

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ АЛГОРИТМА QAOA НА КВАНТОВОМ ПОЛИГОНЕ ОИЯИ

Ю. Палий^{1,2,*}, Д. В. Беляков¹, А. А. Боголюбская¹,
М. И. Зуев¹, Д. А. Янович¹

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Институт прикладной физики, Молдавский государственный университет,
Кишинев, Республика Молдова

Проведено моделирование работы алгоритма квантовой аппроксимации для задачи оптимизации (QAOA) на симуляторе квантовых вычислений Cirq, установленном на квантовом полигоне HybriLIT ОИЯИ. Решена задача поиска состояния с наименьшей энергией для модели Изинга с продольным магнитным полем для двух- и трехмерных решеток различных размеров. В ходе работы были исследованы квантовые схемы с регистром до 27 кубитов. Оптимизация параметров вариационного анзаца проводилась как градиентным методом, так и безградиентными. Процессы и результаты оптимизации сравнивались по ряду параметров. Показана зависимость эффективности проведения расчетов от конфигурации используемых вычислительных ресурсов.

Simulation of the Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) was performed using the Cirq software library installed on the HybriLIT quantum computing testbed at JINR. The problem of finding the lowest energy state for the Ising model with a longitudinal magnetic field was solved for two- and three-dimensional lattices of various sizes. Quantum circuits with registers of up to 27 qubits were investigated during the study. Optimization of the variational ansatz parameters was carried out using both gradient-based and gradient-free methods. The processes and results of optimization performed by different methods were compared based on a number of parameters. The dependence of the efficiency of calculations on the configuration of the computing resources used was demonstrated.

PACS: 44.25.+f; 44.90.+c

ВВЕДЕНИЕ

Квантовые компьютеры эпохи NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum era) [1] пока несовершенны. Они ограничены по числу кубитов и их связности, обладают высоким уровнем зашумленности и малой масштабируемостью, требуют высоких накладных расходов при коррекции

* E-mail: palii@jinr.ru

ошибок. Однако так называемая гибридная концепция, доминирующая сегодня в реализации квантовых вычислений, позволяет решать практические задачи на уже существующих квантовых системах [2].

Гибридные алгоритмы комбинируют вычисления на классических и квантовых компьютерах, используя преимущества каждой из этих двух технологий. Квантовый компьютер, обеспечивающий квантовое моделирование, эффективно решает вычислительно сложные для классического компьютера подзадачи с помощью квантовых алгоритмов. Классический компьютер помогает преодолеть ограничения, присущие NISQ-системам. Гибридный подход оказался успешным и для решения, в частности, задач оптимизации. Используемый в данной работе алгоритм квантовой аппроксимации для задачи оптимизации QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) [3] относится к числу наиболее обсуждаемых вариационных квантовых алгоритмов VQA (Variational Quantum Algorithm) [4]. В них квантовый компьютер используется исключительно для построения волновой функции моделируемой системы и измерения ее наблюдаемых величин. Классический компьютер оптимизирует параметры квантовых вентилей для достижения нужного значения функции стоимости (целевой функции), определяемой на основе измерений квантового компьютера [5].

Общая схема работы VQA представлена на рис. 1. VQA основаны на вариационном принципе Рэля–Ритца из квантовой механики: для любой пробной волновой функции $|\psi(\alpha)\rangle$ с параметрами $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ среднее значение гамильтониана не меньше энергии основного состояния: $\langle\psi(\alpha)|\mathcal{H}|\psi(\alpha)\rangle \geq E_0$. Нахождение энергии основного состояния и соответствующего вектора состояния — ключевая задача для квантовых систем. Отметим, в частности, что для модели Изинга эта вычислительная задача относится к классу сложности NP.

Далее покажем, как нами решалась задача поиска состояния с наименьшей энергией для модели Изинга в продольном магнитном поле с использованием QAOA для двух- и трехмерных решеток различных размеров на симуляторе квантовых вычислений Cirq [6]. Пока квантовые

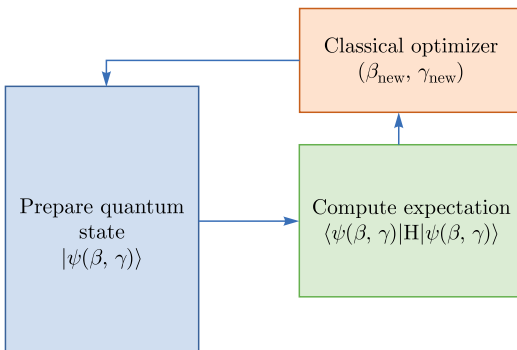


Рис. 1. Общая схема (цикл работы) вариационного квантового алгоритма для квантового состояния с параметрами β и γ

компьютеры не доступны для широкого использования, в гибридные схемы включаются программные симуляторы (или эмуляторы) квантовых вычислений [7], которые обычно реализуются в виде библиотек (фреймворков) для различных языков программирования, в том числе на современных многофункциональных вычислительных системах. Так, в 2023 г. на гетерогенной платформе HybriLIT ОИЯИ [8], обеспечивающей высокопроизводительные и параллельные вычисления, был организован полигон для квантовых вычислений.

О ПОЛИГОНЕ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ HybriLIT

Полигон поддерживает два режима доступа: batch-режим через менеджер ресурсов SLURM и интерактивный режим — для выполнения расчетов с использованием Jupyter notebooks. Веб-интерфейсом в этом случае является JupyterLab — многопользовательская версия Jupyter. Для работы с симуляторами выделен отдельный сервер (с установленным дистрибутивом Anaconda и JupyterLab) со следующими характеристиками: $2 \times$ CPU AMD EPYC 7763 (64 Cores @ 2.45 GHz), 1.94 TB RAM, $8 \times$ GPU NVIDIA Tesla A100 SXM4 80 GB HBM2, что позволяет проводить параллельные вычисления на CPU и GPU. Симуляторы квантовых вычислений, реализованные в виде программных библиотек или фреймворков, установлены в отдельных виртуальных окружениях Python, что исключает конфликты версий библиотек.

При выборе симулятора открывается Jupyter Notebook с настроенными библиотеками и переменными окружения (рис. 2). Значимым преимуществом работы в Jupyter Notebook является возможность интерактивно разрабатывать алгоритмы и визуализировать квантовые схемы, располагая доступом к обширным материалам и ресурсам экосистемы

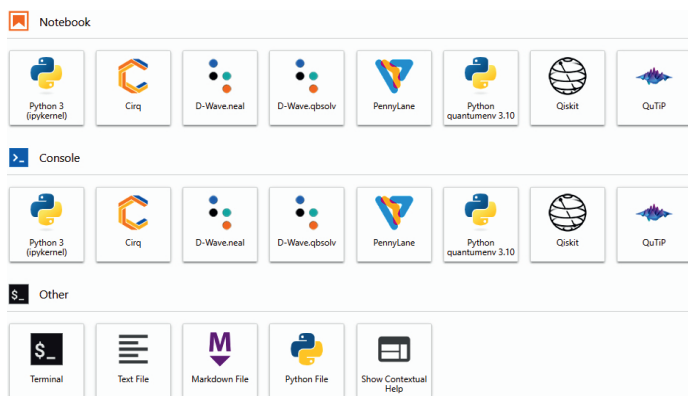


Рис. 2. Начало работы на полигоне. Выбор квантового симулятора (<http://hlit.jinr.ru/quantumpolygon/>)

Python и поддержкой open-source сообщества. В настоящее время на полигоне установлены следующие симуляторы квантовых вычислений: Cirq, Qiskit, D-Wave Neal, D-Wave qbsolv, PennyLane, QuTiP. В ходе работы нами были исследованы возможности симуляторов Cirq (Google quantum AI) [6] и qsim [9].

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КВАНТОВОМ КОМПЬЮТЕРЕ. ПОСТРОЕНИЕ АНЗАЦА QAOA И КВАНТОВОЙ СХЕМЫ

Представление модели Изинга на квантовом компьютере подробно рассмотрено в нашей работе [11]. При составлении квантовой вычислительной схемы, реализующей алгоритм QAOA, каждому узлу решетки ставится в соответствие кубит регистра квантового компьютера. Произвольное распределение спинов в узлах решетки задается набором битовых переменных $z = z_1 z_2 \dots z_n$, где каждая переменная z_i определяет ориентацию спина в i -м узле и принимает значения $z_i = \pm 1$, соответствующие квантовым состояниям $|0\rangle$ и $|1\rangle$: $|0\rangle \leftrightarrow z_i = +1$, $|1\rangle \leftrightarrow z_i = -1$.

Состояние $|\psi\rangle$ квантового регистра представляет суперпозицию всех возможных ориентаций спинов на решетке с различными амплитудами. Гамильтониан \mathcal{H} рассматриваемой модели Изинга, учитывающий спин-спиновое взаимодействие ближайших соседей с константой J и взаимодействие спинов с внешним магнитным полем h , записывается в виде

$$\mathcal{H}(Z) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} Z^{(i)} Z^{(j)} - h \sum_i Z^{(i)}, \quad (11)$$

где $\langle i, j \rangle$ обозначает множество пар соседних спинов, а суммирование во втором слагаемом проводится по всем узлам решетки.

Многокубитные операторы $Z^{(i)}$ являются тензорными произведениями вида $Z^{(i)} = \mathbb{I} \otimes \dots \otimes Z \otimes \dots \otimes \mathbb{I}$, где оператор Z , представляющий собой строку Паули, стоит на i -м месте, т.е. действует на i -й кубит.

Общий вариационный анзац QAOA волновой функции $|\psi(\gamma, \beta)\rangle$ для этой модели, включающий p слоев, задается выражением

$$|\psi(\gamma, \beta)\rangle = \underbrace{U(\beta_p, B)U(\gamma_p, \mathcal{H})}_{\text{слой } p} \dots \underbrace{U(\beta_1, B)U(\gamma_1, \mathcal{H})}_{\text{слой } 1} 1H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n}. \quad (12)$$

Здесь буква H традиционно обозначает оператор Адамара, γ и β — вариационные параметры. Количество используемых в анзаце слоев p определяется сложностью задачи. Квантовая схема, соответствующая анзацу 12, представлена на рис. 3.

В каждый слой входят по два унитарных оператора: 1) оператор изменения фазы (driver) $U_k(\gamma_k, \mathcal{H}) = e^{i\pi\gamma_k\mathcal{H}}$; 2) оператор смешивания кубитов (mixer) $U_k(\beta_k, B) = e^{i\pi\beta_k B}$, где $B = \sum_{j=1}^n X^{(j)}$. Оба оператора зависят от

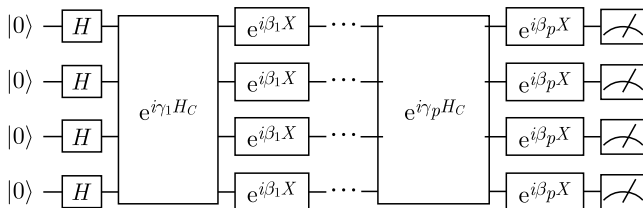


Рис. 3. Многослойная квантовая схема для анзаца QAOA (12). Спиновая решетка 2×2 , 4 кубита. Здесь H_C — оператор гамильтониана, определяющий функцию стоимости в вариационном процессе минимизации

вариационных параметров γ_k , β_k , $k = 1, \dots, p$. Здесь X — операторы Паули, действующие на каждый из кубитов.

Операторы $U_k(\gamma_k, \mathcal{H})$ и $U_k(\beta_k, B)$ поочередно применяются p раз, далее проводятся измерение финального состояния в Z -базисе и вычисление $E_p(\gamma, \beta)$. В зависимости от размерности решетки анзацу $|\psi(\gamma, \beta)\rangle$ соответствуют квантовые схемы различной степени сложности.

Нашей задачей было найти состояние с наименьшей энергией для гамильтониана (11). Из теоремы, доказанной в работе [3], следует, что при увеличении числа слоев минимальное среднее $E_p(\gamma, \beta)$ гамильтониана \mathcal{H} , найденное с помощью алгоритма QAOA, стремится к энергии основного состояния системы — минимальному значению $\min_z \mathcal{H}(z)$ среди всех возможных спиновых конфигураций z решетки: $\lim_{p \rightarrow \infty} \min_{\gamma, \beta} E_p(\gamma, \beta) = \min_z \mathcal{H}(z)$, $E_p(\gamma, \beta) \equiv \langle \psi(\gamma, \beta) | \mathcal{H} | \psi(\gamma, \beta) \rangle$. В реальности число слоев p конечно, поэтому алгоритм является приближенным (аппроксимационным).

НАХОЖДЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И МИНИМИЗАЦИЯ С ПОМОЩЬЮ АЛГОРИТМА QAOA. ОПТИМИЗАЦИЯ

Для определения энергии основного состояния нами использовались [15] следующие методы: метод, основанный на непосредственном применении вектора состояния, и метод проб (Sampling). Кроме того, для эффективного измерения средней величины энергии был применен тест Адамара. Рассмотрим первый способ моделирования работы QAOA на примере решетки 2×2 для квантовой схемы с однослойным анзацем (12) и гамильтонианом (11). Четыре кубита квантовой схемы соответствуют четырем спинам в узлах решетки. На рис. 4, а представлен рельеф оптимизируемого функционала энергии $E_1(\gamma, \beta)$ на двумерной сетке с шагом $1/100$ в области параметров $0 \leq \{\gamma, \beta\} \leq 2$. Минимум энергии $E_1(\gamma, \beta)$ достигается при значениях параметров $\gamma_{\min} = 1,0$, $\beta_{\min} = 0,5$.

В работе [11] для минимизации энергии $E_1(\gamma, \beta)$ в пространстве двух параметров γ и β мы использовали оптимизацию с помощью

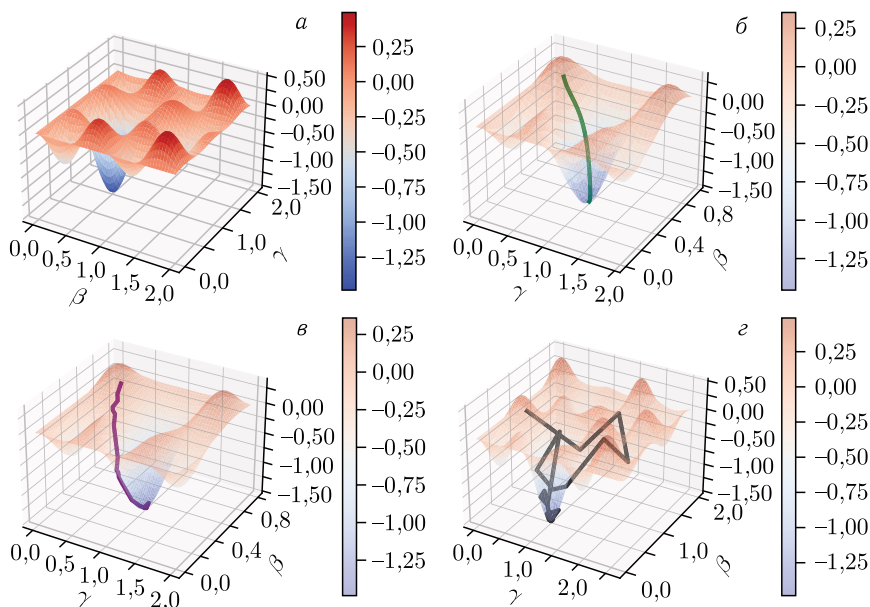


Рис. 4. а) Рельеф функционала энергии в зависимости от параметров β и γ . Траектории минимизации при использовании разных методов: б) градиентного спуска; в) метода Нелдера–Мида; з) метода COBYLA

метода градиентного спуска. В настоящей работе мы обратились также к безградиентным оптимизационным методам (методу Нелдера–Мида (Nelder–Mead, 1965) и методу COBYLA (Powell, 1994)). Для сравнения на рис. 4, б–з приводятся траектории, иллюстрирующие процесс минимизации функционала энергии разными методами.

Все траектории стартуют из начальной точки $(\gamma_0, \beta_0) = (0,4; 0,7)$, расположенной вблизи локального максимума, и сходятся в точке минимума $(\gamma_{\min}, \beta_{\min})$ за 100 шагов с практически одинаковой погрешностью, не превышающей 1%. Отметим, что безградиентные методы позволили быстрее достичь результат с одинаковой фиксированной точностью благодаря меньшему объему вычислений на квантовом компьютере (или симуляторе). Так, метод COBYLA позволяет достичь точность нахождения минимума энергии 10^{-8} за 40 квантовых вызовов, метод Нелдера–Мида — за 90, а метод градиентного спуска — за 1800.

Важно подчеркнуть, что в гибридных квантово-классических методах оптимизации, таких как VQA, минимизация количества квантовых вызовов критически важна. Ограниченное время когерентности кубитов и высокая вероятность ошибок в NISQ-устройствах делают многократные вызовы вычислений дорогостоящими и менее надежными. А значительные накладные расходы на квантово-классическую коммуникацию могут су-

щественно замедлить общий процесс оптимизации, особенно при ограниченных квантовых ресурсах [12]. Оптимизация числа квантовых вызовов может способствовать более эффективному использованию квантовых устройств и ускорению процесса поиска решений [1, 13].

Задача поиска состояния с наименьшей энергией для модели Изинга с продольным магнитным полем была решена нами для двух- и трехмерных решеток различных размеров. Подробные сравнения результатов для различных методов вычисления энергии, решеточных и рассчитанных конфигураций приводятся в работе [15].

О СОЗДАНИИ ОПТИМАЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Изначально задача решалась на квантовом полигоне в интерактивном режиме с использованием симулятора Cirq [6] — библиотеки Python для моделирования квантовых схем до 30 кубитов. Однако с увеличением размерности решетки сложность задачи растет экспоненциально: размер регистра квантового компьютера увеличивается как 2^n , где n — число узлов решетки, а сложность оператора квантовой схемы QAOA — как 2^{2n} . Это требует значительных ресурсов оперативной памяти, а также высокой производительности CPU и GPU. Уже для решетки размером $3 \times 3 \times 3$ мы вынуждены были подключить симулятор qsim, интегрированный с Cirq. Он написан на языке C++, использует SIMD для векторизации, OpenMP для многопоточности на CPU и поддерживает вычисления на GPU, включая библиотеку cuStateVec [10], что позволяет моделировать схемы до 40 кубитов. Наши расчеты [14] показали, что благодаря использованию библиотеки cuStateVec на GPU A100 квантового полигона время вычисления тестовой функции энергии (по сравнению с расчетом на мощном оптимизированном ПК) было сокращено с 3 сут до 14 мин.

Примеры ускорения работы программы вычисления энергии в режиме с cuStateVec (по сравнению с режимом использования только CUDA) как для ПК, так и для квантового полигона приведены в таблице. Обозначе-

Затраты времени при вычислении энергии методом проб для различных режимов работы компьютера. Решетка 2D размером 5×5

Режим	Метод	ПК	HybriLIT
CPU	QAOA	$1,9769 \text{ с} \pm 3,8699 \text{ мс}$	$2,4006 \text{ с} \pm 26,578 \text{ мс}$
	Hadam	$4 \text{ мин } 20 \text{ с} \pm 237,63 \text{ мс}$	$1 \text{ мин } 50 \text{ с} \pm 1,6107 \text{ с}$
CUDA	QAOA	$4,1709 \text{ с} \pm 3,057 \text{ мс}$	$4,6352 \text{ с} \pm 1,1876 \text{ мс}$
	Hadam	$8 \text{ мин } 57 \text{ с} \pm 206,07 \text{ мс}$	$10 \text{ мин} \pm 9,6895 \text{ мс}$
cuStateVec	QAOA	$127,31 \text{ мс} \pm 343,27 \text{ мкс}$	$57,172 \text{ мс} \pm 581,1 \text{ с}$
	Hadam	$15,225 \text{ с} \pm 138,85 \text{ мкс}$	$6,3083 \text{ с} \pm 4,2444 \text{ мс}$

ние «Hadam» относится к методам вычисления энергии с применением теста Адамара, а «QAOA» — к методам без его использования.

Таким образом, возможности квантового полигона HybriLIT позволили организовать оптимальную вычислительную конфигурацию для успешного моделирования работы QAOA и решения задачи поиска состояния с наименьшей энергией в модели Изинга с продольным магнитным полем для двух- и трехмерных решеток различных размеров и квантовых схем до 27 кубитов. Показано, что включение библиотеки cuStateVec в схему Cirq+qsim существенно повысило эффективность вычислений. Подтверждено, что тест Адамара позволяет реализовать преимущества квантового компьютера в полной мере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Preskill J.* Quantum Computing in the NISQ Era and Beyond // *Quantum*. 2018. V. 2. P. 79; arXiv:1801.00862v3 [quant-ph].
2. *Shaydulin R., Ushijima-Mwesigwa H., Negre C. F., Safo I., Mniszewski S. M., Alexeev Y.* A Hybrid Approach for Solving Optimization Problems on Small Quantum Computers // *IEEE Comput.* 2019. V. 52, No. 6. P. 18–26.
3. *Farhi E., Goldstone J., Gutmann S.* A Quantum Approximate Optimization Algorithm. arXiv:1411.4028 [quant-ph]. 2014.
4. *Grange C., Poss M., Bourreau E.* An Introduction to Variational Quantum Algorithms for Combinatorial Optimization Problems // *4OR*. 2023. V. 21. P. 363–403; arXiv:2212.11734 [math.OC].
5. *Hidary J. D.* Quantum Computing: An Applied Approach. 2nd ed. Springer Nature Switzerland AG, 2021.
6. Cirq, Experiments: QAOA. Quantum Approximate Optimization Algorithm for the Ising Model // Google Quantum AI. Software. https://quantumai.google/cirq/experiments/qaoa/qaoa_ising.
7. *Jamadagni A., Läuchli A. M., Hempel C.* Benchmarking Quantum Computer Simulation Software Packages: State Vector Simulators. arXiv:2401.09076v2 [quant-ph]. 2024.
8. Гетерогенная платформа «HybriLIT». <http://hlit.jinr.ru> (дата обращения: 20.12.2024).
9. Quantum AI Team and Collaborators. qsim. 2020. <https://github.com/quantumlib/qsim> (дата обращения: 20.12.2024).
10. cuStateVec: A High-Performance Library for State Vector Quantum Simulators. <https://docs.nvidia.com/cuda/cuquantum/latest/custatevec> (дата обращения: 20.12.2024).
11. *Palii Yu., Bogolubskaya A., Yanovich D.* Quantum Approximation Optimization Algorithm for the Ising Model in an External Magnetic Field // *Phys. Part. Nucl.* 2024. V. 55, No. 3. P. 600–602.
12. *Jones N. C. et al.* Layered Architecture for Quantum Computing // *Phys. Rev. X*. 2012. V. 2, No. 3. P. 031007.
13. *Mohammad I. A., Pivoluska M., Plesch M.* Meta-Optimization of Resources on Quantum Computers // *Sci. Rep.* 2024. V. 14, No. 1. P. 10312.

14. Беляков Д. В., Боголюбская А. А., Зуев М. И., Палий Ю. Г., Подгайный Д. В., Стрельцова О. И., Янович Д. А. Полигон для квантовых вычислений на гетерогенной платформе HybriLIT // Материалы Междунар. конф. «Информационные технологии и математические методы» (ITTMM-2024). 2024. С. 303;
<https://events.rudn.ru/event/236/attachments/743/1861/ittmm-2024.pdf>.
15. Палий Ю. Г., Боголюбская А. А., Янович Д. А. Моделирование работы алгоритма QAOA на симуляторе квантовых вычислений Cirq. Препринт ОИЯИ Р11-2024-57. Дубна, 2024.