

АННОТАЦИЯ

Цель работы — разработать вариационный квантовый алгоритм для задачи коммивояжёра. Полученные результаты ??? Рекомендации на основе данной работы ??

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 Классические подходы	5
1.1 Постановка задачи коммивояжёра	5
1.2 Алгоритм Хелда-Карпа	5
2 Разработанный алгоритм	7
2.1 Представление маршрутов на квантовом компьютере	7
2.2 Квантовая цепь	10
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	12

ВВЕДЕНИЕ

Квантовый компьютер манипулирует кубитами. Состоящие из кубитов компьютерные регистры могут находиться в суперпозиции нескольких состояний. Когда квантовый компьютер производит вычисление над суперпозицией, он производит вычисление над всеми состояниями одновременно. Это делает квантовые компьютеры привлекательными для задач, в которых требуется перебор большого числа вариантов.

В этой работе мы попытаемся решить задачу коммивояжёра.

Будем искать решение в классе вариационных квантовых алгоритмов. В них квантовый компьютер запускается снова и снова с небольшими изменениями в параметрах квантовой цепи. Процессом варьирования управляет классический компьютер. Его задача — подобрать параметры цепи такие, чтобы на выходе получалось оптимальное по некоторому заданному критерию состояние.

Уже разработаны вариационные квантовые алгоритмы для задач из нескольких разных областей. Среди них — алгоритмы поиска собственных значений матрицы, максимального разреза графа и другие. Они позволяют решать задачи на существующих квантовых компьютерах — подверженных шумам и оперирующим малым числом кубитов.

Для задачи коммивояжёра, которой посвящена данная работа, эффективного квантового алгоритма пока не существует.

Особенностью этой задачи является наличие ограничений: например, коммивояжёр не может посетить один город дважды. Традиционно ограничения в вариационных квантовых алгоритмах реализуются через дополнительные штрафные слагаемые к оптимизируемой величине. Но мы вместо этого попробуем добиться того, чтобы состояние, не удовлетворяющее ограничениям, в принципе невозможно было измерить.

Такая реализация ограничений задачи непосредственно через саму квантовую цепь — главное направление этой работы, в этом заключается её новизна и возможная научная значимость.

Настоящие квантовые компьютеры всё ещё не широко доступны, поэтому мы тестируем алгоритм с помощью компьютерной симуляции. Для этого мы используем `cirq` — библиотеку для Python от Google Quantum AI.

1 Классические подходы

1.1 Постановка задачи коммивояжёра

В задаче коммивояжёра есть n городов, соединённых друг с другом, и требуется найти кратчайший маршрут, проходящий через все города по одному разу.

Существует несколько вариаций задачи. Маршрут может быть замкнутым или незамкнутым, расстояния между городами могут подчиняться или не подчиняться неравенству треугольника; граф городов может быть полным или неполным, ориентированным или неориентированным. Все эти разновидности можно свести друг к другу, поэтому мы можем выбрать ту формулировку, которая кажется наиболее удобной.

Итак, пусть каждый город соединён с каждым (т.е. граф городов полный), пусть мы ищем незамкнутый маршрут и пусть граф городов ориентированный. Ориентированность означает, что условная длина (или стоимость) пути из города A в город B не обязательно равна стоимости пути из B в A .

Введём обозначение

l_{ij} — длина пути из i -того города в j -тый

Ответом на задачу служит последовательность городов. Есть n способов выбрать первый город, $n - 1$ способ выбрать второй и так далее — всего $n!$ возможных ответов. Если бы мы выбрали другую формулировку задачи, то пришлось бы, например, учитывать, что в замкнутом пути начальную точку можно выбрать несколькими способами.

Простейший алгоритм — перебрать все возможные перестановки — будет иметь сложность $O(n!)$ по времени и $O(1)$ по памяти.

1.2 Алгоритм Хелда-Карпа

Альтернативой является алгоритм Хелда-Карпа, который имеет сложность $O(n^2 2^n)$ по времени и $O(n 2^n)$ по памяти. Это лучший классический алгоритм из тех, которые гарантированно приходят к точному решению.¹ Рассмотрим его подробнее, чтобы лучше понять, с чем мы соревнуемся.

¹Ещё есть эвристические приближённые алгоритмы

Для нашей постановки задачи алгоритм выглядит следующим образом:

- 1) Создаётся мнимый нулевой город, связанный со всеми остальными городами дорогами длины 0.
- 2) Определяется рекурсивная функция $g(S, e)$, возвращающая длину наименьшего пути, начинающегося в городе 0, проходящего через каждый город некоторого подмножества городов S и заканчивающегося в городе $e \notin S$.
- 3) Эта функция вычисляется следующим образом:

$$g(S, e) = \min_{e' \in S} \{g(S \setminus e', e') + l_{e'e}\}$$

(через перебор всех возможных вариантов для предпоследнего города e')

4) Существует 2^n возможных множеств S . Если последовательно вычислять $g(S, e)$ от меньших множеств к большим, перебирая все $e \notin S$, то мы сможем использовать уже вычисленные значения g , и «входить в рекурсию» не потребуется. Функция g будет вызвана $O(n2^n)$ раз, и на хранение результатов потребуется $O(n2^n)$ памяти.

5) При каждом вызове функции $g(S, e)$ происходит перебор $O(n)$ возможных предпоследних вершин e' , поэтому сложность функции g — $O(n)$, а сложность алгоритма в целом — $O(n^2 2^n)$.

6) В конце вычисляется $g(S_{\text{all}}, 0)$, где S_{all} — множество всех городов. Это и будет длиной искомого минимального пути.

7) Можно восстановить и сам оптимальный путь, а не только его длину, если в ходе решения помимо промежуточных значений функции $g(S, e)$ сохранять номера оптимальных предпоследних вершин e' . Это не повлияет на асимптотику алгоритма.

Алгоритм Хелда-Карпа работает быстрее, чем простой перебор, но требует экспоненциально много памяти.

2 Разработанный алгоритм

На рисунке 2.1 приведена общая схема нашего алгоритма. В начале некоторыми практически произвольными параметрическими гейтами создаётся суперпозиция нескольких возможных маршрутов. Затем кубиты измеряются. Это происходит несколько раз, и на классическом компьютере вычисляется средняя стоимость маршрута.

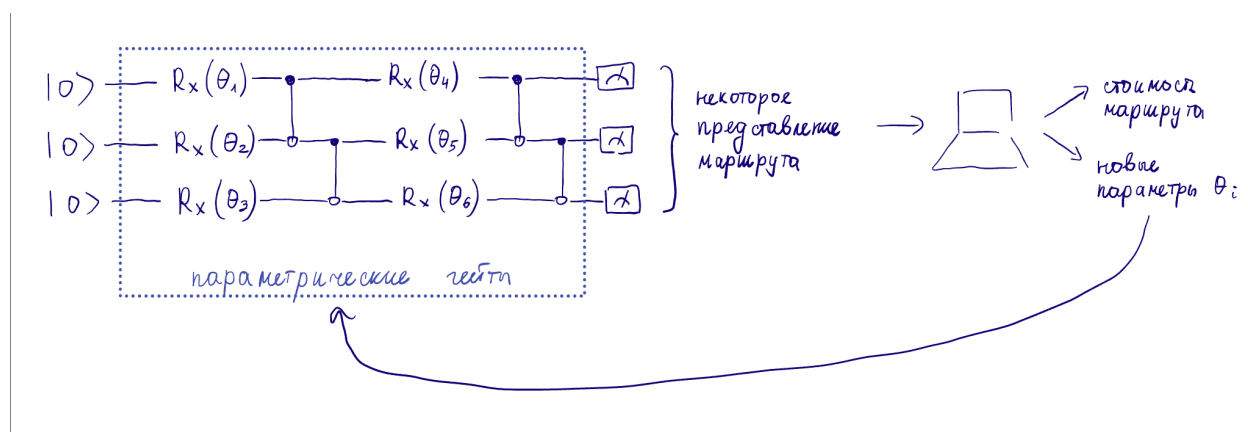


Рисунок 2.1 — Общая схема нашего алгоритма

Основываясь на средней стоимости, мы обновляем параметрические гейты и запускаем цепь заново в надежде, что средняя стоимость уменьшится. Здесь мы можем следовать любому численному алгоритму нахождения минимума функции. Лучше всего себя показал алгоритм Rotosolve [1], который опирается на то, что все квантовые гейты — унитарные, и, следовательно, функция $\langle \text{cost} \rangle = f(\theta_1, \theta_2 \dots)$ (зависимость средней стоимости от параметров гейтов) не совсем произвольная.

Рассмотрим теперь детали разработанного нами алгоритма.

2.1 Представление маршрутов на квантовом компьютере

Коротко: все возможные маршруты можно занумеровать в лексикографическом порядке. Этот номер кодируется на квантовом компьютере, для чего требуется $\lceil \log_2 n! \rceil$ кубитов. В конце схемы кубиты измеряются, и на классическом компьютере номер маршрута переводится в факториальную систему счисления, затем вычисляется сам маршрут и его стоимость.

Подробно:

Мы выбрали вариант задачи коммивояжёра, в котором требуется найти незамкнутый маршрут в полном ориентированном графе. Корректным марш-

рутом является любая последовательность посещённых городов, в которой каждый город встречается по одному разу — то есть любая из $n!$ перестановок городов. В нашей формулировке задачи между маршрутами и перестановками есть взаимно однозначное соответствие; мы можем использовать эти слова как синонимы.

Присвоим городам номера от 0 до $n - 1$.

Перестановки можно строить с помощью дерева (рис. 2.2): в начале мы выбираем первый город из n вариантов, затем с каждым следующим городом количество ветвей уменьшается на 1. Ветви у каждого узла расположены по возрастанию. Перестановки, соответствующие листьям дерева, будут расположены тогда в лексикографическом порядке.

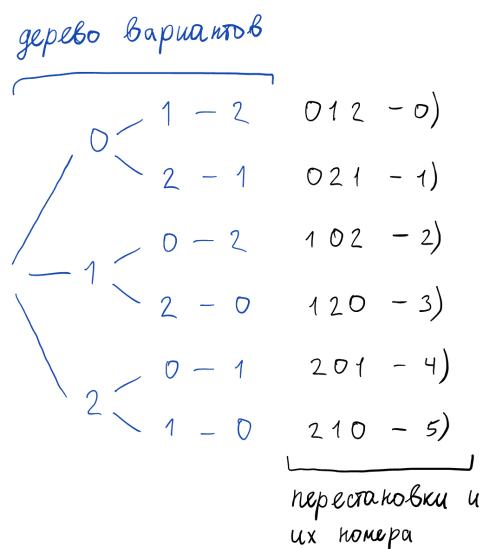


Рисунок 2.2 — Все возможные маршруты для случая трёх городов в лексикографическом (т.е. «алфавитном») порядке.

Поскольку перестановки теперь упорядочены, мы можем их пронумеровать. Номер перестановки удобно записывать в факториальной системе счисления, поскольку эта система отражает структуру дерева вариантов.

Обсудим факториальную систему счисления. В этой системе последняя цифра должна быть из множества $\{0, 1\}$, вторая с конца — из $\{0, 1, 2\}$, третья — из $\{0, 1, 2, 3\}$ и так далее. Если в десятичной системе цифры умножаются на числа 1, 10, 10^2 и так далее, то в факториальной — на числа $1!, 2!, 3! \dots$:

$$\overline{\dots cba_1} = a \cdot 1! + b \cdot 2! + c \cdot 3! \dots$$

Максимальное число из $n - 1$ цифр равно $n! - 1$.

Если записать номер перестановки в факториальной системе счисления, то последовательность его цифр можно будет интерпретировать как последовательность выборов в дереве вариантов с рисунка 2.2. В самом деле, первая цифра в $n-1$ -значном числе соответствует выбору из n вариантов, вторая — выбору из $n - 1$ варианта, последняя — выбору из двух вариантов. Взяв число

$$a = \overline{a_1 a_2 \dots a_{n-1}}$$

двигаясь по дереву и выбирая на k -том шаге ветвь номер a_k , мы придём в конце к перестановке номер a .

Таким образом, имея номер перестановки в факториальной системе счисления, мы можем цифра за цифрой восстановить по нему саму перестановку. Хранить факториально большое дерево для этого не нужно: доступные ветви на каждом шаге определяются ещё не использованными городами.

Вышесказанное позволяет в качестве представления маршрута использовать его номер $c \in [0, n!)$. Любое целое число, попадающее в этот промежуток, является валидным маршрутом.

Такое представление выгодно отличается от представления маршрута через его рёбра, которое использовалось в других работах (см. раздел «Обзор литературы»). Наше представление автоматически учитывает нетривиальные ограничения задачи, касающиеся того, чтобы маршрут проходил через все города и не распадался на несвязанные друг с другом петли.

На квантовом компьютере для хранения номера маршрута мы будем использовать двоичную систему счисления, что потребует $\lceil \log_2 n! \rceil = O(n \log n)$ кубитов.

Хотелось бы построить такую схему, которая генерирует только валидные номера перестановок — то есть из промежутка $[0, n!)$. Однако мы не будем этим себя утруждать и позволим схеме генерировать все номера $b \in [0, 2^{\lceil \log_2 n! \rceil})$, которые могут быть записаны на имеющемся наборе кубитов.

Слишком большие номера перестановок мы реинтерпретируем на классическом компьютере как номера из допустимого множества по формуле

$$c = b \% n!$$

После измерения мы переводим номер перестановки из двоичной системы в факториальную, используя обычный алгоритм перевода между системами счисления, основанный на делении с остатком.

Затем на классическом компьютере мы вычисляем сам маршрут, а потом, зная маршрут, вычисляем его стоимость. Этот процесс повторяется достаточное количество раз, чтобы вычислить среднюю стоимость состояния, которое в общем случае представляет собой суперпозицию разных маршрутов.

2.2 Квантовая цепь

На рис. 2.3 изображена использованная нами квантовая схема. Она состоит из чередующихся слоёв гейтов R_x и CNOT. Гейты поворота R_x имеют параметры: углы θ_i . Обсудим, как мы выбрали эту схему.

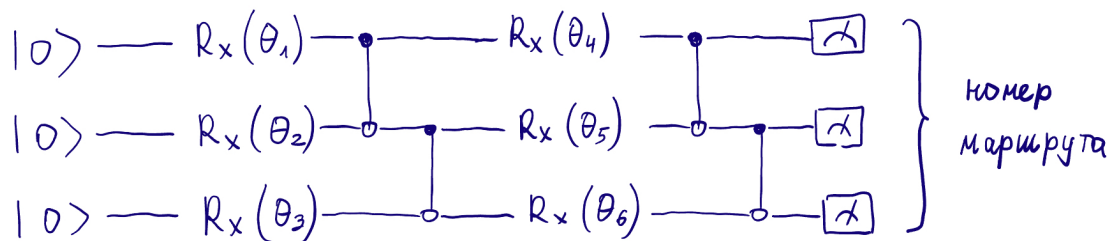


Рисунок 2.3 — Квантовая схема, использованная в разработанном алгоритме

Нам было нужно параметрически создавать квантовое состояние, которое соответствует какому-то маршруту или их суперпозиции. Исходя из этого, мы выдвинули три требования к квантовой цепи:

- 1) все состояния-маршруты должны быть «достижимыми»: для каждого маршрута должен существовать набор параметров такой, что на выходе цепи должно получиться состояние, соответствующее этому маршруту
- 2) все достижимые состояния должны быть «корректными»: при любом наборе параметров на выходе цепи должна получаться суперпозиция допустимых маршрутов
- 3) все параметрические гейты должны иметь только два собственных значения — это позволит применить алгоритм подбора параметров Rotosolve, который мы обсудим в следующем разделе.

Ранее мы выбрали способ представления маршрутов (через их номер), в котором все состояния, составляющие вычислительный базис, соответствуют какому-то допустимому маршруту. А совершенно произвольное состояние,

таким образом, соответствует суперпозиции допустимых маршрутов, и требование (2) выполнено автоматически.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 *Ostaszewski M., Grant E., Benedetti M.* Structure optimization for parameterized quantum circuits // Quantum. — 2021. — URL: <https://doi.org/10.22331/q-2021-01-28-391>.