

Использование тензорных сетей для изучения квантового отжига

Автор:

Студент группы Б02 - 821

Лаврин Олег Игоревич

Научный руководитель:

Магистр

Перельштейн Михаил Романович

План

- 1) Комбинаторная Оптимизация
- 2) Цепочки Изинга
- 3) Квантовый Отжиг
- 4) Тензорные Сети и Крестовая Аппроксимация
- 5) Сравнение Решений
- 6) Исследование Отжига
- 7) Вывод и Планы на Будущее

Задача Коммивояжера



Пусть $d_{n,m}$ - матрица расстояний между городами n и m , а $x_{n,t} \in \{0, 1\}$ - переменные выбора, где $x_{n,t} = 1$, если коммивояжер на шаге t посещает город n . Эту задачу тоже можно сформулировать в матричном виде:

$$\sum_{n,m,t}^N d_{n,m} x_{n,t} x_{m,t+1} \rightarrow \min_{x_{n,t} \in B} \quad (5)$$

$$s.t \forall n \hookrightarrow \sum_t x_{n,t} = 1 \quad (6)$$

$$\forall t \hookrightarrow \sum_n x_{n,t} = 1 \quad (7)$$

Сведение Ограничений к Штрафам

Основным барьером на пути создания универсального

алгоритма для их решений встают ограничения

на множество, по которому ведется поиск.

Одним из стандартных способов обойти этот барьер -

воспользоваться релаксацией ограничений.

Тогда задача принимает следующий вид:

$$x^T Q_{obj} x + f_{penalty}(x) \rightarrow \min_{x_i \in B}$$

Classical Constraint	Equivalent Penalty
$x + y \leq 1$	$P(xy)$
$x + y \geq 1$	$P(1 - x - y + xy)$
$x + y = 1$	$P(1 - x - y + 2xy)$
$x \leq y$	$P(x - xy)$
$x_1 + x_2 + x_3 \leq 1$	$P(x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3)$
$x = y$	$P(x + y - 2xy)$

где Q_{obj} - матрица, задающая целевую функцию оптимизации, а $f_{penalty}$ - штрафы которые формируют из ограничений оригинальной задачи. Зачастую, эти ограничения тоже получаютсся квадратичными.

Цепочки Изинга

Используя замену $x_i = \frac{1+s_i}{2}$, можно показать, что эта задача эквивалентна поиску основного состояния в **модели Изинга** со следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} - \sum_{i=1}^n h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} \quad (10)$$

где $\hat{\sigma}_z^{(i)}$ - оператор спина i ого атома в решетке, $J_{i,j}$ - энергии их взаимодействия, а h_i - внешнее поле, действующее на i ый атом.

Фрустрированные Цепочки Изинга

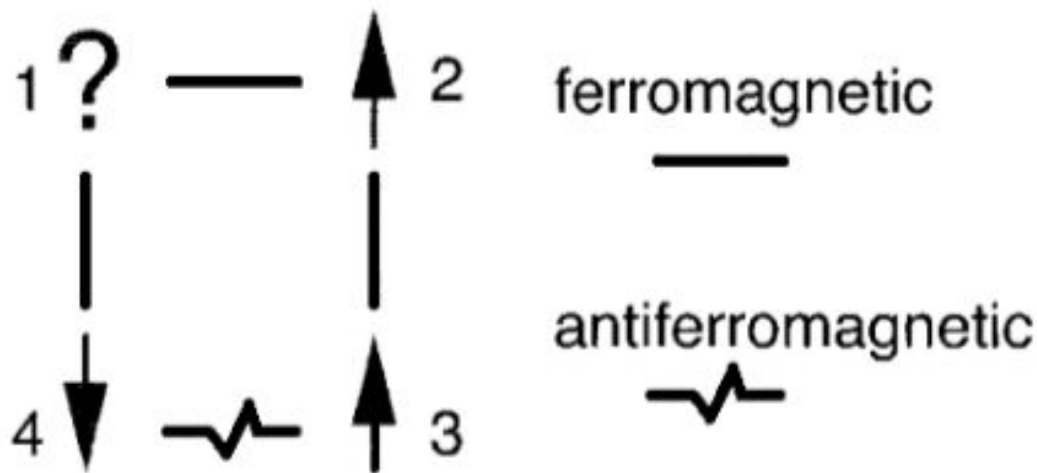


Рис. 4: Пример фрустрированной цепочки. Независимо от того, куда направлен первый спин, на одной из его связей не будет минимума энергии, а все остальные связи будут иметь минимальную энергию.

Постановка Задачи - Отыскание Основного Состояния следующей Изинговской цепочки:

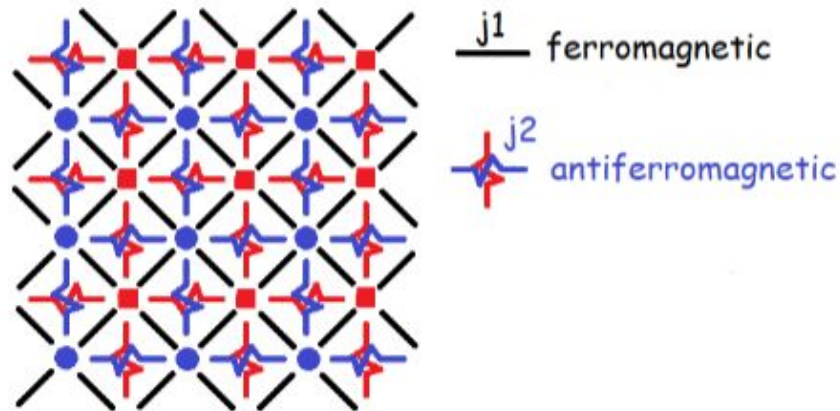
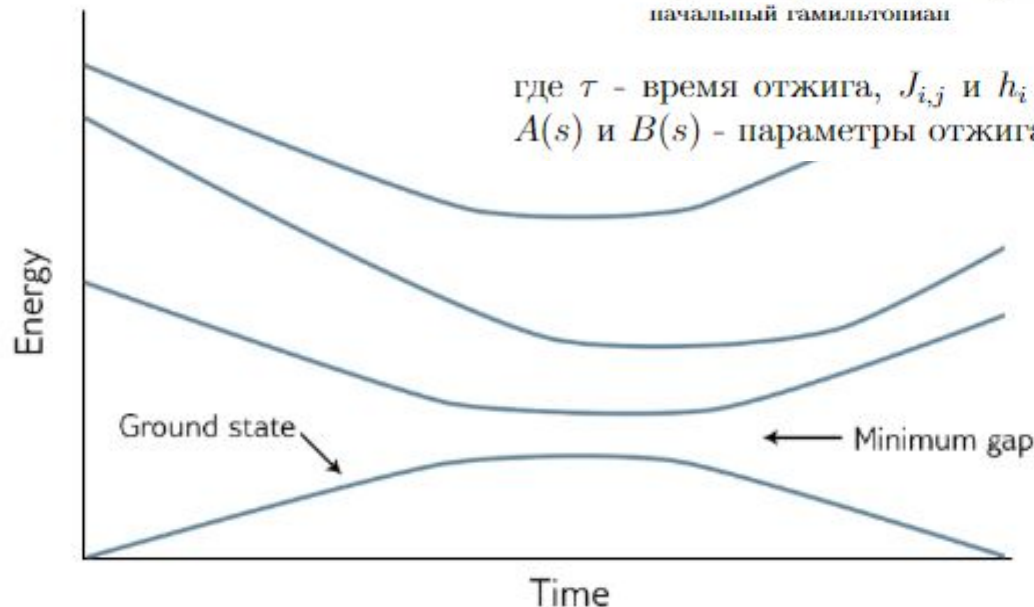


Рис. 5: Решетка для тестовой задачи. Она состоит из двух антиферромагнитных подрешеток с энергией взаимодействия j_2 , сдвинутых на полпериода, взаимодействующих друг с другом ферромагнитным образом с энергией j_1 .





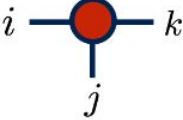

Квантовый Отжиг

$$\hat{H}(t) = \underbrace{-A\left(\frac{t}{\tau}\right) \sum_{i=1}^n \hat{\sigma}_x^{(i)}}_{\text{начальный гамильтониан}} - \underbrace{B\left(\frac{t}{\tau}\right) \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} + \sum_{i=1}^n h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} \right)}_{\text{гамильтониан задачи}} \quad (11)$$


где τ - время отжига, $J_{i,j}$ и h_i - настраиваемые параметры кубитов, а $A(s)$ и $B(s)$ - параметры отжига, причем $A(0) \gg B(0)$ и $A(1) \ll B(1)$.



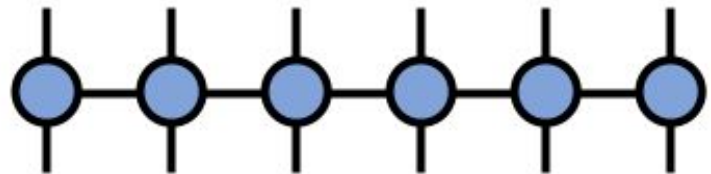
Тензорные Сети

vector	v_j			$=$	$\sum_j M_{ij} v_j$
matrix	M_{ij}			$=$	$A_{ij} B_{jk} = AB$
3-index tensor	T_{ijk}			$=$	$A_{ij} B_{ji} = \text{Tr}[AB]$

Matrix Product States \ Matrix Product Operator

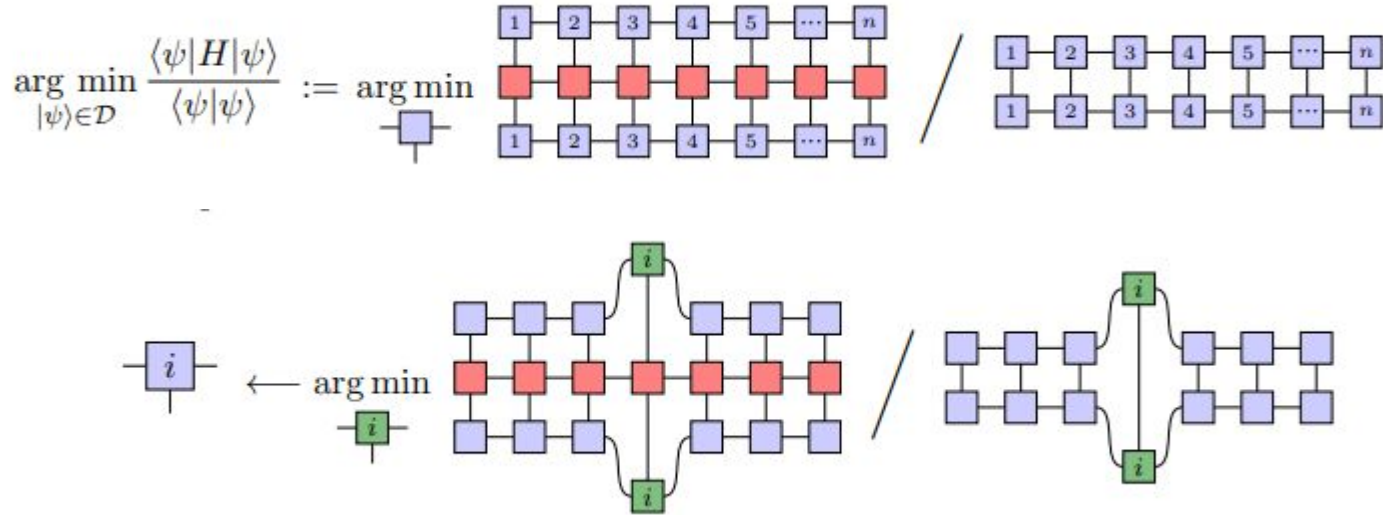


$$= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} A_{\alpha_1}^{s_1} B_{\alpha_1 \alpha_2}^{s_2} C_{\alpha_2 \alpha_3}^{s_3} D_{\alpha_3}^{s_4}$$



$$M_{s'_1 s'_2 s'_3}^{s_1 s_2 s_3} = \sum_{\{\alpha\}} A_{s'_1}^{s_1 \alpha_1} A_{\alpha_1 s'_2}^{s_2 \alpha_2} A_{\alpha_2 s'_3}^{s_3}$$

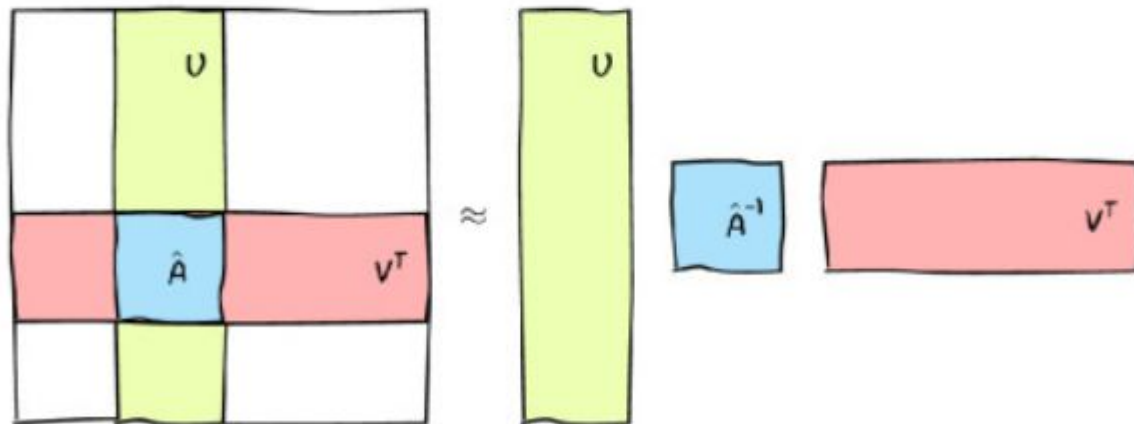
Нахождение Основного Состояния



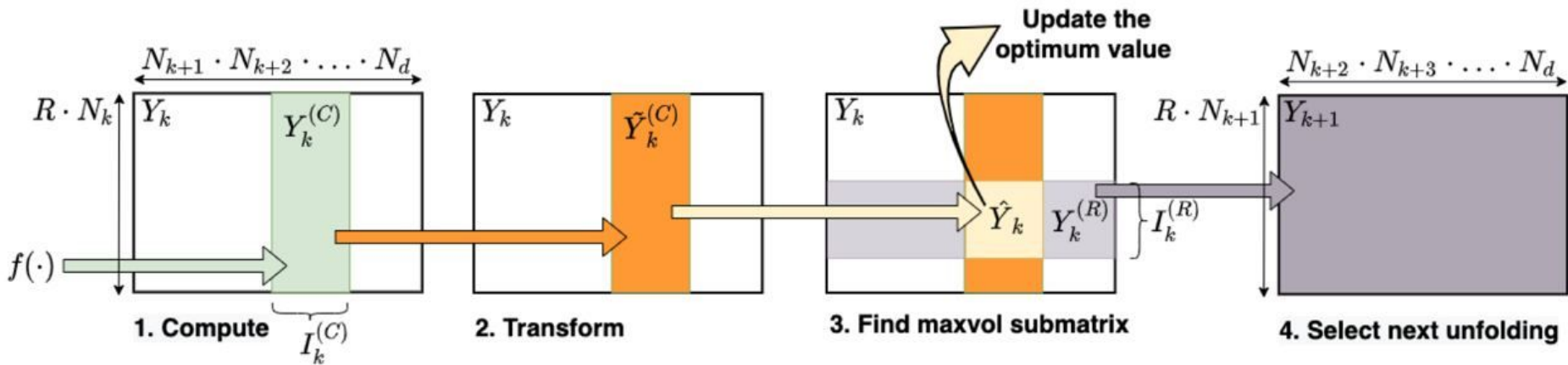
Крестовая Аппроксимация Матриц

Незаслуженно малоизвестный факт:

Матрицу ранга r можно восстановить по r столбцам и r строкам.



Крестовая Аппроксимация MPS

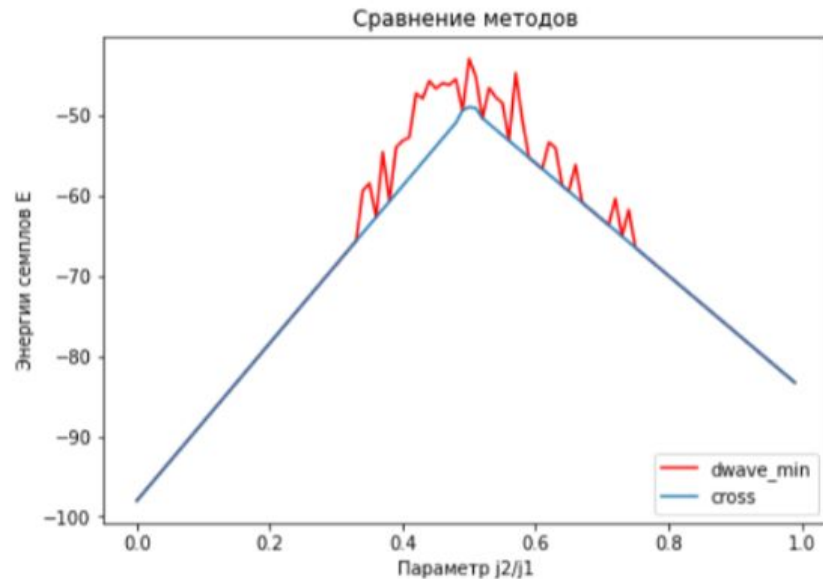
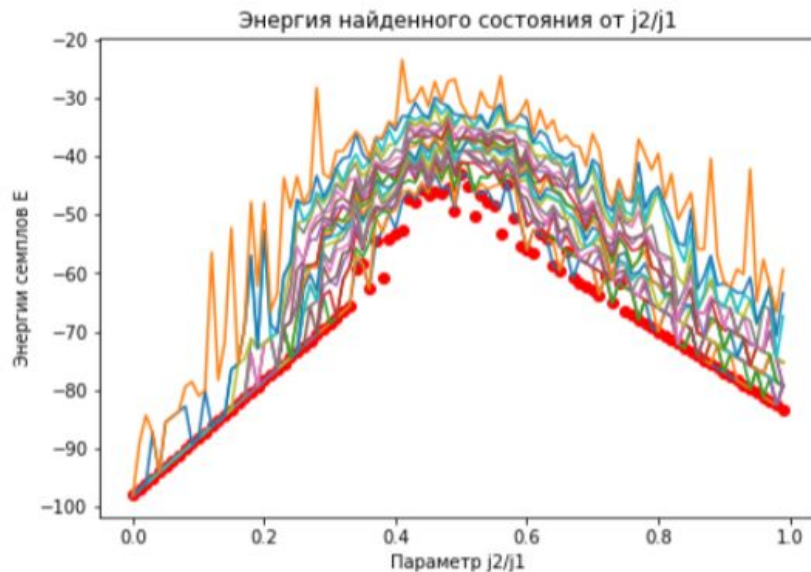


Изначальная задача: 49 кубитов

Задача после трансляции: 120 кубитов

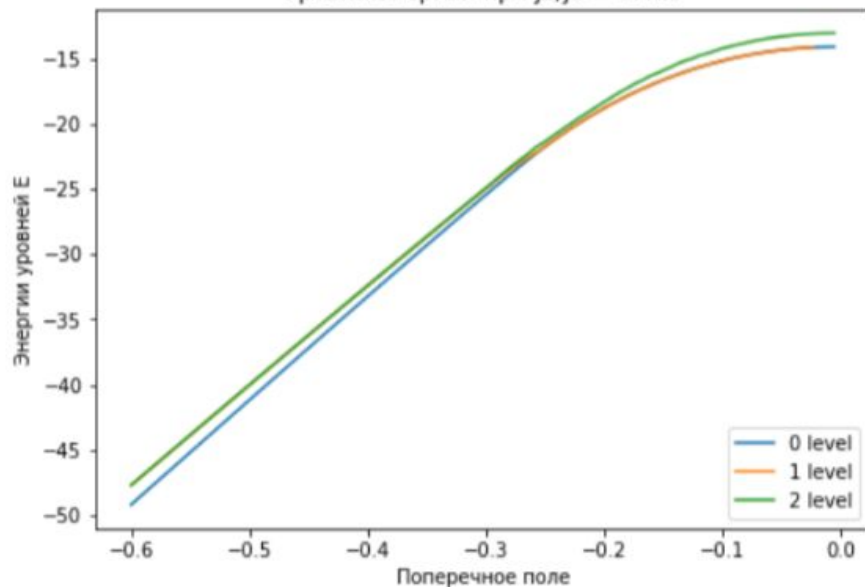


Результаты. Сравнение Квантового Отжига и Крестовой Аппроксимации

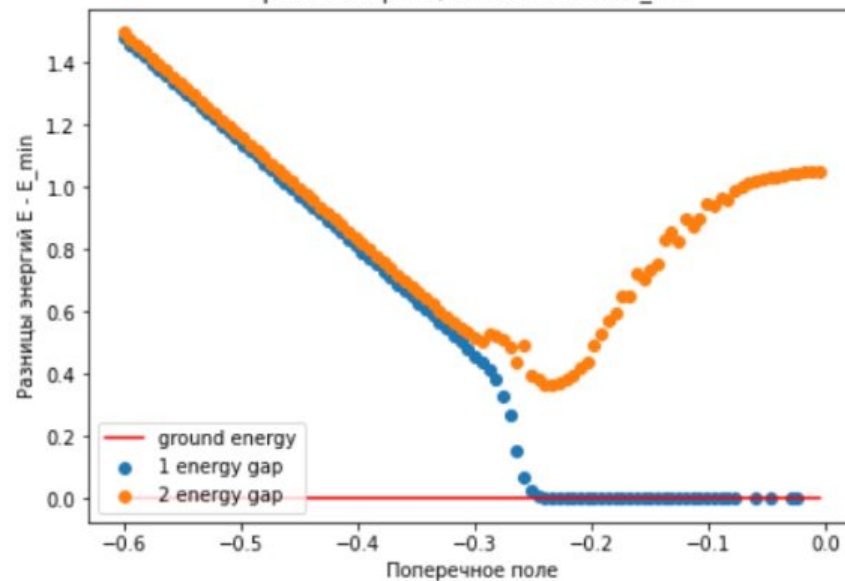


Результаты. Исследование Отжига

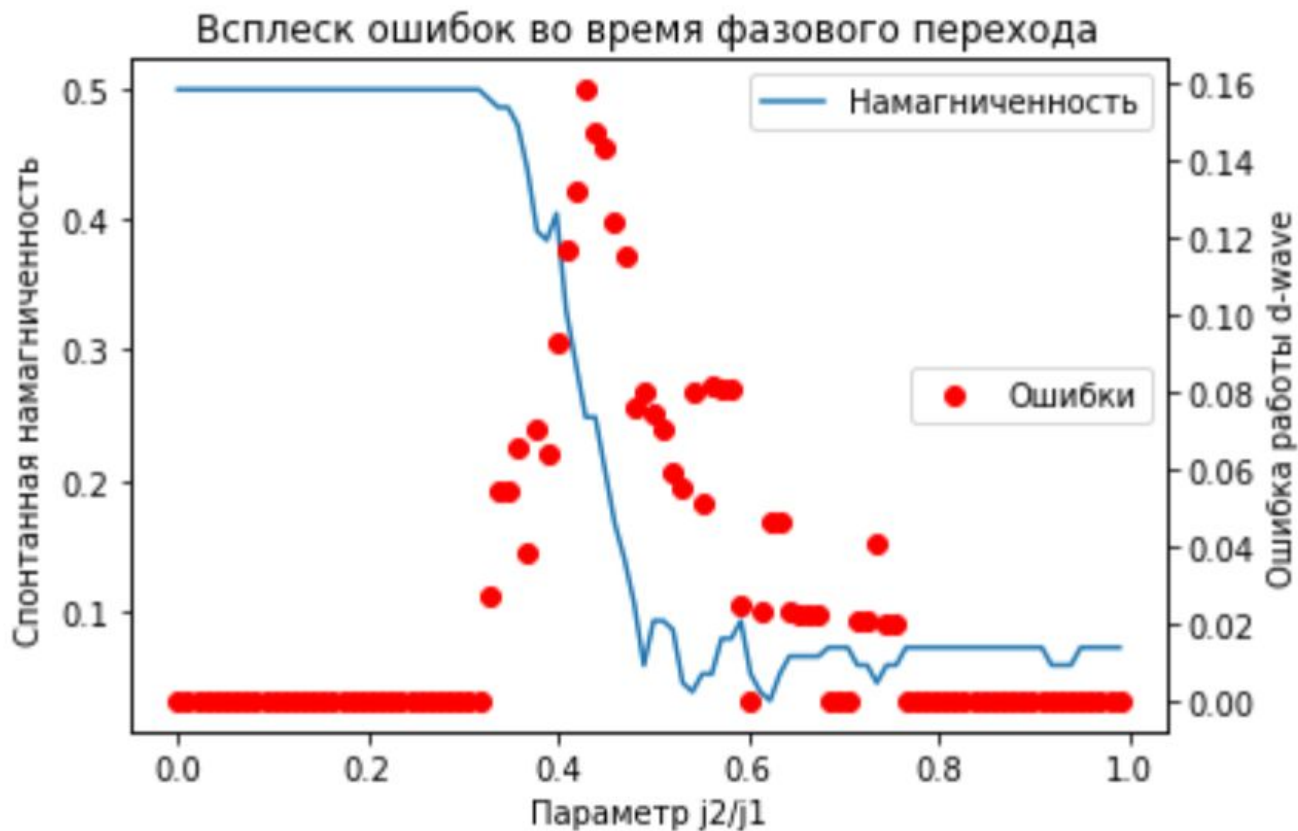
Уровни энергии при $j_2/j_1 = 0.425$



Уровни энергии, относительно E_{\min}



Результаты. Исследование Фазового Перехода



Вывод

- 1) В задачах дискретной оптимизации Крестовая Аппроксимация оказалась эффективнее, чем квантовый отжигатель d-wave.
- 2) Тензорные сети также оказались достаточно эффективны в поиске основного состояния в больших “не-классических” системах
- 3) Используя тензорные сети удалось исследовать профиль отжига и доказать, что ошибка связана НЕ с вырождением в течении отжига
- 4) Вероятнее всего, качественный рост ошибок происходит в момент фазового перехода, но доказать это не удалось

Планы на Будущее

- 1) Проверить работу крестовой аппроксимации на псевдо-булевых функциях
- 2) Применить информацию об уровнях энергии из тензорных сетей для ускорения оптимизации через адаптивный отжиг.
- 3) Реализовать используемые методы на современных библиотеках. Добавить поддержку GPU/тензорных процессоров