

多功能量子退火工具包及其應用

Multifunctional quantum annealing toolkit and its applications

1 摘要

模擬退火法、模擬量子退火法、及量子退火法 (又稱絕熱量子計算) 均為物理啟發的全域最佳化方法。模擬退火法藉熱起伏 (thermal fluctuation) 搜尋解空間，模擬量子退火法主要基於路徑積分蒙地卡羅 (path-integral Monte Carlo) 計算，而量子退火法則由一初始哈密頓算符的基態解出發，藉緩慢改變哈密頓算符達到目標解答。有鑑於組合最佳化 (combinatorial optimization) 之應用範圍極廣，不同種類的退火運算硬體處理器陸續被建造出，並能提供實務及商業使用。本計畫將開發綜合上述三類退火演算法以及更多的退火技術之 C++ 軟體套件，並將參考 D-wave 及 Fujitsu Digital Annealer 的使用者介面，以開源軟體方式提供於傳統電腦使用。除組合最佳化問題的應用，我們所開發的退火工具包也將著重理論物理模型之求解。

2 研究動機與研究問題

自 2023 年起我參與使用 Fujitsu Digital Annealer 的專案計畫。Fujitsu Digital Annealer 是一部以半導體技術建造的退火處理器，專門處理二次無約束二元最佳化 (quadratic unconstrained binary optimization, QUBO) 問題，雖然 Fujitsu 標榜其退火處理器使用量子啟發計算 (quantum-inspired computing)，但使用的演算法是不具量子概念的模擬退火法 (simulated annealing) 及平行計算技術。

在專題指導教授林瑜琤的指導下，我利用 Fujitsu Digital Annealer 求量子易辛 (Ising) 自旋三角反鐵磁晶格之基態，此模型的哈密頓算符 (能量算符) 定義如下：

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} Z_i Z_j - h \sum_i X_i \quad (1)$$

其中 Z_i 及 X_i 分別表示位於晶格點 i 上的 z 及 x 分量的泡立矩陣 (Pauli matrix)， h 為指向 x 方向的橫向磁場強度， \sum 下標 $\langle ij \rangle$ 表示只考慮相鄰的晶格點；這裡考慮的晶格為如圖 Figure 1 所示的二維三角晶格，由共邊

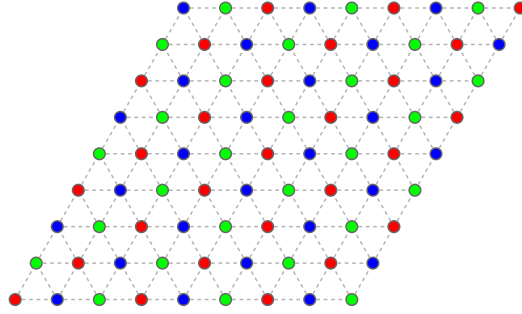


Figure 1: 二維三角晶格示意圖。三種不同顏色的晶格代表三個不同的子晶格。

三角形所組成，可以劃分為三個子晶格 (sublattices)。在零橫場 $h = 0$ 的情形下，此模型為古典（非量子）易辛反鐵磁，其能量值表示為

$$E(\{s_i\}) = \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (2)$$

式中 s_i 為晶格點 i 的二元自旋狀態，可取值 $\{+1, -1\}$ 代表所謂的自旋「朝上」或「朝下」，如何找出整體自旋的最佳排列使能量值最低為典型的二次無約束二元最佳化 (QUBO) 問題。以三角晶格的單一三角晶胞來看，任意兩相鄰自旋可滿足反鐵磁性（一朝上，另一朝下）來達該兩自旋配對的最低能量，但第三個自旋狀態無論朝上或朝下均會與其中一相鄰自旋的反鐵磁性衝突，這性質我們稱為幾何挫折性 (geometric frustration)。理論已知 [1, 2] 幾何挫折性使零橫場的古典易辛三角反鐵磁甚至在絕對零度下也不具反鐵磁性。有趣的是，雖然橫場如同溫度傾向破壞有序，在有限橫場下 ($h \neq 0$) 易辛三角反鐵磁反而產生低溫的反鐵磁性，這是所謂的 order-by-disorder 現象 [3]。為了得以在 Fujitsu Digital Annealer 上求解帶有橫場的量子自旋模型，我們藉由 Trotter-Suzuki 展開式 [4] 將二維的量子模型轉換成堆疊的三維古典模型 [3]，多出的維度之長度相當於溫度的倒數 $\beta = 1/T$ 。這個等效的三維古典模型也同樣具 QUBO 形式。圖 Figure 2 展示 $h = 0$ 及 $h = 0.6$ 的序參數分佈情形，這裡序參數定義為以下複數形式 [3]：

$$m \equiv (m_A + m_B e^{i(4\pi/3)} + m_C e^{i(-4\pi/3)}) / \sqrt{3}, \quad (3)$$

其中 m_α , $\alpha = A, B, C$ 為三子晶格（圖 Figure 1）分別的磁化量。我們確實可觀察到 $h = 0$ 模型的序參數集中在 $|m| = 0$ ，代表無有序的反鐵磁性，而 $h = 0.6$ 模型的序參數分佈則集中於 $|m| = 0.4$ 附近，呈現反鐵磁性。值得一提的是，若增加系統的尺度——包含三角晶格的邊長 L 及針對 $h \neq 0$ 情

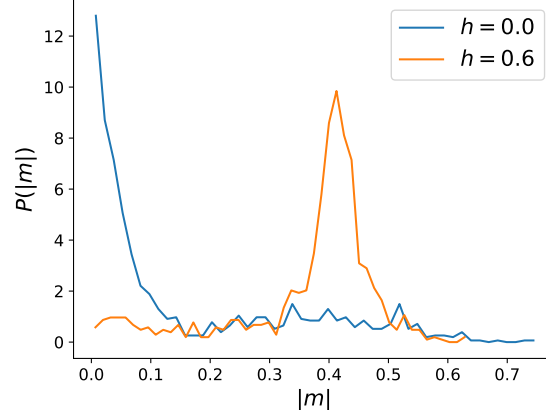


Figure 2: 邊長為 $L = 21$ 的三角反鐵磁之序參數分佈，此為應用 Fujitsu Digital Annealer 的計算結果，對兩不同的 h 值各採集 1024 樣本數。針對 $h = 0.6$ 的三維等效模型，堆疊的層數共 64 層。

形的三維等效模型的堆疊高度 β ，結果將更吻合理論結果，這是所謂的有限系統效應。對於古典極限下的 $h = 0$ 模型，Fujitsu Digital Annealer 確實可以極具效率地提供最佳解答。可惜我們使用的 Digital Annealer 提供單次計算 10 萬個位元數目（相當於古典自旋數目）及最高 30 分鐘計算時間，對於需要轉換成三維等效模型的 $h \neq 0$ 量子模型，可執行的系統尺度因此受到限制。

為克服上述困難，且為了更徹底瞭解量子退火及古典模擬退火的演算法，我開始撰寫這些演算法的程式。在林瑜琇老師的指導下，我學習到「退火法」有一些不同的類型 [5]，而且均可以用隨機的方式作運算，即所謂的（量子）蒙地卡羅方法；而量子蒙地卡羅方法也牽涉不同種類的演算法，這些均在我的程式撰寫清單上。我們也將結合量子退火及古典模擬退火兩種退火路徑 [6]，並將之擴充並延伸。

我將開發的退火工具包將以 C++ 語言為進行運算的主要程式，處理的問題將包含二次無約束二元最佳化問題，及建構在多型態晶格的量子自旋模型。二次無約束二元最佳化問題可以下列式子表示：

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} + \mathbf{c}^T \mathbf{x} \quad (4)$$

式中 \mathbf{x}^T 為一每個元素 $x_i \in \{0, 1\}$ 之 N 維列向量， \mathbf{Q} 為 $N \times N$ 實對稱矩陣， \mathbf{c}^T 為 N 維列實向量，目標在於找出最佳的 \mathbf{x} 使得目標函數 $E(\mathbf{x})$ 達最小值（也可透過 $-\mathbf{Q}$ 及 $-\mathbf{c}$ 轉換成求最大值的問題）。對於自旋相關的

問題，我們習慣將 \mathbf{x} 轉換成由二元變數 $s_i \in \{-1, +1\}$ 構成的向量 \mathbf{s} ，轉換式為 $s_i = 2x_i + 1$ 。因為我們使用的量子退火演算法起源於處理量子自旋模型，所開發的退火工具包也將適用解決超越上述的二次無約束二元最佳化問題，能進一步探索量子系統。

3 文獻回顧與探討

本節簡述將納入工具包的三個主要的退火演算法。

(1) 模擬退火法 (Simulated Annealing, SA)

此方法模擬物理的退火過程，即將材料加熱然後使之緩慢冷卻的過程，極度緩慢冷卻可減少缺陷產生，即降低系統的能量。1983 年由 Kirkpatrick 等人 [7] 將這個方法結合 Metropolis 蒙地卡羅 [8] 的模擬，應用在組合最佳化問題。以式 (4) 所列的 QUBO 問題為例，我們引入溫度 $T > 0$ 作為控制參數，由一初始狀態向量 \mathbf{x}_0 出發，藉由 Metropolis 蒙地卡羅 [8] 方式更新狀態，考慮狀態向量每一元素的更新後，我們微降低溫度，然後在新的溫度值進行 Metropolis 式的狀態更新，再降低溫度，重複如此的降溫、狀態更新步驟直至溫度趨近 $T = 0$ ，此時的狀態向量 \mathbf{x} 可接近一使目標函數達最小值的最佳狀態。這個演算法的虛擬碼呈現於 Algorithm 1。

Algorithm 1 Simulated Annealing

```

Initialization:  $T_{\max}, \mathbf{x}$ 
for  $t = 1$  To  $t_{\max}$  do:
     $\mathbf{x}' \leftarrow$  generate a new candidate state
     $\Delta E \leftarrow E(\mathbf{x}') - E(\mathbf{x})$ 
    if  $\Delta E < 0$  then
         $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}'$ 
    else if  $\text{ran}(0, 1) < \exp(-\Delta E/T)$  then
         $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}'$ 
    end if
     $T \leftarrow T_{\max}(1 - t/t_{\max})$ 
end for
Output: the final state  $\mathbf{x}$ 

```

(2) 模擬量子退火法 (Simulated Quantum Annealing, SQA)

模擬量子退火法 [9, 10, 11] 建立於路徑積分蒙地卡羅方法 [12]。對於一 QUBO 問題，我們先將其狀態向量轉換成 \mathbf{s} ，例如，

$$E(\mathbf{s}) = \mathbf{s}^T \mathbf{J} \mathbf{s} = \sum_i \sum_j J_{ij} s_i s_j, \quad (5)$$

向量中每個元素取值 $s_i = \pm 1$ ，可視為厄立矩陣

$$\mathbf{Z}_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

的特徵值。取代模擬退火法所引入的溫度，模擬量子退火法引入「量子項」，其為如同式 (1) 的橫場項 $h \sum_i \mathbf{X}_i$ ，具有與矩陣 \mathbf{Z}_i 無乘法交換性的 \mathbf{X}_i 厄立矩陣：

$$\mathbf{X}_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

因為 \mathbf{X}_i 矩陣作用在點 i 上的 \mathbf{Z}_i 矩陣之特徵向量，將會使其轉換成另一特徵向量：

$$|\uparrow\rangle \xleftrightarrow{\mathbf{X}} |\downarrow\rangle \quad |\downarrow\rangle \xleftrightarrow{\mathbf{X}} |\uparrow\rangle, \quad (7)$$

上式 $|\uparrow\rangle$ 及 $|\downarrow\rangle$ 分別表示對應特徵值 $+1$ 及 -1 的特徵向量。如此引入 $h \sum_i \mathbf{X}_i$ 的效應如同引入溫度來「翻轉」狀態向量 \mathbf{s} 。

在模擬量子退火法中，我們建立一個時程 $t = 1, 2, \dots, t_{\max}$ 來緩慢調降橫場 h 值： $h(t=1) > h(t=2) > \dots > h(t_{\max}) = 0$ 。對每一個步驟 t 我們用路徑積分蒙地卡羅法來求如下的哈密頓算符之基態，

$$\mathbf{H} = \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_j - h(t) \sum_i \mathbf{X}_i. \quad (8)$$

當 $h(t_{\max}) = 0$ ，上述哈密頓算符簡化成式 (5) 的原 QUBO 問題。為執行路徑積分蒙地卡羅法，我們利用 Trotter-Suzuki 展開式 [4, 12] 將以式 (8) 描述的量子模型轉換成多一個維度的等效模型 [4]：

$$S_{\text{eff}} = \sum_{i,n} \sum_{j,n} K_{ij} s_{i,n} s_{j,n} - K' \sum_{i,n} s_{i,n} s_{i,n+1}, \quad (9)$$

此等效模型可視為許多層原模型 (5) 之堆疊，我們將每一層稱為空間維度，堆疊上去的維度稱為虛數時間維度。式 (9) 中 i, j 標記空間晶格

點， $n = 1, 2, \dots, \beta/\varepsilon$ 標記虛數時間軸的堆疊層，每個 $s_{i(j),n}$ 變數可取值 $\{-1, +1\}$ ，變數間的關聯 K 及 K' 分別為，

$$K_{ij} = J_{ij}\varepsilon, \quad K' = -\frac{1}{2} \ln(\tanh(\varepsilon h(t))) . \quad (10)$$

如此我們可以類似 Metropolis 方法來執行蒙地卡羅計算。在 $h(t_{\max}) = 0$ 極限下，每一層的狀態向量 \mathbf{s}_n 可視為原始 QUBO 問題的最佳解。

事實上，上述等效模型轉換只有在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 且滿足 $\exp(-2K') = \varepsilon h$ 時成立 [3, 4]。為使這個條件成立，我們可以採用所謂的連續虛數時間蒙地卡羅演算法 [13]。這個演算法的精確度已獲得驗證，例如參看文獻 [14] 的圖 FIG.1。惟此連續虛數時間演算法是否更有效處理最佳化問題，值得進一步研究 [15, 16]。

(3) 量子退火法 (Quantum Annealing, QA)

量子退火法（又稱絕熱量子計算，Adiabatic Quantum Computing）係由一簡單的初始哈密頓算符 \mathbf{H}_0 的基態解出發，藉緩慢改變哈密頓算符達到目標哈密頓算符 \mathbf{H}_p ，目標哈密頓算符之基態為目標解答。我們可將這樣的過程根據演化時間 t 及總演化時間 τ 表示為

$$\mathbf{H}(t) = (1 - t/\tau)\mathbf{H}_0 + (t/\tau)\mathbf{H}_p . \quad (11)$$

或以參數 $a = t/\tau \in [0, 1]$ 表示：

$$\mathbf{H}(a) = (1 - a)\mathbf{H}_0 + a\mathbf{H}_p . \quad (12)$$

這個演化過程與式 (8) 雷同，但在演算上我們將以可呈現哈密頓隨時間演化的方法進行。量子退火法主要基於絕熱原理 (adiabatic theorem) [17]，闡述若哈密頓算符隨時變化足夠緩慢，系統將得以保持在演化中每一時刻的基態。

為能以蒙地卡羅計算實現式 (11) 的哈密頓動態，我們採用基態投射蒙地卡羅法 (ground-state projector Monte Carlo method) [18, 19]，以一串 M 個演化哈密頓算符

$$\mathbf{P}_{M,1} = \mathbf{H}(a_M) \cdots \mathbf{H}(a_2)\mathbf{H}(a_1) \quad (13)$$

作用在初始態 $|\psi_0(a=0)\rangle$ 。因哈密頓算符由單一自旋算符或雙自旋算符組成，投射蒙地卡羅計算牽涉到這些局域算符的更新，自旋狀態即隨著置入的局域算符變化。

值得一提，近期刊論文 [5] 藉 D-wave 電腦針對自旋玻璃執行量子退火法，並與模擬退火法及模擬量子退火法的結果作比較，證實 D-wave 量子退火的優勢。

4 研究方法及步驟

本計畫的執行重點為開發退火工具包，來求解量子易辛模型及任意 QUBO 問題。這幾個月來我已完成的項目包含：

- 簡易輸入任意 QUBO 問題的介面
- 針對本計畫將實作的三角晶格模型之定義
- 模擬退火法 (SA) 的程式
- 輔助 SA 的副本交換 (Replica Exchange) 演算法（或稱平行退火 (Parallel Tempering) [20]，並利用 Message Passing Interface (MPI) 作平行計算
- 模擬量子退火法 (SQA) 的程式
- 輔助 SQA 的副本交換演算法，並利用 MPI 作平行計算

接續我將撰寫連續虛數時間蒙地卡羅法的程式，及建立在基態投射蒙地卡羅演算法的量子退火程式。本計畫也將結合模擬退火及量子退火兩退火路徑：既降溫度，亦降橫場，為此將以有限溫度隨機級數展開法 (Stochastic Series Expansion, SSE) [21] 為執行的方法。我亦將為基態投射蒙地卡羅演算法及隨機級數展開法建立副本交換的程式。

最後我將應用所開發的工具包探索量子三角反鐵磁的低溫相態。若有足夠 D-wave 計算時間，我將執行 D-wave 計算，並與其他方法作比較。

5 預期結果

本計畫開發的退火工具包因為針對二次無約束二元最佳化問題設計，可應用的範疇很廣，除了前面敘述的物理模型，還可列舉：圖形分割問題、排程問題、物流優化問題等等。基於我作專題研究的經驗，實際執行 Fujitsu Digital Annealer 的經驗，有執行 D-wave 計算的可能性（林老師參與的專案計畫），及我主修資訊科學系所培養的撰寫電腦程式之能力，我有信心在林老師繼續指導下能開發出具有科學深度且能造福廣大應用者的多能量子退火工具包。期待能獲國科會補助我執行這個資訊科學與物理學的跨域研究計畫。

6 需要指導教授指導內容

我需要林老師指導我關於連續虛數時間蒙地卡羅法、基態投射蒙地卡羅演算法、隨機級數展開法的細節，並在後續量子自旋模型的實作計算傳授模型的物理內涵。

References

- [1] G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
- [2] Y. Jiang and T. Emig, Phys. Rev. B **73**, 104452 (2006).
- [3] S. V. Isakov and R. Moessner, Phys. Rev. B **68**, 104409 (2003).
- [4] M. L. Bellac, F. Mortessagne, G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, pages 431-435, Cambridge University Press; 1st edition (2004).
- [5] A. D. King, et al. Nature **617**, 61 (2023).
- [6] 何政緯, 關於量子蒙地卡羅退火法, 碩士論文, 國立政治大學 (2017).
- [7] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, Jr., M. P. Vecch, Science **220**, 671 (1983).
- [8] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [9] G. E. Santoro, R. Martonak, E. Tosatti, and R. Car, Science **295**, 2427 (2002).
- [10] S. Boixo, et al. Nat. Phys. **10**, 218 (2014).
- [11] S. V. Isakov, et al. Phys. Rev. Lett. **117**, 180402 (2016).
- [12] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976).
- [13] H. Rieger and N. Kawashima, Eur. Phys. J. B **9**, 233 (1999).

- [14] Y.-P. Lin, Y.-J. Kao, P. Chen, and Y.-C. Lin, Phys. Rev. B **96**, 064427 (2017).
- [15] 張凱鈞, On Quantum Simulation: Quantum Random Walks and Quantum Adiabatic Optimization, 碩士論文, 國立政治大學 (2012).
- [16] 黃湘喻, 以模擬量子退火過程探索自旋系統的基態, 碩士論文, 國立政治大學 (2014).
- [17] T. Albash and D. A. Lidar, Rev. Mod. Phys. **90**, 015002 (2018).
- [18] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 174302 (2013).
- [19] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **114**, 147203 (2015).
- [20] R. H. Swendsen and J. S. Wang, Phys. Rev. Lett. **57**, 2607 (1986).
- [21] A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **68**, 056701 (2003).
- [22] R. G. Melko, Stochastic Series Expansion Quantum Monte Carlo, pages 185–206, Springer, Berlin, Heidelberg, (2013).