurig, zich echter voordoen als een 0 of 1. De andere eigenschap die gebruikt wordt is verstrengeling. Hierbij zijn de toestanden van twee deeltjes, die elk op een andere plaats kunnen zijn, aan elkaar gerelateerd.

De QC zal niet het antwoord zijn op alle problemen. In complexiteitstermen zal er een nieuwe groep problemen ontstaan, BQP, Bounded-error Quantum Polynomial time, een uitbreiding van P, met problemen die door de Quantum Computer kunnen worden opgelost, met ten hoogste 1/3 foutkans. De kans van 1/3 is in de definitie arbitrair gekozen. Eén van de bekendste problemen die in BQP zit is integer factorisatie, de reden dat verschillende soorten cryptografie niet meer de beloofde veiligheid zullen bieden.

Qua ontwikkeling staan we met de QC nog maar aan het begin. De huidige generatie heeft nog maar een beperkt aantal qubits die ook nog eens een beperkte levensduur hebben en beperkt stabiel zijn. Voor deze generatie, de Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) Computers, wordt wel al hard aan toepassingen gewerkt. De, naar verwachting, belangrijkste toepassingsgebieden waar de QC al meerwaarde kan hebben boven klassieke computing zijn chemische simulaties, machine learning en optimalisatievraagstukken.

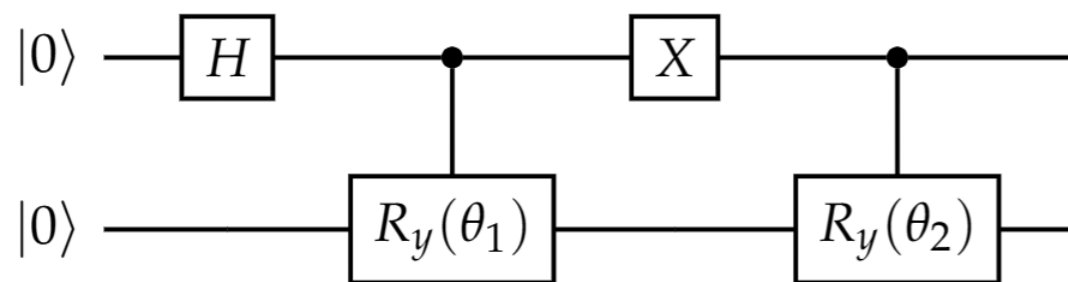
Twee soorten

We kunnen in quantum computing een tweetal paradigma's onderscheiden: Gate-Based Computers (GBC) en Quantum Annealers (QA). GBC lijken qua werking het meest op de huidige generatie van computers; ze zijn in staat bewerkingen (gate-operaties, zoals AND, OR) uit te voeren op specifieke qubits of op meerdere qubits tegelijkertijd. Hiermee kan dus daadwerkelijk geprogrammeerd worden, wat vaak wordt gevisualiseerd via circuitdiagrammen, zoals in figuur 1. Hier staat elke lijn voor een qubit en loopt de tijd van links naar rechts, waarbij de operaties, gates, als blokken worden weergegeven.

De QA daarentegen zijn single-purpose machines. Quantum Annealing begon met het werk van Kadowaki en Nishimori (Kadowaki et al. 1998). QA kunnen in principe maar één ding: het vinden van een minimumwaarde van een specifieke functie. Deze functie wordt gecodeerd in de qubits, waarna een kwantummechanische evolutie zal leiden tot een oplossing die de energie minimaliseert.

De QUBO

Deze specifieke functie wordt gerepresenteerd door een Ising of QUBO probleem. Een Ising probleem definieert en minimaliseert de energie van elektron-spins via een Hamiltonian. Een QUBO, Quadratic Unconstrained Binary Optimisation, probleem is de binaire representatie hiervan en wordt veelal voor



Figuur 1. Voorbeeld van quantum circuit

combinatorische optimalisatie gebruikt:

QUBO: minimaliseer $x^T Q x$

waarbij x een vector is met binaire beslisvariabelen en Q een vierkante matrix met constante waarden. Veel (constrained) combinatorische optimalisatieproblemen kunnen eenvoudig worden omgeschreven naar een QUBO formulering (Glover et al., 2018a). Neem bijvoorbeeld het probleem

$$\min c^T x, \text{ onder de voorwaarden } Ax = b,$$

dan kunnen we voorwaarden in de doelfunctie onderbrengen met gebruik van een penalty λ :

$$\min c^T x + \lambda (Ax - b)^T (Ax - b).$$

Als we nu $P=Ic$ definiëren als de matrix met de waarden van c op de diagonaal, dan is dit identiek aan:

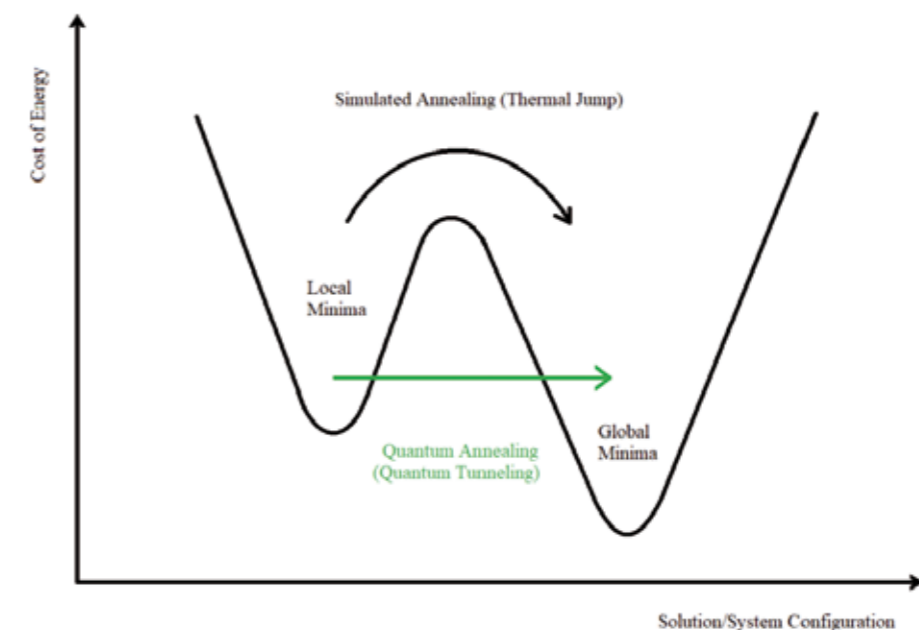
$$\min x^T P x + \lambda (Ax - b)^T (Ax - b) = x^T P x + x^T R x + d = x^T Q x,$$

waar de matrix P en de constante d een gevolg zijn van de vermenigvuldiging en de constante d verwaarloosd kan worden. De matrix Q is nu afhankelijk van de penalty λ . De QUBO kan vervolgens in een pre-processing stap worden gereduceerd (Glover et al., 2018b).

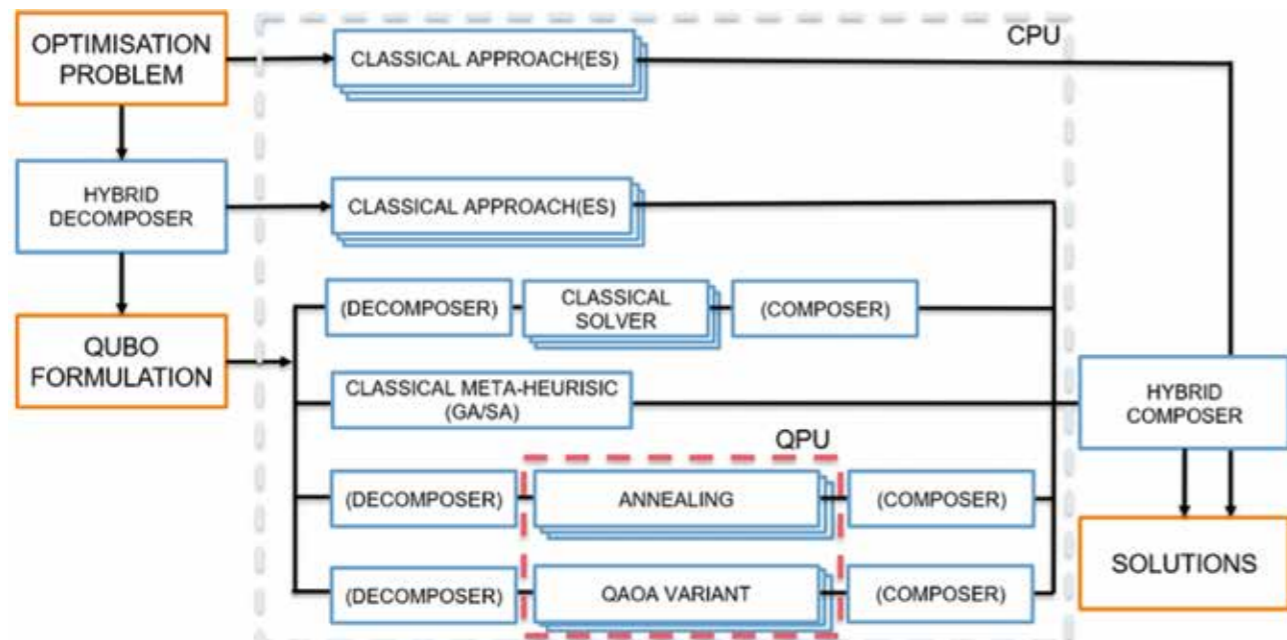
Quantum Annealing

De QUBO wordt als input meegegeven aan de QA. Het uitgangspunt hier is om een gelijke superpositie te creëren over alle mogelijke toestanden. Vervolgens wordt een probleemspecifiek magnetisch veld ingeschakeld, waardoor de qubits met elkaar interacteren. Nu bewegen de qubits naar de staat met de laagste energie, waaruit de optimale oplossing afgeleid kan worden van het oorspronkelijke probleem. Quantum annealing heeft overeenkomsten met het bekende Simulated Annealing. Waar Simulated Annealing echter alleen thermische sprongen kan maken, gebruikt quantum annealing ook het quantum tunneling effect (zie figuur 2). De QA die al het verst gevorderd is, is de versie van D-Wave. Hun devices zijn praktische implementaties van adiabatische evolutie (Farhi et al. 2000). De evolutie van een quantumtoestand op de quantum processor van D-Wave wordt beschreven door een tijdsafhankelijke Hamiltonian ($H(t)$), bestaande uit de oorspronkelijk Hamiltonian (H_0), waarvan de grondtoestand gemakkelijk te creëren is, de gelijke superpositie, en de uiteindelijke Hamiltonian (H_1), waarvan de grondtoestand codeert voor de oplossing van het huidige probleem, via de QUBO:

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_0 + \frac{t}{T} H_1.$$



Figuur 2. Verschil Simulated Annealing en Quantum Annealing (Sharma et al. 2018)



Figuur 3. Voorbeeld optimalisatie pijplijn framework (TNO)

Dit systeem wordt geïnitieerd in de grondtoestand van de oorspronkelijke Hamiltonian, dat wil zeggen $H(0) = H_0$. De adiabatische stelling stelt dat als het systeem evolueert volgens de Schrödingervergelijking, en de minimale spectrale opening van $H(t)$ niet nul is, $H(T)$, voor T groot genoeg, zal convergeren naar de grondtoestand van H_T . Hoewel we ons hier niet bezighouden met de technische details, is het goed te weten dat het meestal niet mogelijk is om een tijd T in te schatten om ervoor te zorgen dat het systeem altijd evolueert naar de gewenste staat. Voor enkele klassen aan problemen is de optimale annealing tijd experimenteel bepaald (Albash en Lidar 2018). Er is dan ook geen garantie van optimaliteit. Verder is het niet triviaal een goede waarde te vinden voor de penalty λ en de zogenaamde chainstrength; de QA is erg gevoelig voor deze parameters. Chainstrength is een parameter die een boete oplevert indien meerdere qubits die één variabele representeren niet dezelfde waarde hebben. Daarnaast geldt dat de state-of-the-art QA van D-Wave nu 5640 qubits heeft die een connectiviteit hebben van maximaal 15. Hiermee kan een clique probleem met $n=70$ worden opgelost (McGeoch 2020). Voor problemen met een lagere afhankelijkheid tussen de variabelen, kunnen grotere problemen opgelost worden. Problemen die niet op de chip van deze grootte kunnen worden geplaatst, zullen in stukken moeten worden verdeeld, wat ten koste gaat van de kwaliteit van de oplossing. D-Wave biedt wel een standaard functie aan die deze decompositie automatisch verzorgt.

QAOA

Het algoritme dat quantum annealing vertaalt naar de gate-based quantum computer is QAOA, Quantum Approximate Optimization Algorithm. Hierbij wordt de adiabatische evolutie benaderd door een gediscretiseerde functie die een benadering oplevert van de grondtoestand van de gewenste Hamiltonian. Het doel van het QAOA algoritme is om een zo laag mogelijke bovengrens te vinden voor de grondtoestand. Ook hier wordt gestart met een gelijke superpositie over alle oplossingen $|s\rangle$, een toestand in de zogenaamde bra-ket notatie. Het algoritme past vervolgens afwisselend de volgende twee bewerkingen, operators, toe op deze toestand:

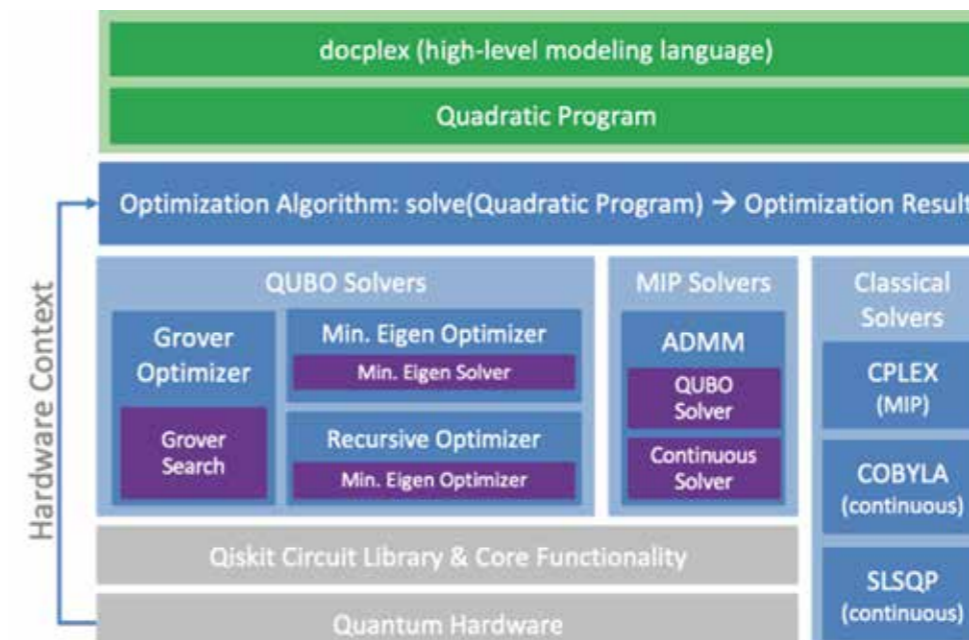
$$U(H_0, \beta) = e^{-i\beta H_0} \text{ en } U(H_1, \gamma) = e^{-i\gamma H_1},$$

waarbij β in $[0, 2\pi]$ en γ in $[0, 4\pi]$. Als we deze operators p keer toepassen, dan produceert de QAOA de volgende quantum state:

$$|\gamma, \beta\rangle = U(H_0, \beta_p) U(H_1, \gamma_p) \dots U(H_0, \beta_1) U(H_1, \gamma_1) |s\rangle.$$

Met behulp van een QC kan vervolgens de verwachte waarde $F_p = \langle \gamma, \beta | H_1 | \gamma, \beta \rangle$ berekend worden wat een bovengrens geeft voor de grondtoestand. Als $p \rightarrow \infty$, zal deze benadering, voor de juiste keus van hoeken β_p en γ_p , convergeren naar de optimale oplossing – de exacte grondtoestand van het onderliggende probleem. Het vinden van de juiste hoeken is echter niet triviaal en als p groot moet zijn voor een goede benadering is de effectiviteit van het algoritme nog een onzekere factor.

De QAOA heeft hierbij wat meer vrijheid dan QA.



Figuur 4. Voorbeeld IBM Qiskit's Optimization Module

Een andere keuze voor de zogenoemde *mixing operator* $U(H_0, \beta)$, de Quantum Alternating Operator Ansatz (Hadfield et al., 2019), kan zorgen voor een beperking van de zoekruimte, bijvoorbeeld bij harde *constraints*. De QAOA is een voorbeeld van een *variational of hybrid* algoritme. Hierbij worden klassieke parameters geoptimaliseerd om zo een quantum circuit te creëren dat een probleem oplost. Deze algoritmes worden gezien als het soort dat de eerste praktische toepassing zal hebben op de gated quantum computers. Het heeft immers maar een beperkte hoeveelheid qubits nodig en ook de diepte van het circuit (de tijdsfactor) is beperkt als p niet te groot wordt gekozen. Daarnaast zijn variational algoritmes redelijk resistent tegen de ruis, de beperkte stabiliteit, van de qubits.

Conclusie

De gepresenteerde quantum algoritmes zijn feitelijk metaheuristieken gecombineerd met specialistische hardware. De quantum computer is hier niet de enige mogelijkheid, ook photonic gebaseerde Ising machines zijn in opkomst (Van Vaerenbergh et al. 2021). Voor OR-practitioners geldt dat dit extra tools zullen zijn in hun gereedschapskist, zie bijvoorbeeld figuur 3 voor een voorbeeld hoe Quantum Computing in zo'n gereedschapskist kan passen. Ook zullen commerciële aanbieders de komende jaren hun aanbod gaan verrijken met Quantum algoritmes, zoals IBM, die naast CPLEX ook quantum tools aanbiedt (figuur 4) zonder dat gebruikers precies hoeven te weten wat er onder de motorkap gebeurt.

LITERATUUR

Albash, T., & Lidar, D. A. (2018). Demonstration of a scaling advantage for a quantum annealer over simulated annealing. *Physical Review X*, 8(3), 031016.

Farhi, E., Goldstone, J., Gutmann, S., & Sipser, M. (2000). Quantum computation by adiabatic evolution. *arXiv:quant-ph/0001106*.

Glover, F., Kochenberger, G., & Du, Y. (2018a). A tutorial on formulating and using qubo models. *arXiv:1811.11538 [cs.DS]*.

Glover, F., Lewis, M., & Kochenberger, G. (2018b). Logical and inequality implications for reducing the size and difficulty of quadratic unconstrained binary optimization problems. *European Journal of Operational Research*, 265(3), 829–842.

Hadfield, S., Wang, Z., O’Gorman, B., Rieffel, E. G., Venturelli, D., & Biswas, R. (2019). From the quantum approximate optimization algorithm to a quantum alternating operator ansatz. *Algorithms*, 12(2), 34.

Kadowaki, T., & Nishimori, H. (1998). Quantum annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*, 58(5), 5355.

McGeoch, C., & Farré, P. (2020). *The D-Wave Advantage System: An Overview. Technical Report*. D-Wave.

Sharma, A. K., & Maharjan, P. (2018). *Quantum Annealing as an Optimized Simulated Annealing: A Case Study*. Conference paper 4th International IT Conference on ICT with smart computing.

Van Vaerenbergh, T. et al. (2021). Integrated coherent Ising machines for next-generation optimization accelerators. *Proceedings Volume 11703, AI and Optical Data Sciences II*. doi.org/10.1117/12.2585839.

FRANK PHILLIPSON is senior scientist bij TNO en bijzonder hoogleraar Operations Research aan Maastricht University. Naast het oplossen van optimalisatievraagstukken voor logistiek, telecommunicatie en militaire toepassingen is hij verantwoordelijk voor het onderzoek naar algoritmes voor en toepassingen van quantum computers op het gebied van optimalisatie en machine learning. E-mail: frank.phillipson@tno.nl