

P11-2024-57

Ю. Г. Палий^{1,2,*}, А. А. Боголюбская¹, Д. А. Янович¹

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ АЛГОРИТМА QAOA
НА СИМУЛЯТОРЕ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ Cirq

Направлено в журнал «Discrete and Continuous Models and Applied
Computational Science»

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

² Институт прикладной физики, Молдавский государственный
университет, Кишинев

* E-mail: palii@jinr.ru

Палий Ю. Г., Боголюбская А. А., Янович Д. А.

P11-2024-57

Моделирование работы алгоритма QAOA
на симуляторе квантовых вычислений Cirq

Обсуждается задача поиска состояния с наименьшей энергией в модели Изинга с продольным магнитным полем на квантовом компьютере с использованием квантового аппроксимационного оптимизационного алгоритма (QAOA). Базовые состояния регистра квантового компьютера соответствуют конфигурациям спинов на пространственной решетке. Гамильтониан модели представляется набором квантовых гейтов (quantum gates). Средняя величина энергии может быть эффективно измерена с помощью теста Адамара. На ряде усложняющихся примеров представлено моделирование работы квантового алгоритма QAOA на симуляторе квантовых вычислений Cirq. Приведены основные доводы в пользу эффективности применения квантового компьютера в данной задаче.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2024

Palii Yu. G., Bogolubskaya A. A., Yanovich D. A.

P11-2024-57

Modeling of the Operation of the Algorithm QAOA
with the Software Library Cirq

We discuss the problem of finding the lowest energy state in the Ising model with a longitudinal magnetic field on a quantum computer using the quantum approximation optimization algorithm (QAOA). The base states of the quantum computer register correspond to spin configurations on a spatial lattice. The Hamiltonian of the model is represented by a set of quantum gates. The average energy value can be effectively measured using the Hadamard test. Increasingly complex examples are used to simulate the operation of the quantum algorithm QAOA by means of the software library Cirq. The main arguments in favor of the efficiency of using a quantum computer in this problem are presented.

The investigation has been performed at the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2024

ВВЕДЕНИЕ

Феномен квантовой запутанности, т. е. существование особых, не описываемых классической физикой, корреляций между состояниями частиц в микромире, приводит к тому, что описание системы даже из сотни таких частиц недоступно для суперкомпьютеров без существенных упрощений. В то же время для квантового компьютера, который использует в роли бит квантовые частицы — кубиты, этот феномен служит ресурсом для алгоритмов, гораздо более эффективных, чем классические. Квантовая теория поля на пространственно-временной решетке представляет собой один из примеров, для которых расчеты на обычных компьютерах неэффективны, например, из-за проблемы знака в методе Монте-Карло. Сейчас уже разработаны квантовые алгоритмы с полиномиальным и даже экспоненциальным ускорением по сравнению с классическими. Поэтому предполагается, что именно использование квантового компьютера позволит продвинуться в изучении физики высоких энергий [1], квантовой химии и широкого круга других задач [2, 3].

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. В классическом компьютере происходит процесс оптимизации параметров квантовых гейтов (вентилей) для достижения требуемого значения функции стоимости, определенной по измерениям, проведенным на квантовом компьютере [4]. Работа таких квантовых вариационных алгоритмов основана на вариационном принципе Рэлея–Ритца в квантовой механике: для любой пробной волновой функции $|\psi(\alpha)\rangle$ с параметрами $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ среднее значение гамильтониана не меньше энергии основного состояния,

$$\langle \psi(\alpha) | \mathcal{H} | \psi(\alpha) \rangle \geq E_0.$$

Наиболее перспективным среди гибридных алгоритмов считается квантовый аппроксимационный оптимизационный алгоритм QAOA [5], обсуждаемый в данной работе. Он обладает универсальностью благодаря настройке на конкретную задачу, поскольку ее гамильтониан используется при подготовке вариационного анзаца волновой функции. Доказано, что алгоритм QAOA позволяет избежать проблемы плато в ходе оптимизации параметров. Существуют аргументы в пользу возможности алгоритма продемонстрировать превосходство квантовых компьютеров над классическими [3].

Задача нахождения энергии основного состояния и соответствующего вектора состояния является одной из основных в теории фазовых переходов и критических явлений в квантовых системах. Модель Изинга в различных вариантах наряду с другими моделями спиновых систем служит отправной точкой для многочисленных приложений в статистической физике, квантовой теории поля на пространственно-временной решетке, а также инженерных задач в области квантовых технологий. Отметим, что

нахождение основного состояния для модели Изинга представляет собой вычислительную задачу сложности класса NP. Алгоритм QAOA активно использовался для изучения основного состояния в моделях Изинга: определение магнетизации материалов [6], применение аналитических формул с целью лучшей оптимизации параметров QAOA [7], реализация алгоритма с помощью симулятора на ионах в ловушках [8].

Данная работа является простым введением в применение алгоритма QAOA к задаче нахождения энергии основного состояния на примере модели Изинга с продольным магнитным полем. В качестве отправной точки мы используем материалы, представленные на веб-страничке Google-Quantum AI, где описано программное средство для квантовых вычислений и их моделирования Cirq [9], о котором мы, следуя разработчикам, будем говорить как о библиотеке или фреймворке (software library, framework). Изложение дополнено вычислениями для решеток спинов различной конфигурации, в том числе и трехмерной, для которой модель Изинга неинтегрируема. Показано, как с увеличением числа слоев в анзаце вектора состояния возрастает точность нахождения энергии. Кроме того, добавлено использование теста Адамара для эффективного измерения средней величины энергии.

1. АНЗАЦ QAOA ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА

1.1. 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 $z = z_1 z_2 \dots z_n$, 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,

битовая строка $z = z_1 z_2 \dots z_n \longleftrightarrow$

$$\longleftrightarrow \text{квантовый регистр } |z\rangle = |z_1 z_2 \dots z_n\rangle. \quad (1.1)$$

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 $Z^{(i)}$,

$$Z^{(i)} = \mathbb{I} \otimes \dots \otimes Z \otimes \dots \otimes \mathbb{I}, \quad (1.2)$$

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

$$\mathcal{H}(Z) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} Z^{(i)} Z^{(j)} - h \sum_i Z^{(i)}, \quad (1.3)$$

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

Для задания матрицы оператора Гамильтона (1.3) на классическом компьютере стоит заметить, что матрица оператора $Z^{(i)}$ диагональна. Если трактовать диагональ z_i как i -ю строку матрицы размера $n \times 2^n$ и сделать в этой матрице замену $1 \rightarrow 0$ и $-1 \rightarrow 1$, то мы получим таблицу значений n -разрядного двоичного числа. Каждой колонке матрицы будут соответствовать битовая строка и состояние квантового регистра согласно (1.1). При этом первая колонка всегда есть битовая строка $z = 11 \dots 1$ ($|00 \dots 0\rangle$), а последняя — строка $z = -1, -1, \dots, -1$ ($|11 \dots 1\rangle$). Таким образом, нам необходимо ввести такую таблицу и взять все возможные произведения ее строк. При этом затраты памяти растут экспоненциально по числу кубитов n (числу узлов решетки). Пример такой матрицы будет дан ниже (см. разд. 2).

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

$$H^{\otimes n} |0\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{z \in \{0,1\}^n} |z\rangle, \quad H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad (1.4)$$

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

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

$$U(\gamma, \mathcal{H}) = e^{i\pi\gamma\mathcal{H}/2} = \prod_{\langle j,k \rangle} e^{-i\pi\gamma Z^{(j)} Z^{(k)}/2} \prod_l e^{-i\pi\gamma h Z^{(l)}/2}, \quad i = \sqrt{-1}, \quad (1.5)$$

а вариационный параметр γ играет роль времени эволюции.

- Смешивающий оператор строится из операторов Паули X :

$$U(\beta, B) = e^{i\pi\beta B/2} = \prod_{j=1}^n e^{i\pi\beta X^{(j)}/2}, \quad B = \sum_{j=1}^n X^{(j)}, \quad (1.6)$$

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

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

$$|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle = \underbrace{U(\beta_p, B)U(\gamma_p, \mathcal{H})}_{p} \dots \underbrace{U(\beta_1, B)U(\gamma_1, \mathcal{H})}_1 H^{\otimes n} |0\rangle^{\otimes n}. \quad (1.7)$$

Из теоремы, доказанной в [5], следует, что с ростом числа слоев минимальное среднее $E_p(\gamma, \beta)$ гамильтониана \mathcal{H} , найденное с помощью алгоритма QAOA, стремится к минимальному значению $\min_z \mathcal{H}(z)$ среди всех возможных битовых строк z :

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \min_{\gamma, \beta} E_p(\gamma, \beta) = \min_z \mathcal{H}(z), \quad E_p(\gamma, \beta) \equiv \langle \psi_p(\gamma, \beta) | \mathcal{H} | \psi_p(\gamma, \beta) \rangle. \quad (1.8)$$

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

2. МЕТОДЫ НАХОЖДЕНИЯ ЭНЕРГИИ

2.1. Моделирование работы QAOA с использованием доступа к вектору состояния. Рассмотрим подробно самый простой способ моделирования работы алгоритма QAOA на симуляторе квантовых вычислений, используя два фактора, упрощающие вычисление энергии $E_p(\gamma, \beta)$ (1.8). Во-первых, симулятор дает доступ непосредственно к вектору состояния $|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle$ (1.7) квантового регистра, построенного с помощью QAOA. Во-вторых, поскольку гамильтониан (1.3) диагонален, средняя энергия (1.8) на один узел решетки может быть вычислена с использованием вектора состояния n -кубитного регистра и диагональных элементов гамильтониана \mathcal{H}_{ii} ,

$$E_p(\gamma, \beta) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{2^n-1} \overline{\psi_p(\gamma, \beta)_i} \psi_p(\gamma, \beta)_i \mathcal{H}_{ii}, \quad (2.1)$$

т. е. средняя энергия $E_p(\gamma, \beta)$ равна взвешенной сумме диагональных элементов гамильтониана, в качестве весов используются квадраты модулей компонент вектора состояния.

Для примера рассмотрим спиновую решетку размера 2×2 , представленную на рис. 1, ее всевозможные состояния моделируются регистром из 4 кубитов ($n = 4$). Далее мы опишем построение квантовой схемы (рис. 2) для однослойного анзаца QAOA (1.7) ($p = 1$) и ее использование для нахождения минимума энергии спиновой решетки в продольном магнитном

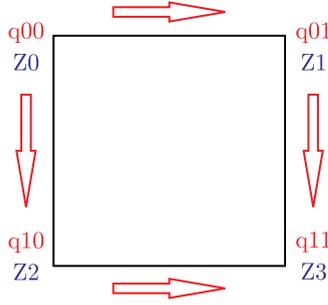


Рис. 1. Четыре кубита, соответствующие четырем спином на решетке 2×2 . Красные стрелки соответствуют парному взаимодействию спинов в гамильтониане (2.3)

поле. Произвольный нормированный вектор конечного состояния регистра в вычислительном базисе задается амплитудами $\alpha_i(\gamma, \beta)$, $i = 0, \dots, 15$,

$$|\psi_1(\gamma, \beta)\rangle = \alpha_0(\gamma, \beta)|0000\rangle + \alpha_1(\gamma, \beta)|0001\rangle + \dots + \alpha_{15}(\gamma, \beta)|1111\rangle, \quad (2.2)$$

где $\sum_i \bar{\alpha}_i(\gamma, \beta)\alpha_i(\gamma, \beta) = 1$. Гамильтониан (1.3) принимает явный вид:

$$\mathcal{H}(Z) = -J\left(Z^{(0)}Z^{(1)} + Z^{(0)}Z^{(2)} + Z^{(1)}Z^{(3)} + Z^{(2)}Z^{(3)}\right) - h\sum_{i=0}^3 Z^{(i)}, \quad (2.3)$$

а матрица размера 4×16 , составленная из диагоналей z_i , $i = 0, \dots, 3$ операторов $Z^{(i)}$ (1.2), соответствует набору 4-значных двоичных чисел после замены $1 \rightarrow 0, -1 \rightarrow 1$:

$$\begin{bmatrix} z_0 \\ z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & \dots & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & \dots & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Теперь, согласно рецепту, данному в разд. 1, чтобы построить операторы спин-спинового взаимодействия в гамильтониане (2.3), следует взять произведения соответствующих строк матрицы (2.4). Просуммировав их и добавив магнитные слагаемые, получим матрицу гамильтониана, являющуюся диагональной матрицей с диагональными элементами (при значениях констант $J = 1$ и $h = 1/2$):

$$[-1.5, -0.25, -0.25, 0, -0.25, 0, 1, 0.25, -0.25, 1, 0, 0.25, 0, 0.25, 0.25, -0.5].$$

Отметим, что минимальное значение -1.5 стоит на первом месте, это значит, что в ходе вариации параметров надо найти такие значения $\gamma_{\min}, \beta_{\min}$, чтобы выполнялись условия

$$\bar{\alpha}_0(\gamma_{\min}, \beta_{\min})\alpha_0(\gamma_{\min}, \beta_{\min}) = 1, \quad \alpha_i(\gamma_{\min}, \beta_{\min}) = 0, \quad i \neq 0. \quad (2.5)$$

Таким образом мы приходим к состоянию $|\psi_1(\gamma, \beta)\rangle = |0000\rangle$, в котором все спины ориентированы вдоль магнитного поля.

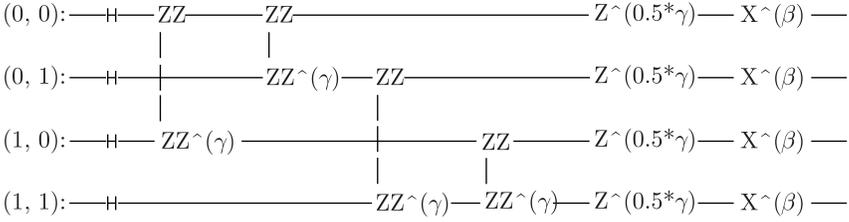


Рис. 2. Квантовая цепь для анзаца QAOA (1.7) с одним слоем ($p = 1$, $J = 1$ и $h = 1/2$) для решетки 2×2 , созданная средствами библиотеки Cirq [9]

На квантовой схеме (рис. 2) однослойного анзаца QAOA (1.7) четыре кубита $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$ соответствуют четырем спинам в узлах решетки и образуют квантовый регистр. На горизонтальных линиях располагаются гейты, действующие на кубиты поочередно, слева направо. В первой, самой левой колонке расположены операторы Адамара H , приготавливающие равновзвешенную суперпозицию (1.4). Далее следуют гейты, которые реализуют движущий $U(\gamma, \mathcal{H})$ и смешивающий $U(\beta, B)$ операторы.

Часть движущего оператора $U(\gamma, \mathcal{H})$, отвечающая спин-спиновому взаимодействию в гамильтониане (2.3), представлена гейтами ZZ (вертикальные линии, соединяющие линии соответствующих кубитов и имеющие верхний конец ZZ , а нижний $ZZ^\wedge(\gamma)$). Гейты ZZ подробно описаны в приложении 1, а здесь мы приводим выражение для гейта ZZ , описывающего взаимодействие левого верхнего спина и левого нижнего спина на рис. 1, которым отвечают кубиты $(0, 0)$ и $(1, 0)$ и Z -строки Паули $Z^{(0)}$ и $Z^{(2)}$ соответственно:

$$\exp\left(-i\pi\gamma Z^{(0)} \cdot Z^{(2)}/2\right), \quad Z^{(0)} = Z \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \quad Z^{(2)} = \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes Z \otimes \mathbb{I}.$$

Этот гейт следует сразу за колонкой гейтов Адамара. Вся часть движущего оператора $U(\gamma, \mathcal{H})$, отвечающая спин-спиновому взаимодействию ZZ , имеет вид

$$U_{ZZ}(\gamma, \mathcal{H}) = e^{-i\pi\gamma Z^{(2)} \cdot Z^{(3)}/2} e^{-i\pi\gamma Z^{(1)} \cdot Z^{(3)}/2} e^{-i\pi\gamma Z^{(0)} \cdot Z^{(1)}/2} e^{-i\pi\gamma Z^{(0)} \cdot Z^{(2)}/2}$$

и является диагональной матрицей с главной диагональю

$$[e^{-2\pi i\gamma}, 1, 1, 1, 1, 1, e^{2\pi i\gamma}, 1, 1, 1, 1, 1, 1, e^{-2\pi i\gamma}].$$

Оператор, реализующий взаимодействие каждого спина с магнитным полем в движущем операторе (1.5), является оператором вращения соответствующего кубита вокруг оси z ,

$$R_z(\pi\gamma h) = e^{-i\pi\gamma h Z/2} = \cos \frac{\pi\gamma h}{2} \mathbb{I} - i \sin \frac{\pi\gamma h}{2} Z = \begin{bmatrix} e^{-i\pi\gamma h/2} & 0 \\ 0 & e^{i\pi\gamma h/2} \end{bmatrix},$$

и обозначается на схеме символом $Z^\wedge(0.5 * \gamma)$ на линии каждого кубита. Магнитная часть движущего оператора, которая строится из экспонент от

Z-струн Паули,

$$\exp\left(-i\pi h\gamma Z^{(j)}/2\right), \quad j = 0, \dots, 3,$$

представляется диагональной матрицей

$$U_{hZ}(\gamma, \mathcal{H}) = e^{-i\pi h\gamma Z^{(3)}/2} e^{-i\pi h\gamma Z^{(2)}/2} e^{-i\pi h\gamma Z^{(1)}/2} e^{-i\pi h\gamma Z^{(0)}/2}$$

с главной диагональю

$$[e^{-2\pi i h\gamma}, e^{-\pi i h\gamma}, e^{-\pi i h\gamma}, 1, e^{-\pi i h\gamma}, 1, 1, e^{\pi i\gamma}, \\ e^{-\pi i h\gamma}, 1, 1, e^{\pi i\gamma}, 1, e^{\pi i h\gamma}, e^{\pi i h\gamma}, e^{2\pi i\gamma}].$$

Смешивающий оператор $U(\beta, B)$ (1.6) состоит из операторов вращения кубитов вокруг оси x ,

$$R_x(\pi\beta) = e^{-i\pi\beta X/2} = \cos\frac{\pi\beta}{2} \mathbb{I} - i \sin\frac{\pi\beta}{2} X = \begin{bmatrix} \cos\frac{\pi\beta}{2} & -i \sin\frac{\pi\beta}{2} \\ -i \sin\frac{\pi\beta}{2} & \cos\frac{\pi\beta}{2} \end{bmatrix},$$

где X — это X-гейт Паули:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

На квантовой схеме (рис. 2) они обозначены символами $X^\wedge(\beta)$. Таким образом, смешивающий оператор представляется матрицей

$$U_{Mix}(\beta, B) = e^{-i\pi\beta X^{(3)}/2} e^{-i\pi\beta X^{(2)}/2} e^{-i\pi\beta X^{(1)}/2} e^{-i\pi\beta X^{(0)}/2},$$

представляющей произведение экспонент от X-струн Паули $X^{(i)}$:

$$X^{(i)} = \mathbb{I} \otimes \dots \otimes X \otimes \dots \otimes \mathbb{I}. \quad (2.6)$$

Здесь оператор Паули X стоит на i -м месте, т. е. действует на i -й кубит.

Прежде чем использовать анзац QAOA в вариационной процедуре для минимизации энергии, с его помощью можно построить трехмерный график зависимости энергии $E_1(\gamma, \beta)$ (формула (2.1) при $p = 1$ с гамильтонианом (2.3)) в некоторой области значений параметров γ, β , чтобы получить представление о характере функции, которую предстоит минимизировать. На рис. 3 представлен график распределения значений энергии $E_1(\gamma, \beta)$ на двумерной сетке с шагом $1/100$ в области параметров $0 \leq \{\gamma, \beta\} \leq 2$. Поверхность напоминает подставку для яиц, минимум энергии $E_1(\gamma, \beta)$ достигается на дне самой глубокой ячейки темно-синего цвета, где значения параметров равны

$$\gamma_{\min} = 1,0, \quad \beta_{\min} = 0,5. \quad (2.7)$$

При этих параметрах для нулевой компоненты α_0 вектора состояния $|\psi_1(\gamma, \beta)\rangle$ (2.2) выполняется равенство $|\alpha_0|^2 = 1$, а остальные компоненты равны 0 с точностью до погрешности компьютерных вычислений.

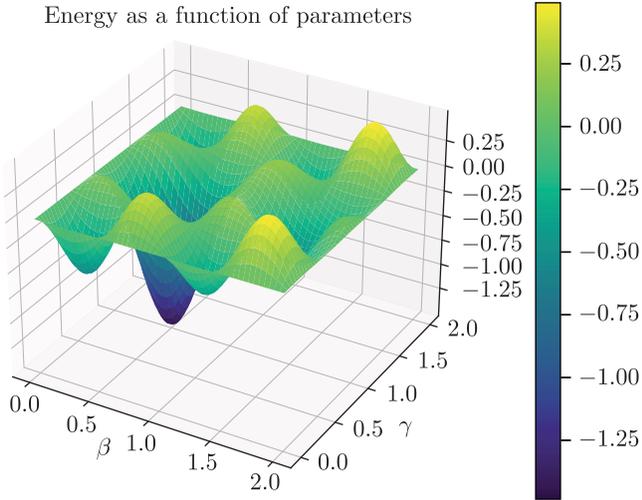


Рис. 3. Решетка размера 2×2 . Анзац QAOA с одним слоем. Зависимость энергии $E_1(\gamma, \beta)$ от значений параметров, найденная по схеме, представленной на рис. 2, с шагом сетки $1/100$

В ходе вариации параметров γ и β значение энергии $E_1(\gamma, \beta)$, найденное с помощью анзаца QAOA, может использоваться в различных методах оптимизации на классическом компьютере. На рис. 4 (слева — трехмерный график, справа — двумерная проекция на плоскость параметров) изображены оптимизационные траектории, полученные следующими методами:

- 1) метод градиентного спуска (красная линия);
- 2) метод Нелдера–Мида, Nelder–Mead, 1965 (малиновая линия);
- 3) метод COBYLA, Powell, 1994 (ломаная линия черного цвета на левой панели и белого на правой).

Все траектории стартуют из начальной точки $(\gamma_0, \beta_0) = (0,4; 0,7)$ вблизи локального максимума и сходятся в точке минимума (2.7) за 100 шагов с практически одинаковой погрешностью менее одного процента. Подробное сравнение методов будет сделано далее на примере более ресурсоемких вычислений.

Размерность (число базисных состояний) вектора состояния (1.7) анзаца QAOA для решетки размера $i \times j$ равна 2^n , $n = i \times j$, т. е. растет экспоненциально по числу узлов решетки. Естественно ожидать, что при этом требуется больше вариационных параметров для успешной оптимизации. Следовательно, необходимо увеличивать число p слоев анзаца. Например, в случае решетки размера 3×3 поиск минимума энергии (1.8) оказался успешным при использовании трехслойного анзаца ($p = 3$). В таком случае в качестве предварительного шага перед вариационной процедурой можно провести вычисление значений энергии на $2p = 6$ -мерной сетке в общем пространстве параметров всех слоев одновременно, $0 \leq \gamma_i \leq 2$,

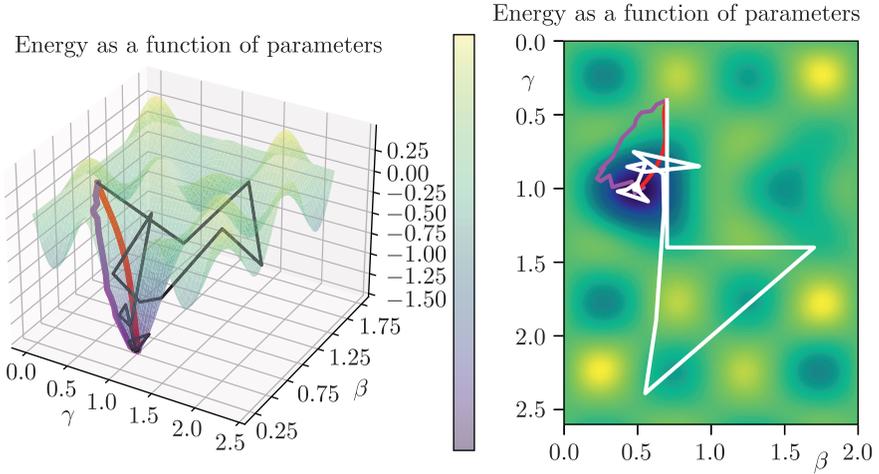


Рис. 4. Траектории оптимизации

$0 \leq \beta_i \leq 2$, $i = 1, 2, 3$. Выбрав шаг $1/2$, мы нашли более 50 точек, в которых с расчетной точностью значение энергии равно минимальному $E(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) \approx E_{\min} = -1,83333(3)$,

	γ_1	β_1	γ_2	β_2	γ_3	β_3
1	0,0	0,0	0,5	1,0	1,5	0,5
2	0,0	0,0	1,5	1,0	0,5	1,5
...
51	1,5	1,0	1,5	1,5	1,0	0,5
52	1,5	1,5	0,0	1,5	0,5	1,5

(2.8)

и при этом выполняются условия оптимальности параметров (2.5) анзаца QAOA (под $\gamma_{\min}, \beta_{\min}$ надо понимать весь набор из 6 параметров).

2.2. Метод проб: определение вероятности состояния решетки Изинга. В предыдущем пункте для расчета энергии $E_p(\gamma, \beta)$ (1.8) мы использовали амплитуды α_i вектора состояния $|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle$ (1.7), приготовленного квантовой схемой (например, представленной на рис. 2). Однако вектор квантового состояния не наблюдаем непосредственно, и реально состояние регистра определяется измерением каждого из кубитов в серии измерений (проб) при фиксированных значениях всех $2p$ параметров $\vec{\gamma}, \vec{\beta}$ в p -слойном анзаце QAOA. Среднее значение энергии рассчитывается по

приближенной формуле

$$E_p(\gamma, \beta) \approx \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{P}_{i,p}(\gamma, \beta) \mathcal{H}_i, \quad (2.9)$$

где

$$\mathcal{P}_{i,p}(\gamma, \beta) = n_{ith \ state} / n_{meas}, \quad \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{P}_{i,p} = 1,$$

— вероятность нахождения регистра в i -м базисном состоянии, найденном $n_{ith \ state}$ раз в серии из n_{meas} измерений (проб). С ростом числа проб полученное значение энергии точнее соответствует значению, рассчитанному по вектору состояния.

Рассмотрим метод проб на примере однослойного анзаца QAOA для модели Изинга на решетке $2 \times 2 \times 2$. Если в гамильтониане \mathcal{H} (1.3) выбрать значения констант $J = 1$ и $h = 1/2$, то среднее значение энергии на один узел решетки меняется от минимального $-2,0$ в состоянии $|00000000\rangle$ 8-кубитного регистра до максимального $1,5$ в состояниях $|01101001\rangle$ и $|10010110\rangle$. На рис. 5 представлена зависимость энергии $E_1(\gamma, \beta)$ от значений параметров, найденная с использованием вектора состояния методом, описанным в п. 2.2. Минимум энергии достигается в точке

$$(\gamma_{\min}, \beta_{\min}) = (1,0; 1,5),$$

в которой амплитуда состояния $|00000000\rangle$ равна 1, а амплитуды всех остальных состояний — нулевые в пределах погрешности вычислений.

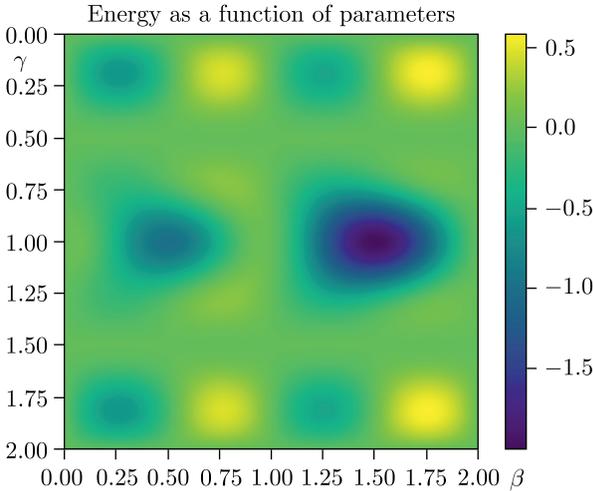


Рис. 5. Решетка размера $2 \times 2 \times 2$. Анзац QAOA с одним слоем ($p = 1$). Зависимость энергии $E_1(\gamma, \beta)$ от значений параметров с шагом сетки $1/100$

Для иллюстрации метода проб проведем серию измерений выходного состояния регистра при значении параметров

$$(\gamma, \beta) = (0,8; 1,2).$$

Перенумеруем базисные состояния регистра

$$|00000000\rangle, |00000001\rangle, \dots, |11111111\rangle$$

числами от 0 до 255. Из них в серии из 10000 измерений были обнаружены 249 состояний. Соответствующие номера базисных состояний и кратность их появления приведена ниже в порядке убывания кратности:

	0	1	2	...	248
Базисные состояния	0	8	128	...	147
Число появлений	447	301	269	...	1

Результаты представлены в виде гистограммы для вероятностей $\mathcal{P}_{i,1}(\gamma, \beta)$ на рис. 6. Соответствующие значения энергии E (собственные значения гамильтониана для данных состояний) приведены на рис. 7. Среднее значение энергии $E_1(\gamma, \beta)$ для этой серии, рассчитанное по формуле (2.9), и значение энергии (2.1), найденное с помощью вектора состояния с выбранными выше параметрами $(\gamma, \beta) = (0,8; 1,2)$, равны соответственно

$$-0,5186999999999999 \quad \text{и} \quad -0,5184009513359342.$$

Как видно, ошибка — в четвертом знаке, это подтверждает применимость метода проб.

В заключение заметим, что если задача состоит именно в нахождении самого распределения спинов на решетке с минимальной энергией, а не параметров анзаца QAOA для соответствующего вектора состояния, то метод проб позволяет сделать это очень эффективно. Точка

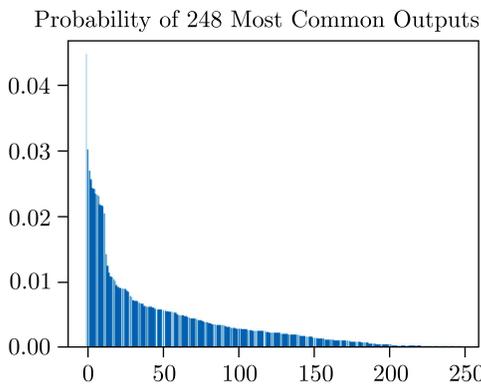


Рис. 6. Вероятности выпадания базисных состояний, полученные в серии измерений на решетке $2 \times 2 \times 2$ для вектора состояния с параметрами $(\gamma, \beta) = (0,8; 1,2)$

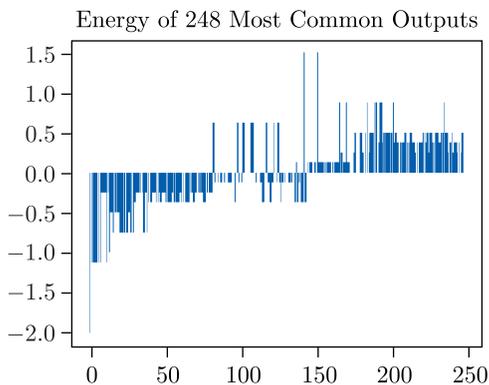


Рис. 7. Значения энергии E (собственные значения гамильтониана) для базисных состояний

$(\gamma, \beta) = (0,8; 1,2)$, выбранная для примера, заметно отличается от оптимальной: $(\gamma, \beta) = (1,0; 1,5)$, однако вероятность состояния $|00000000\rangle$, найденная методом проб, все равно наибольшая. Если при вычислении энергии $E_1(\gamma, \beta)$ (2.9) использовать наиболее вероятное значение энергии из всей серии измерений в каждой точке (γ, β) вместо ее среднего значения, то получим график, представленный на рис.8. Видно, что вероятность состояния $|00000000\rangle$ с минимальной энергией является доминирующей в значительной области параметров (γ, β) , тогда как лишь одна точка определяет само минимальное состояние.

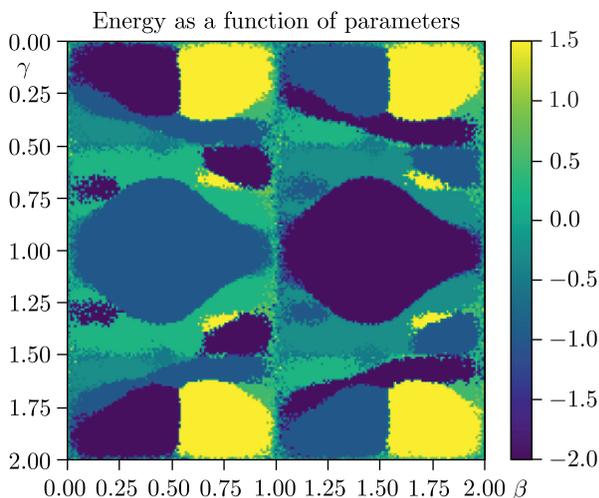


Рис. 8. График энергии $E(\gamma, \beta)$, полученный методом проб при отборе наиболее вероятных состояний на решетке $2 \times 2 \times 2$

2.3. Тест Адамара: вычисление квантовых средних для значений операторов. В представленных ранее примерах использования алгоритма QAOA роль квантового компьютера состояла в приготовлении анзаца для получения вектора состояния $|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle$ (1.7). Расчет среднего значения энергии $E_p(\gamma, \beta)$ по формулам (2.1) или (2.9) для вектора $|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle$ с использованием матрицы оператора Гамильтона \mathcal{H} и оптимизация параметров γ, β возлагались на классический компьютер. Однако, благодаря представлению квантовых операторов с помощью гейтов гораздо, эффективней находить значение $E_p(\gamma, \beta)$, измеряя состояние регистра квантового компьютера. В рассмотренном ниже примере для этого будет использован тест Адамара (Hadamard Test), позволяющий находить средние значения операторов в приготовленном состоянии $|\psi\rangle$ с помощью измерения всего лишь одного дополнительного кубита (ancilla qubit).

Квантовая схема, реализующая тест Адамара, представлена на рис. 9, заимствованном из Википедии. В ней происходит следующая последовательность преобразований дополнительного кубита $|0\rangle$ и некоторого входного состояния $|\psi\rangle$ регистра:

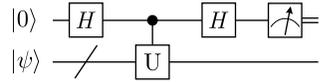


Рис. 9. Тест Адамара. Рисунок из Википедии

$$\begin{aligned}
 |0\rangle \otimes |\psi\rangle &\xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |\psi\rangle + |1\rangle \otimes |\psi\rangle) \\
 &\xrightarrow{\text{contr}-U} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |\psi\rangle + |1\rangle \otimes U|\psi\rangle) \\
 &\xrightarrow{H} \frac{1}{2} \left((|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes U|\psi\rangle \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \left((|0\rangle \otimes (\mathbb{I} + U)|\psi\rangle + |1\rangle \otimes (\mathbb{I} - U)|\psi\rangle) \right).
 \end{aligned}$$

Из последней строки видно, что вероятности обнаружить дополнительный кубит на выходе в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$ зависят от действительной части оператора U :

$$P(0) = \frac{1}{2} \langle \psi | (\mathbb{I} + \text{Re } U) | \psi \rangle, \quad P(1) = \frac{1}{2} \langle \psi | (\mathbb{I} - \text{Re } U) | \psi \rangle.$$

С учетом нормировки вектора состояния $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ отсюда следует, что действительная часть среднего значения оператора U равна

$$\text{Re} \langle \psi | U | \psi \rangle = P(0) - P(1).$$

Согласно равенству $P(0) + P(1) = 1$ среднее значение равно

$$\text{Re} \langle \psi | U | \psi \rangle = 1 - 2P(1) \quad \text{или} \quad \text{Re} \langle \psi | U | \psi \rangle = 2P(0) - 1.$$

В случае гамильтониана \mathcal{H} (1.3) модели Изинга рассмотренная схема достаточна. В общем случае при необходимости мнимая часть $\text{Im} \langle \psi | U | \psi \rangle$ измеряется с помощью схемы на рис. 9, в которую добавлен оператор

фазового сдвига S^\dagger , действующий на дополнительный кубит перед гейтом управляемого оператора U .

Используя тест Адамара, можно найти энергию $E(\gamma, \beta) = \langle \psi(\gamma, \beta) | \mathcal{H}(Z) | \psi(\gamma, \beta) \rangle$ как сумму средних значений всех слагаемых гамильтониана:

$$E(\gamma, \beta) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \langle \psi(\gamma, \beta) | Z^{(i)} Z^{(j)} | \psi(\gamma, \beta) \rangle - h \sum_i \langle \psi(\gamma, \beta) | Z^{(i)} | \psi(\gamma, \beta) \rangle. \quad (2.10)$$

Для примера тест Адамара был применен для расчета среднего значения энергии $E_3(\gamma, \beta)$ в случае трехслойного анзаца QAOA в модели Изинга на решетке размером 3×3 , о котором шла речь в конце п. 2.2. Для моделирования работы теста Адамара могут быть применены метод проб, то есть измерение состояния добавочного (ancilla) кубита $|0\rangle$, или же метод, использующий амплитуды общего вектора состояния схемы, как описанно в п. 2.2. Обоиими методами был подтвержден результат, полученный ранее, т.е. получен набор точек, в которых с расчетной точностью значение энергии равно минимальному E_{\min} .

3. ОПТИМИЗАЦИЯ

3.1. Рассмотренные примеры спиновых решеток и методы вычисления энергии. В работе проводился поиск минимума энергии для спиновых решеток шести размеров, приведенных в табл. 1, в которой представлены основные данные, определяющие сложность вычислений. Для каждой решетки указаны число кубитов в квантовой схеме, число слагаемых в гамильтониане, число спиновых конфигураций. Данные в двух последних колонках мы прокомментируем далее, после введения необходимых понятий. Для каждой из решеток использовался трехслойный анзац QAOA с шестью параметрами $(\gamma_1, \beta_1, \gamma_2, \beta_2, \gamma_3, \beta_3)$, а вычисление энергии

Таблица 1. Спиновые решетки. cuStateVec

Данные решетки		Число слагаемых в операторе энергии			Размер вектора состояния	Отношение времен Hadam/QAOA	
Решетка	Число кубитов n	ZZ слагаемых	μZ слагаемых	Общее	Число спиновых конфигураций 2^n	State vector	$n_{reps} = 1000$
3×3	9	12	9	21	512 B	22,0	20,2
$3 \times 2 \times 2$	12	20	12	32	4 KiB	35,1	29,4
4×4	16	24	16	40	64 KiB	76,0	37,9
$3 \times 3 \times 2$	18	33	18	51	256 KiB	204,0	48,0
5×5	25	40	25	65	32 MiB	566,3	120,3
$3 \times 3 \times 3$	27	54	27	81	128 MiB	997,3	160,9

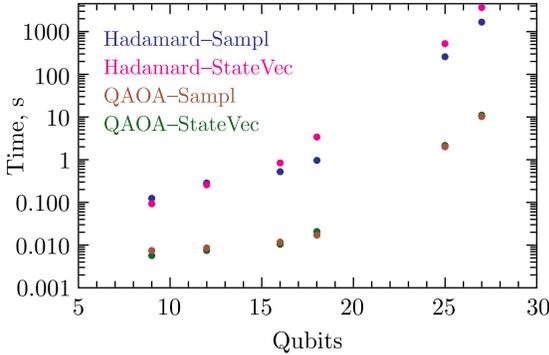


Рис. 10. Зависимость времени для одного вычисления энергии на CPU от числа кубитов

проводилось следующими четырьмя методами (с целью сравнения их по точности, времени расчета и требуемой памяти):

- 1) метод QAOA-State vector, использующий формулу (2.1),
- 2) метод QAOA-Sampling, использующий формулу (2.9),
- 3) метод Hadam-State vector, использующий вектор состояния на выходе схемы на рис. 9 для теста Адамара без измерения состояния дополнительного кубита и формулу (2.1),
- 4) метод Hadam-Sampling, использующий схему для теста Адамара с измерением состояния дополнительного кубита и формулу (2.10).

Библиотека qsim (см. приложение 2) позволила применить для каждого метода центральный процессор (CPU), а также графический процессор в двух вариантах: с использованием технологии CUDA или пакета cuStateVec из библиотеки NVIDIA cuQuantum SDK. Прежде всего были проведены однократные вычисления энергии, на рис. 10 представлено время вычисления при использовании центрального процессора. Видно, что методы Hadam-, использующие тест Адамара, требуют значительно больше времени, чем методы QAOA-. Отношение времен для схем разных размеров при использовании вектора состояния (методы State vector) и метода проб (методы Sampling) приведены в двух последних колонках табл. 1. В приложении 3 дано подробное сравнение времен и затрат памяти для всех методов и всех вариантов использования процессоров в случае трехмерной решетки размера 5×5 . Исходя из анализа этих данных, мы решили выбрать пакет cuStateVec для поиска минимума энергии.

3.2. Используемые локальные и глобальные методы оптимизации. Перед вариационной процедурой оптимизации мы провели вычисление значений энергии на $2p = 6$ -мерной сетке в общем пространстве параметров всех трех слоев, $0 \leq \gamma_i \leq 2$, $0 \leq \beta_i \leq 2$, $i = 1, 2, 3$ с шагом $1/2$ аналогично тому, как это было сделано для решетки размера 3×3 . Оказалось, что во всех точках найденного там набора из 52 точек (2.8)

выполняется условие минимума энергии $E(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) \approx E_{\min}$ для решеток всех размеров с соответствующим значением E_{\min} .

Прежде всего мы исследовали локальные методы поиска минимума в вариационной процедуре: метод градиентного спуска (gradient descent) и методы минимизация без вычисления градиента (direct search optimization, derivative-free optimization). В качестве последних были применены следующие методы из библиотеки `scipy.optimize`:

1. COBYLA. Алгоритм предложен Пауэллом (Powell M. J. D.) в 1994 г., симплексный метод, использующий понятие доверительной области (trust region) и линейную аппроксимацию энергии функции стоимости (linear approximations to the objective function). Мы использовали метод без задания связей (constraint functions) в пространстве параметров.

2. Modified Powell. Алгоритм предложен тем же автором, первоначальный вариант опубликован в 1964 г., использует метод сопряженных градиентов (conjugate direction method).

3. Nelder-Mead. Алгоритм предложен двумя авторами, Нелдером и Мидом (John A Nelder, Roger Mead) в 1965 г., симплексный метод.

Начальной точкой служила одна и та же точка,

$$(\gamma_1, \beta_1, \gamma_2, \beta_2, \gamma_3, \beta_3) = (0, 1; 0, 1; 0, 5; 1, 0; 1, 5; 0, 5),$$

которая отличалась от одной из общих точек минимума (2.8) первыми двумя координатами, у которой эти координаты были равны 0.

Для градиентной минимизации компоненты вектора градиента энергии в некоторой точке находились численно как отношение полуразности значений энергии в соседних точках к шагу дискретизации в пространстве параметров. Для выбора следующей точки в ходе минимизации параметры предыдущей точки сдвигались пропорционально компонентам вектора градиента. Алгоритм останавливался после 100 шагов. Минимизация проводилась обоими методами вычисления значения энергии как с помощью вектора состояния, так и методом проб с 1000 розыгрышей. Алгоритм работал успешно до размера решетки 5×5 (25 кубитов) как для схемы QAOA, так и для схемы Hadamard, но только при использовании вектора состояния. С методом проб градиентная минимизация оказалась невозможной даже для небольших решеток. Возможно, необходимо было применение более продвинутых алгоритмов и большее число проб.

Безградиентные методы были использованы только с методом проб с 1000 розыгрышей для каждого набора параметров по следующим причинам. С одной стороны, с такими условиями не справился метод градиентной минимизации, с другой стороны, именно метод проб актуален для реального квантового компьютера, и, наконец, этот метод является более быстрым и менее требовательным к памяти для решеток больших размеров (5×5 , $3 \times 3 \times 3$), как это показано в приложении 3. Все три метода успешно работали для всех размеров решеток при использовании обеих схем, QAOA и Hadamard. Однократное вычисление энергии на каждом шаге минимизации делает безградиентные методы менее чувствительными

к ошибкам в определении значения энергии по сравнению с градиентными методами, особенно при большом числе параметров.

В табл. 2¹ на примере решетки размера 5×5 сравниваются результаты работы выбранных безградиентных методов. Самым лучшим оказался метод COBYLA, как по точности найденного минимального значения, так и по скорости вычисления (минимальное число итераций и количества вычислений значений энергии). Метод Powell требовал примерно в три раза больше вычислений значений энергии, и, кроме того, для некоторых решеток он не нашел минимума. Наименее удачным был метод Nelder-Mead, которому требовалось больше всего вычислений энергии. При этом его точность была почти всегда заметно хуже, чем у двух других методов. Как правило, схема QAOA требовала меньше итераций, чем схема Hadamard на 5–10%. Число итераций и вычислений значений энергии не зависело от размеров решетки для всех алгоритмов. Отношение времени работы метода COBYLA к числу вычислений значений энергии примерно в два раза больше, чем время одного вычисления энергии для обеих схем, QAOA и Hadamard, приведенного в приложении 3. Для метода Powell среднее время на одно вычисление энергии лишь на несколько процентов больше времени отдельного вычисления для обеих схем. Алгоритм Nelder-Mead занимает промежуточное положение.

Для глобального поиска минимума энергии мы применили два метода (из библиотеки `scipy.optimize`):

1) дуальный отжиг (Dual Annealing, DA, авторы Y. Xiang, D. Y. Sun, W. Fan, X. G. Gong, 1997). Алгоритм стохастической глобальной оптимизации, модифицированная версия имитированного отжига (Simulated annealing);

2) симплицальная гомологическая глобальная оптимизация (Simplicial Homology Global Optimisation, SHGO, sampling method “sobol”, авторы S. C. Endres, C. Sandrock, W. W. Focke, 2018). Универсальный алгоритм глобальной оптимизации, основанный на применении симплицальных интегральных гомологий и комбинаторной топологии.

В качестве локальных методов в DA и SHGO использовались алгоритмы COBYLA и Powell с методом проб с 1000 розыгрышей для каждого набора параметров. Данные о работе глобальных методов приведены в табл. 3². Оба алгоритма глобального поиска минимума работали с точностью в несколько процентов независимо от размеров решетки. При использовании локального метода COBYLA оба алгоритма требовали меньшее число вычислений значений энергии, чем при использовании метода

¹ OTS — оптимизация завершена успешно, MNI — достигнуто установленное максимальное число итераций, MNFEV — достигнуто установленное максимальное число оценок функции.

² nit — число итераций, выполненных глобальной процедурой, nfev — полное число оценок минимизируемой функции, включая число проб, nlfv — полное число оценок минимизируемой функции во всех локальных оптимизациях.

Таблица 2. Решетка 2D 5 × 5. Безградиентные локальные алгоритмы. Метод проб (число розыгрышей 1000). Библиотека `siStateVec`

Алгоритм	COVULA		Powell		Nelder - Mead	
	QAQA	Hadam	QAQA	Hadam	QAQA	Hadam
Message	OTS	MNFV	OTS	OTS	MNI	MNI
Success	True	False	True	True	False	False
Status	1	2	0	0	2	2
Energy	-2,099	-2,09992	-0,671400	-1,55344	-1,933880	-1,962080
Found parameters	1	0,000749	1	0,944272	1	0,098366
	2	0,115882	2	0,763932	2	0,108509
	3	0,498187	3	0,501018	3	0,434255
	4	1,000241	4	0,999987	4	0,997629
	5	1,500636	5	1,499212	5	1,499569
	6	0,510544	6	0,502560	6	0,526252
Iterations	78	100	2	1	100	100
Energy evals	78	100	211	103	246	251
%time						
CPU user	19,1 s	50 min 2 s	26,4 s	25 min 54 s	42,2 s	1 h 27 min 8 s
system	833 ms	1 min 23 s	1,29 s	43,7 s	2,05 s	2 min 26 s
total	19,9 s	51 min 25 s	27,7 s	26 min 38 s	44,3 s	1 h 29 min 34 s
Wall time	19,9 s	51 min 23 s	27,6 s	26 min 36 s	44,2 s	1 h 29 min 30 s
Memory (bytes)	131072	3932160	0	1835008	0	6946816

Таблица 3. Решетка 2D 5 × 5. Алгоритмы глобальной оптимизации. Метод проб (число розыгрышей 1000).
Библиотека cuStateVec

Алгоритм	Dual Appealing						SHGO								
	COBYLA			Powell			COBYLA			Powell					
	QAQA	Hadam	MNI	QAQA	MNI	True	Hadam	MNI	True	QAQA	Hadam	QAQA	Hadam	OTS	OTS
Message	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True	True
Status	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Energy	-2,0002	-2,096	-2,1	-2,0962	-2,0962	-2,0962	-2,09928	-2,09928	-2,09936	-2,1	-2,1	-2,1	-2,1	-2,1	-2,1
Found parameters	1 1,555391	1 0,509101	1 0,632514	1 1,445786	1 1,831316	1 1,831316	1 1,831316	1 1,831316	1 0,501524	1 1,391483	1 1,391483	1 1,391483	1 1,845436	1 1,845436	1 1,845436
	2 1,003154	2 1,001931	2 0,002278	2 0,999770	2 1,000001	2 1,000001	2 1,000001	2 1,000001	2 1,000473	2 0,998520	2 0,998520	2 0,998520	2 0,998777	2 0,998777	
	3 1,362840	3 0,383122	3 0,866808	3 0,548830	3 0,505912	3 0,505912	3 0,505912	3 0,505912	3 0,334165	3 0,491823	3 0,491823	3 0,491823	3 0,499068	3 0,499068	
	4 1,907185	4 1,982318	4 0,998734	4 0,425744	4 0,995913	4 0,995913	4 0,995913	4 0,995913	4 1,995031	4 0,993218	4 0,993218	4 0,993218	4 1,000652	4 1,000652	
	5 1,086174	5 1,108802	5 0,497939	5 0,074639	5 1,664350	5 1,664350	5 1,664350	5 1,664350	5 1,165023	5 0,117371	5 0,117371	5 0,117371	5 1,656350	5 1,656350	
	6 0,504553	6 0,505289	6 1,499174	6 1,092883	6 1,503048	6 1,503048	6 1,503048	6 1,503048	6 0,502360	6 0,505127	6 0,505127	6 0,505127	6 1,498985	6 1,498985	
Iterations, nit	100	100	100	100	100	100	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Evals of energy nfev/nifev	1342	1387	2439	3072	1105/487	1105/487	1105/487	1105/487	1146/528	4991/4372	4991/4372	4991/4372	3962/3343	3962/3343	3962/3343
Difference					618	618	618	618	618	619	619	619	619	619	619
%time															
CPU times	2 min 45 s	5 h 45 min 34 s	5 min	12 h 45 min 12 s	3 min 38 s	3 min 38 s	6 h 57 min 20 s	6 h 57 min 20 s	10 min 43 s	10 min 43 s	10 min 43 s	16 h 35 min 3 s			
user	7,97 s	9 min 40 s	14,6 s	21 min 24 s	9,7 s	9,7 s	11 min 41 s	11 min 41 s	30,1 s	30,1 s	30,1 s	27 min 49 s	27 min 49 s	27 min 49 s	27 min 49 s
system	2 min 53 s	5 h 55 min 15 s	5 min 15 s	13 h 6 min 37 s	3 min 48 s	3 min 48 s	7 h 9 min 2 s	7 h 9 min 2 s	11 min 13 s	11 min 13 s	11 min 13 s	17 h 2 min 53 s			
total	2 min 53 s	5 h 54 min 57 s	5 min 14 s	13 h 5 min 58 s	3 min 47 s	3 min 47 s	7 h 8 min 41 s	7 h 8 min 41 s	11 min 11 s	11 min 11 s	11 min 11 s	17 h 2 min 3 s	17 h 2 min 3 s	17 h 2 min 3 s	17 h 2 min 3 s
Wall time															
Memory (bytes)	262144	26738688	262144	58720256	224112640	224112640	252088320	252088320	29855744	29855744	29855744	104681472	104681472	104681472	104681472

Powell, что соответствует сравнению локальных алгоритмов самих по себе. Наибольшее количество вычислений энергии использовал алгоритм SHGO в сочетании с Powell, алгоритм DA в сочетании с COBYLA проводил вычислений примерно в три-четыре раза меньше. Число итераций и вычислений значений энергии не зависело от размеров решетки для всех алгоритмов. Для алгоритма DA в обоих локальных методах на одно вычисление энергии тратится почти столько же времени, сколько и при отдельном вычислении для обеих схем измерения энергии (QAOA и Hadm). В алгоритме SHGO при использовании COBYLA среднее время вычисления энергии в 1,5–2 раза выше, чем при отдельном вычислении для обеих схем измерения энергии. При использовании Powell это превышение порядка 10 процентов. Алгоритм SHGO приводит к приросту памяти в сотни мегабайт, тогда как DA дает прирост в сотни килобайт независимо от размера решетки. К достоинству алгоритма SHGO следует отнести то, что он выдает не один набор оптимальных параметров как DA, а несколько наборов, в которых значения функции наиболее близки к минимуму.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере модели Изинга в продольном магнитном поле проведено моделирование работы квантового аппроксимационного оптимизационного алгоритма QAOA [5] на симуляторе квантовых вычислений Cirq. Анзац волновой функции, построенный с помощью алгоритма QAOA был использован для поиска минимума энергии основного состояния различными методами оптимизации из библиотеки `scipy.optimize`.

Преимущество алгоритма QAOA перед другими вариационными алгоритмами состоит в том, что он настраивается на конкретную задачу с помощью движущего оператора, представляющего собой эволюционный оператор для гамильтониана рассматриваемой системы. Выбор модели Изинга основан на ее роли в исследовании спиновых систем не только в теории магнетизма, но и во всей статистической физике, а также квантовой теории поля на пространственно-временной решетке.

Показано, как представить конфигурацию спинов на пространственной решетке состоянием регистра квантового компьютера, а также как задать гамильтониан модели оператором, построенным из квантовых гейтов. Каждому спину (узлу решетки) соответствует один кубит. Поэтому рост числа спинов увеличивает размер регистра квантового компьютера и оператора Гамильтона линейно, тогда как размер представления соответствующего вектора состояния и матрицы оператора на классическом компьютере будет расти экспоненциально по числу спинов. С увеличением числа кубитов регистра приходится увеличивать число слоев анзаца QAOA для достижения хорошей аппроксимации вектора состояния с минимальной энергией.

Исследован ряд примеров с двух- и трехмерными решетками. Тест Адамара позволяет реализовать преимущества квантового компьютера в полной мере, поскольку средняя величина энергии находится измерением состояния лишь одного кубита (дополнительного кубита). Оптимизация

параметров проводилась как градиентными, так и безградиентными методами. Каждый тип методов имеет свои преимущества и недостатки. Градиентные методы считаются более точными, тогда как безградиентные — более устойчивыми, более простыми и требующими меньших вычислительных затрат. Для выбора начальных точек в процессе минимизации удобно использовать график значений энергии на сетке в некоторой области параметров. Такой график выявил большое число локальных минимумов, представляющих проблему для оптимизации. Это дает еще один довод в пользу безградиентных методов, способных не попадать в локальные минимумы при адекватном построении симплекса в пространстве параметров. Созданные в ходе исследования программы легко масштабируются для решеток любых размеров. Однако необходимо иметь в виду экспоненциальный рост требуемых вычислительных ресурсов для работы программ при увеличении размеров решеток.

Моделирование измерения состояний всех кубитов регистра (схема QAOA) требует больше компьютерной памяти, но меньшего времени расчета по сравнению с использованием теста Адамара (схема Hadamard), при котором измеряется лишь состояние одного дополнительного кубита.

Непосредственное использование вектора состояния для вычисления значения энергии в обеих схемах требует больше компьютерной памяти, чем вычисление методом проб. Время и затраты памяти в методе проб растут незначительно (несколько процентов) при увеличении числа проб на порядок. Однако очевидно, что для достижения точности, сравнимой с использованием вектора состояния, необходимо достаточно большое число проб.

Таким образом, выбор схемы измерения энергии и оптимизационных алгоритмов при моделировании работы квантового алгоритма QAOA зависит от целей исследования (например, проверка только лишь эффективности анзаца QAOA, или моделирование реальной работы квантового компьютера), располагаемых вычислительных ресурсов и времени.

Авторы выражают благодарность ведущему программисту ЛИТ ОИЯИ Д. В. Белякову и научному сотруднику ЛИТ ОИЯИ М. И. Зуеву за настройку программного окружения библиотеки Cirq и техническую поддержку процесса вычислений.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ГЕЙТ ZZ

Взаимодействие двух спинов в определении движущего оператора $U(\gamma, \mathcal{H})$ (1.5) в случае двух кубитов реализуется оператором поворота с вариационным параметром γ (углом поворота):

$$R_{ZZ}(\pi\gamma) \equiv \exp(-i\pi\gamma Z \otimes Z/2) = \begin{bmatrix} e^{-i\pi\gamma/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi\gamma/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi\gamma/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi\gamma/2} \end{bmatrix}, \quad (\text{П1.1})$$

который представляется на квантовых схемах так называемым гейтом ZZ . В библиотеке Cirq матрица этого гейта отличается от приведенной здесь на множитель $i = \sqrt{-1}$.

Мы можем построить гейт ZZ , используя стандартные для квантовых цепей гейты, например, двухкубитный оператор управляемого вращения на $\pi\gamma/2$ радиан вокруг оси z ,

$$\text{contr}R_\gamma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi\gamma/2} \end{bmatrix},$$

и однокубитный оператор Паули X ,

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Матричный элемент $e^{-i\pi\gamma/2}$ в операторе $\text{contr}R_\gamma^z$ перемещается в любую позицию на главной диагонали, используя оператор X . К примеру, с помощью комбинации

$$(\mathbb{I} \otimes X) \text{contr}R_\gamma^z (\mathbb{I} \otimes X) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi\gamma/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

экспонента переходит на предпоследнюю позицию. На рис. 11 представлена квантовая цепь, реализующая оператор спин-спинового взаимодействия (П1.1), полученная в таком подходе.

Другой вариант реализации оператора спин-спинового взаимодействия (П1.1) использует гейты $CNOT$ и $R_Z(\gamma)$ (рис. 12),

$$\begin{aligned} CNOT \cdot (\mathbb{I} \otimes R_Z(\gamma)) \cdot CNOT &= \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\pi\gamma/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi\gamma/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi\gamma/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi\gamma/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Важным свойством гейта ZZ является способность создавать запутанные состояния кубитов, которые дают решающее преимущество квантовым вычислениям перед классическими при изучении квантовых систем. Для двухчастичных систем (например, двух кубитов) запутанность численно

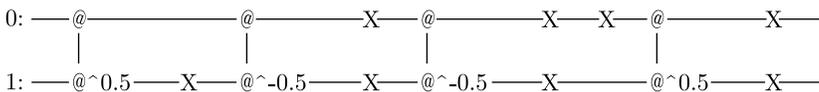


Рис. 11. Квантовая цепь для гейта ZZ (П1.1) при $\gamma = -1/2$, созданная средствами библиотеки Cirq [9]

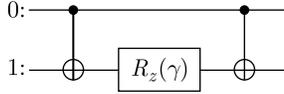


Рис. 12. Квантовая цепь для гейта ZZ (П1.1)

характеризуют величиной консиггенсе (конкуренция), указывающей, что в данном состоянии системы ее подсистемы (кубиты) находятся одновременно в различных собственных базисных состояниях. То есть собственные состояния как бы конкурируют.

Для нахождения консиггенсе рассмотрим состояние $|\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle$ двухкубитной системы, получаемое из равновзвешенной суперпозиции (1.4) при $n = 2$:

$$|\psi_0\rangle = H^{\otimes 2}|0\rangle^{\otimes 2} = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$$

действием оператора (П1.1)

$$\begin{aligned} |\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle &= R_{ZZ}(\pi\gamma) |\psi_0\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left(e^{-i\pi\gamma/2} |00\rangle + e^{i\pi\gamma/2} |01\rangle + e^{i\pi\gamma/2} |10\rangle + e^{-i\pi\gamma/2} |11\rangle \right). \end{aligned}$$

Матрица плотности для состояния $|\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle$

$$\rho(\gamma) = |\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle\langle\psi_{ZZ}(\gamma)| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{-i\pi\gamma} & 1 & 1 & e^{-i\pi\gamma} \\ 1 & e^{i\pi\gamma} & e^{i\pi\gamma} & 1 \\ 1 & e^{i\pi\gamma} & e^{i\pi\gamma} & 1 \\ e^{-i\pi\gamma} & 1 & 1 & e^{-i\pi\gamma} \end{pmatrix}$$

имеет нетривиальные недиагональные матричные элементы, благодаря которым она может быть отлична от тензорного произведения матриц плотности отдельных кубитов. Взяв частичный след по второму кубиту (часть В двухкубитной системы) мы получим матрицу плотности для первого кубита (часть А двухкубитной системы), зависящую от параметра γ :

$$\rho_A(\gamma) = \text{Tr}_B(\rho(\gamma)) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \pi\gamma & 1 \\ 1 & \cos \pi\gamma \end{pmatrix}.$$

Величина консиггенсе определена следующим образом [10]

$$c(|\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle) = \sqrt{2(1 - \text{Tr}(\rho_A^2(\gamma)))} = \sin \pi\gamma.$$

Чтобы проанализировать, когда оператор (П1.1), представляющий гейт ZZ, будет запутывать кубиты, определим его вид и найдем значения

$c(|\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle)$ при некоторых характерных значениях параметра γ :

γ	$R_{ZZ}(\pi\gamma)$	$c(\psi_{ZZ}(\gamma)\rangle)$
0	\mathbb{I}_4	0
1/2	see (П1.2)	$c_{\max} = 1$
1	$-iZ \otimes Z$	0

Заметим, что оператор сводится к тождественному оператору при значении $\gamma = 0$, а при $\gamma = 2$ — к тождественному оператору со знаком минус. При $\gamma = 1$ гейт ZZ есть с точностью до глобальной фазы тензорное произведение операторов Паули $Z \otimes Z$, действующих на каждый кубит независимо. Это значит, что при указанных значениях параметра γ гейт ZZ не является запутывающим, величина сцепленге равна 0. При всех других значениях γ гейт запутывает состояния кубитов, величина сцепленге отлична от 0. Максимальное запутывание достигается при значении $\gamma = 1/2$, когда оператор принимает вид

$$R_{ZZ}(\gamma = 1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 - i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{I}_4 - iZ \otimes Z), \quad (\text{П1.2})$$

а вектор состояния $|\psi_{ZZ}(\gamma = 1/2)\rangle$ двухкубитной системы может быть представлен в виде линейной комбинации двух состояний Белла $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ и $|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$,

$$|\psi_{ZZ}(\gamma = 1/2)\rangle = \frac{1}{2} [(1 - i)|\Phi^+\rangle + (1 + i)|\Psi^+\rangle].$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА И КОМПЬЮТЕР

При работе с библиотекой Cirq [9] для квантовых вычислений и их моделирования, написанной на языке Python, мы использовали также библиотеки NumPy и SymPy. В качестве интерфейса служил Jupyter Notebook. Компьютер работал под операционной системой Ubuntu 24.04, где была установлена утилита CUDA 12.4 для работы с графическим процессором. Для симуляции квантовых цепей мы использовали библиотеку qsim, интегрированную с Cirq и находящуюся на том же веб-сайте. Она написана на языке C++ и осуществляет многопоточные вычисления (multi-threading), используя технологию OpenMP. Для вычислений на графическом процессоре мы использовали библиотеку NVIDIA cuQuantum

SDK [11], включающий библиотеку cuStateVec, обеспечивающую высокую производительность при симуляции квантовых вычислений.

Тестирование проводилось на компьютере со следующей конфигурацией:

- 1) процессор AMD Ryzen 7 3700X, 8 ядер 3.6 GHz;
- 2) материнская плата GIGABYTE B450M DS3H, M2A-SSD-диск 512 Gb;
- 3) графическая карта NVIDIA® GeForce RTX™ 4070 Ti SUPER 16G VENTUS 2X OC, CUDA® CORES 8448 Units;
- 4) оперативная память DDR4, DIMM, 128 GB, 3.2 GHz.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3. СРАВНЕНИЕ ТРЕБУЕМЫХ РЕСУРСОВ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ

Размер вектора состояния регистра $\dim(\textit{state vector})$ в зависимости от числа кубитов n вычисляется по формуле

$$\dim(\textit{state vector}) = 2^n.$$

Так как переменная *state vector* имеет тип complex64 в библиотеке Cirq, то требуемый объем памяти для хранения ее значения на компьютере можно найти по формуле

$$\text{memory required} = 8 * 2^n \text{ bytes.}$$

К примеру, для двумерных решеток размеров 3×3 (число кубитов $n = 9$), 4×4 ($n = 16$), 5×5 ($n = 25$) размеры векторов состояния равны 512, 65536, 33554432, соответственно, а объемы памяти 4 KiB, 512 KiB, 256 MiB соответственно. Такие объемы не являются проблемой для современного компьютера. Требования к хранению унитарных (числовых) матриц U , соответствующих квантовым схемам, гораздо выше. Их размер определяется формулой

$$\dim(U) = 2^n \times 2^n = 2^{2n},$$

а соответствующие переменные имеют тип complex128 в библиотеке Cirq. Поэтому для тех же решеток 3×3 , 4×4 , 5×5 переменные U требуют 4 MiB, 64 GiB, 16 PiB памяти соответственно. В последнем случае цифра сопоставима с объемом памяти крупных суперкомпьютеров. Тем не менее, благодаря эффективным алгоритмам, Cirq позволяет моделировать на персональном компьютере квантовые вычисления для решеток, требующих порядка 30 кубитов в зависимости от располагаемых памяти и мощности компьютера.

В табл. 4 на примере двумерной решетки размера 5×5 дано сравнение времени и памяти на одно вычисление энергии при одном и том же наборе параметров для всех методов, использовавшихся в работе. Для измерения времени и памяти мы использовали утилиту psutil, а также «магические» команды IPython (magic commands) %memit и %timeit. Значение

Таблица 4. Затраты времени и памяти при вычислении энергии. Решетка 2D 5 × 5

Метод		Энергия	Команда %timeit	Команда %memit, MiB peak memory/increment	psutil RSS MiB
State Vector	CPU	QAOA	2,1639 s ± 3,0025 ms	2637,74/512,25	2125,49
		Hadam	8 min 46 s ± 509,19 ms	1867,91/1536,41	331,5
CUDA	CUDA	QAOA	550,18 ms ± 428,48 μs	2723,46 / 502,00	2221,46
		Hadam	5 min 9 s ± 988,13 ms	1962,49/1536,03	426,46
cuStateVec	cuStateVec	QAOA	558,16 ms ± 181,49 μs	2715,09/484,05	2231,09
		Hadam	5 min 16 s ± 1,0356 s	1973,46/1535,87	437,59
Sampling 1000 repetitions	CPU	QAOA	1,9769 s ± 3,8699 ms	2381,60/255,88	2125,72
		Hadam	4 min 20 s ± 237,63 ms	843,89/512,34	331,55
CUDA	CUDA	QAOA	4,1709 s ± 3,057 ms	2222,59/0,00	2222,59
		Hadam	8 min 57 s ± 206,07 ms	426,48/0,00	426,48
cuStateVec	cuStateVec	QAOA	127,31 ms ± 343,27 μs	2234,71/0,00	2234,71
		Hadam	15,225 s ± 138,85 μs	440,82/0,12	440,70

Таблица 5. Рост времени и памяти с увеличением числа проб. Решетка 2D 5 × 5, cuStateVec

Число проб	QAOA		Hadamard	
	1000	5000	1000	5000
Значение энергии	-1,6526	-1,651824	-1,650752	-1,651112
%timeit	127,31 ms ± 343,27 μs	149,19 ms ± 818,26 μs	175,57 ms ± 755,15 μs	15,225 s ± 1,0757 ms
%memit, MiB peak memory increment	2234,71 0,00	2235,83 0,00	440,82 0,12	441,70 0,12
psutil RSS, MiB	2234,71	2235,84	440,70	441,57
				10000
				-1,655332
				17,455 s
				± 2,4665 ms
				443,20
				0,00
				443,20

энергии находится более точно с использованием вектора состояния, но, как видно из табл. 5, при увеличении числа проб можно достигнуть сравнимой точности при незначительном увеличении времени и памяти, необходимых для вычисления. Как было отмечено в п. 3, все методы использованием теста Адамара (строки Hadam) занимают больше времени, чем при использовании просто схемы QAOA (строки QAOA). Однако достоинством методов Hadam служит то, что они гораздо более экономичны по памяти, особенно при использовании метода проб. На основе данных табл. 4 можно коротко охарактеризовать исследованные методы в случае схем с большим числом кубитов следующим образом:

- 1) QAOA–State Vector — точный, малое время, большой объем RAM;
- 2) QAOA–Sampling — менее точный, самое малое время, меньший объем RAM;
- 3) Hadamard–State Vector — точный, самое большое время, небольшой объем RAM;
- 4) Hadamard–Sampling — менее точный, большое время, наименьший объем RAM.

Сравнивая вычисления на центральном процессоре CPU и графическом процессоре GPU (с использованием платформы CUDA и библиотеки cuStateVec), следует выделить эффективность библиотеки cuStateVec. При всех методах вычисления энергии этот выигрывает по затратам как времени, так и памяти, и, кроме того, по точности, как было замечено по всей совокупности расчетов. Платформа CUDA столь же эффективна для расчетов с вектором состояния, однако сильно уступает двум другим технологиям при использовании метода проб.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Jordan S. P., Lee K. S. M., Preskill J.* Quantum Algorithms for Quantum Field Theories // *Science* 336. 2012. V. 336. P. 1130–1133.
2. *Abhijith J. et al.* Quantum Algorithm Implementations for Beginners. arXiv:1804.03719v2 [csET].
3. *Bharti K. et al.* Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) Algorithms // *Rev. Mod. Phys.* 2022. V. 94. P. 015004 (69 pages); arXiv:2101.08448v2 [quant-ph].
4. *Hidary J. D.* Quantum Computing: An Applied Approach. 2nd ed. Springer Nature Switzerland AG, 2021.
5. *Farhi E., Goldstone J., Gutmann S.* A Quantum Approximate Optimization Algorithm. arXiv:1411.4028 [hep-th].
6. *Lotshaw Ph. C. et al.* Simulations of Frustrated Ising Hamiltonians using Quantum Approximate Optimization // *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A.* 2022. V. 381. P. 2241, 20210414; arXiv:2206.05343 [quant-ph].
7. *Ozaeta A., van Dam W., McMahon P. L.* Expectation Values from the Single-Layer Quantum Approximate Optimization Algorithm on Ising Problems // *Quantum Sci. Technol.* 2022. V. 7. P. 045036; arXiv:2206.05343 [quant-ph].

8. *Pagano G. et al.* Quantum Approximate Optimization of the Long-Range Ising Model with a Trapped-Ion Quantum Simulator // Proc. Nat. Acad. Sci. 2020. V. 117. P. 41 25396–25401; arXiv:1906.02700v2 [quant-ph].
9. *Google Quantum AI/Software/Cirq/Experiments/QAOA.* Quantum Approximate Optimization Algorithm for the Ising Model. https://quantumai.google/cirq/experiments/qaoa/qaoa_ising.
10. *Bengtsson I., Życzkowski K.* Geometry of Quantum States. Introduction to Quantum Entanglement. Second edition. Cambridge University Press, 2017.
11. *Bayraktar H. et al.* NVIDIA cuQuantum SDK, Accelerate quantum computing research. arXiv:2308.01999v1 [quant-ph] 2023.

Получено 27 ноября 2024 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 15.01.2025.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 2,00. Уч.-изд. л. 2,16. Тираж 105 экз. Заказ № 61017.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/