ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА
2024. Т. 55, вып. 3. С. 706–710

КВАНТОВЫЙ АППРОКСИМАЦИОННЫЙ ОПТИМИЗАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Ю. Г. Палий [1,2,*], *А. А. Боголюбская* [1], *Д. А. Янович* [1]

[1] Объединенный институт ядерных исследований, Дубна
[2] Институт прикладной физики, Молдавский госуниверситет, Кишинев

Вводится представление модели Изинга в продольном магнитном поле на квантовом компьютере. Построен анзац волновой функции модели для квантового аппроксимационного оптимизационного алгоритма. Приведены схема и результат ее работы для решетки размером 2×2.

A representation of the Ising model in a longitudinal magnetic field on a quantum computer is introduced. The ansatz of the wave function of the model for a quantum approximation optimization algorithm is constructed. The scheme and the result of its operation for a lattice of size 2×2 are presented.

PACS: 03.67.Ac; 03.67.Lx

ВВЕДЕНИЕ

Квантовые алгоритмы для решения задач квантовой теории поля могут быть эффективнее классических, поэтому их предполагается использовать для задач, которые неразрешимы для обычных компьютеров [1]. Из-за несовершенства квантовых компьютеров сегодня в центре внимания находятся гибридные алгоритмы, в которых роль квантового компьютера заключается только в построении волновой функции моделируемой системы и измерении ее наблюдаемых. На классическом компьютере происходит процесс оптимизации параметров квантовых гейтов (вентилей) для достижения требуемого значения функции стоимости, определенной по измерениям, проведенным на квантовом компьютере [2]. Работа таких квантовых вариационных алгоритмов основана на вариационном принципе Рэлея–Ритца в квантовой механике: для любой пробной волновой функции $|x(\alpha)\rangle$ с параметрами $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$ среднее значение гамильтониана не меньше энергии основного состояния:

$$\langle x(\alpha)| \mathcal{H} |x(\alpha)\rangle \geqslant E_0.$$

* E-mail: palii@jinr.ru

Наиболее перспективным среди гибридных алгоритмов считается квантовый аппроксимационный оптимизационный алгоритм QAOA [3], обсуждаемый в данной работе.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КВАНТОВОМ КОМПЬЮТЕРЕ

Каждому узлу решетки ставится в соответствие кубит регистра квантового компьютера. Произвольное распределение значений спинов в узлах решетки задается набором значений битовых переменных $z = z_1 z_2 \cdots z_n$, где каждая переменная z_i определяет ориентацию спина в i-м узле и принимает два значения: $z_i = \pm 1$. Значение переменной z_i соответствует измерению оператора Паули $Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$, действующего на i-й кубит в вычислительном базисе. Если i-й кубит находится в одном из базисных состояний, $|0\rangle$ или $|1\rangle$, то

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \leftrightarrow z_i = +1, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \leftrightarrow z_i = -1,$$

т. е. величина z_i — это не что иное, как собственное значение оператора Z для данного состояния. Это означает, что 2^n базисных состояний квантового регистра в точности соответствуют 2^n возможным конфигурациям спинов на решетке:

$$\text{битовая строка } z = z_1 z_2 \cdots z_n \;\longleftrightarrow\; \text{квантовый регистр } |z\rangle = |z_1 z_2 \cdots z_n\rangle.$$

Произвольное состояние $|\psi\rangle$ квантового регистра представляет суперпозицию всех возможных ориентаций спинов на решетке с различными амплитудами.

Оператор Гамильтона модели Изинга строится из многокубитных операторов $Z^{(i)}$:

$$Z^{(i)} = \mathbb{I} \otimes \ldots \otimes Z \otimes \ldots \otimes \mathbb{I},$$

где оператор Z стоит на i-м месте, т. е. действует на i-й кубит. В случае взаимодействия ближайших соседей, т. е. спин-спинового взаимодействия с константой J, и взаимодействия спинов с внешним магнитным полем h гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H}_C(Z) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} Z^{(i)} Z^{(j)} - h \sum_i Z^{(i)}, \tag{1}$$

где $\langle i, j \rangle$ — это множество пар соседних спинов, а во втором слагаемом сумма идет по всем узлам решетки. Индекс C означает, что среднее значение гамильтониана используется в качестве функции стоимости (cost function) в вариационном процессе минимизации.

АНЗАЦ QAOA ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Вариационный анзац $|x(\alpha)$ волновой функции в алгоритме QAOA состоит из нескольких одинаковых слоев операторов. В слой входят движущий (driver) и смешивающий (mixer) операторы. Прежде всего кубиты переводятся из состояния $|0\rangle^{\otimes n}$ в состояние равной суперпозиции действием гейтов Адамара H на каждый из n кубитов регистра:

$$H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{z\in\{0,1\}^n} |z\rangle,$$

в результате чего все возможные конфигурации спинов имеют равную вероятность появления.

• Движущий оператор представляет собой эволюционный оператор, соответствующий гамильтониану $\mathcal{H}_C(Z)$ $(J = 1)$:

$$U(\gamma, \mathcal{H}_C) = \mathrm{e}^{i\pi\gamma\mathcal{H}_C} = \prod_{\langle i,j\rangle} \mathrm{e}^{-i\pi\gamma Z^{(i)} Z^{(j)}} \prod_{i} \mathrm{e}^{-i\pi\gamma h Z^{(i)}},$$

а вариационный параметр γ играет роль времени эволюции.

• Смешивающий оператор строится из операторов Паули X:

$$U(\beta, B) = \mathrm{e}^{i\pi\beta B} = \prod_{j=1}^{n} \mathrm{e}^{i\pi\beta X^{(j)}}, \quad B = \sum_{j=1}^{n} X^{(j)},$$

где переменная β является вторым вариационным параметром в данном слое анзаца.

Таким образом, весь анзац QAOA, включающий p слоев, имеет вид

$$|\psi(\gamma, \beta)\rangle = \underbrace{U(\beta_p, B)U(\gamma_p, \mathcal{H}_C)}_{p} \cdots \underbrace{U(\beta_1, B)U(\gamma_1, \mathcal{H}_C)}_{1} H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n}. \qquad (2)$$

Из теоремы, доказанной в [3], следует, что с ростом числа слоев минимальное среднее $E_p(\gamma, \beta)$ гамильтониана $\mathcal{H}_C$, найденное с помощью алгоритма QAOA, стремится к минимальному значению $\min\limits_{z} \mathcal{H}_C(z)$ среди всех возможных битовых строк z:

$$\lim_{p\to\infty} \min_{\gamma,\beta} E_p(\gamma, \beta) = \min_{z} \mathcal{H}_C(z), \quad E_p(\gamma, \beta) \equiv \langle\psi(\gamma, \beta)|\mathcal{H}_C|\psi(\gamma, \beta)\rangle.$$

В реальности число слоев p конечно, поэтому алгоритм является приближенным (аппроксимационным).

ПРИМЕР: МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА РЕШЕТКЕ 2 × 2

Рассмотрим однослойный анзац QAOA (2) для модели Изинга с гамильтонианом (1) на решетке 2×2. Четыре кубита на квантовой схеме (рис. 1, $h = 1/2$) соответствуют четырем спинам в узлах решетки. Гейты

```
q00: ──H──ZZ────────ZZ─────────Z^(0.5*γ)───────────────────────────────X^(β)──
          │         │
q01: ──H──┼─────────ZZ^(γ)──ZZ─────────Z^(0.5*γ)───────────────────────X^(β)──
          │                 │
q10: ──H──ZZ^(γ)────────────┼──────────ZZ─────────────Z^(0.5*γ)──X^(β)──
                            │          │
q11: ──H────────────────────ZZ^(γ)─────ZZ^(γ)─────────Z^(0.5*γ)──X^(β)──
```

Рис. 1. Квантовая цепь для анзаца QAOA (2) с одним слоем ($p = 1$), созданная в среде Cirq [4]

реализуют движущий $U(\gamma, \mathcal{H}_C)$ и смешивающий $U(\beta, B)$ операторы. Для минимизации энергии $E_1(\gamma, \beta)$ в пространстве двух параметров γ и β использовались различные методы оптимизации:

— перебор параметров по двумерной сетке,

— оптимизация при помощи метода градиентного спуска.

В качестве стартового значения параметров в методе градиентного спуска можно использовать данные, полученные в методе перебора. График распределения средних значений энергии $E_1(\gamma, \beta)$ для оператора Гамильтона (1), найденных по приготовленной волновой функции $|\psi(\gamma, \beta)\rangle$ (2) ($p = 1$) в пространстве двух параметров γ и β, представлен на рис. 2. При значениях параметров $\gamma = 1{,}0$, $\beta = 0{,}5$ волновая функция $|\psi(\gamma, \beta)\rangle$ имеет вид $[-0{,}9999999, 0, \ldots, 0]$. Отлична от нуля лишь первая компонента, отвечающая состоянию регистра $|0000\rangle$, т. е. битовой строке $z = 1111$.

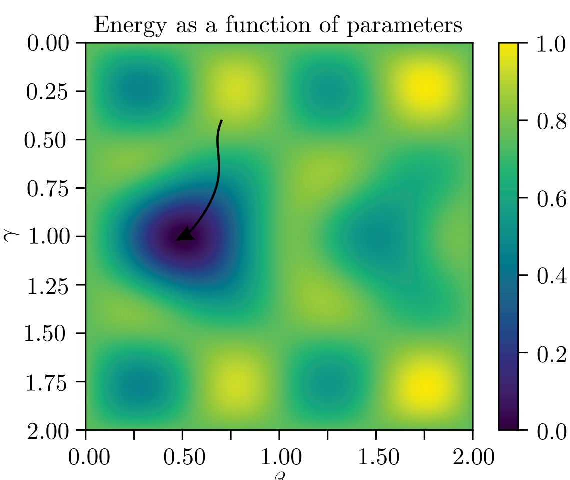

Рис. 2. Зависимость энергии $E_1(\gamma, \beta)$ от значений параметров, найденная по схеме, представленной на рис. 1. Траектория градиентного спуска обозначена на графике линией со стрелкой

Такая ориентация спинов действительно обеспечивает минимум энергии для гамильтониана (1).

Благодарности. Авторы выражают благодарность команде HybriLIT за помощь в организации вычислений на кластере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Jordan S. P., Lee K. S. M., Preskill J.* Quantum Algorithms for Quantum Field Theories // Science. 2012. V. 336. P. 1130–1133.
2. *Hidary J. D.* Quantum Computing: An Applied Approach. 2nd ed. Springer Nature Switzerland AG, 2021.
3. *Farhi E., Goldstone J., Gutmann S.* A Quantum Approximate Optimization Algorithm. arXiv:1411.4028 [hep-th].
4. Google Quantum AI/Software/Cirq/Experiments/QAOA. Quantum Approximate Optimization Algorithm for the Ising Model. https://quantumai.google/cirq/experiments/qaoa/qaoa_ising.