

Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный
университет)

Физтех-школа Ландау Физика Исследования
ОП Фундаментальные проблемы физики квантовых технологий

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Использование тензорных сетей для изучения КВАНТОВОГО ОТЖИГА

Автор:

Студент группы Б02 - 821
Лаврин Олег Игоревич

Научный руководитель:

Магистр
Перельштейн Михаил Романович



Москва 2022

Аннотация

Использование тензорных сетей для изучения квантового отжига

Лаврин Олег Игоревич

Квантовый отжиг - специализированный алгоритм квантовой оптимизации, для которого уже разработаны NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum) процессоры, в частности произведенные компанией D-Wave Systems. Опыт, полученный в ходе их использования для задач в науке и промышленности, показал, что в процессе их работы происходит множество интересных физических эффектов. Их исследование затруднено тем, что NISQ процессоры уже слишком сложны для их моделирования.

В данной работе был проведен подобный анализ. Для обхода ограничений, вызванных проклятием размерности, были использованы тензорные сети. Изначально метод был разработан для исследований в области физики конденсированного состояния, что не мешает применять его для исследования NISQ процессоров.

На примере задачи о поиске основного состояния модели Изинга был проведен сравнительный анализ решений, полученных на квантовом компьютере и тензорными сетями. Используя подход тензорных сетей было показано, что основной источник ошибок связан со свойствами исследуемой цепочки Изинга, а не квантового компьютера.

Оглавление

1	Введение	2
1.1	Примеры Комбинаторной Оптимизации	2
1.2	QUBO	4
1.3	Фрустрированные Изинговские Цепочки	5
2	Постановка задачи	6
3	Обзор существующих решений	8
3.1	Метод Ветвей и Границ	8
3.2	Квантовый Отжиг	9
3.3	Крестовая Аппроксимация и DMRG	11
3.3.1	Тензорные Сети	11
3.3.2	DMRG	13
3.3.3	TT-cross	14
4	Исследование и построение решения задачи	16
4.1	Поиск Основного Состояния Цепочки	16
4.2	Гипотеза 1. Вырождение во Время Отжига	17
4.3	Гипотеза 2. Влияние фазового перехода	19
5	Заключение	20

Глава 1

Введение

1.1 Примеры Комбинаторной Оптимизации

Комбинаторная оптимизация - одно из наиболее важных направлений математической оптимизации, встречающейся как в промышленности, так и в физике. Задача заключается в отыскании экстремума объектной функции на некотором комбинаторно-заданном множестве. Например на путях в графе, или среди покрытий какого-то множества. Как правило, эти задачи сводятся принятию большого количества решений "ДА/НЕТ", при выполнении некоторых ограничений на эти комбинации.

Примером такой задачи, востребованной в промышленности, в том числе военной[1], является **покрытие множеств**[2]. Пусть у нас имеется некоторое множество \mathcal{N} , которое мы хотим покрыть множествами из набора $\mathcal{S} = \{S_i \subset \mathcal{N}\}$, минимизируя стоимость этого покрытия.

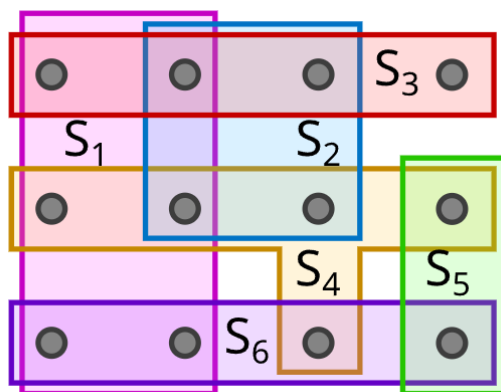


Рис. 1.1: Пример задачи покрытия. Необходимо покрыть серые точки минимальным кол-вом цветных фигур. Изображение взято с <https://www.gcardone.net/2019-08-31-visa-free-travel/>

Строгая формулировка задачи выглядит следующим образом:

$$\sum_{s \in \mathcal{S}} w_s x_s \rightarrow \min_{x_s \in \mathcal{B}} \quad (1.1)$$

$$s.t. \forall j \in \mathcal{N} \hookrightarrow \sum_{s \in \mathcal{S}} (j \in S) x_s \geq 1 \quad (1.2)$$

где w_s - стоимость включения множества в покрытие, а $x_s \in \{0,1\}$ - переменные выбора, где $x_s = 1$, если множество S входит в покрытие.

В случае, если кол-во элементов $|\mathcal{N}| = N$ и $|\mathcal{S}| = M$ конечно, то задачу можно переформулировать в матричном виде:

$$w^T x \rightarrow \min_{x \in \mathcal{B}^M} \quad (1.3)$$

$$s.t Ax \succeq 1 \quad (1.4)$$

где A - матрица, столбцами которой мы хотим покрыть вектор единиц.

Следующим примером комбинаторной оптимизации можно рассмотреть **задачу коммивояжера**[2]. Имеется набор городов и сеть дорог, которыми они соединены. Коммивояжер пытается посетить их все, минимизируя пройденный путь.



Рис. 1.2: Пример из реального мира. Оптимальный маршрут коммивояжера через 15 крупнейших городов Германии. Изображение взято с https://de.wikipedia.org/wiki/Problem_des_Handlungsreisenden#/media/Datei:TSP_Deutschland_3.png

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:

$$\sum_{n,m,t} d_{n,m} x_{n,t} x_{m,t+1} \rightarrow \min_{x_{n,t} \in \mathcal{B}} \quad (1.5)$$

$$s.t \forall n \hookrightarrow \sum_t x_{n,t} = 1 \quad (1.6)$$

$$\forall t \hookrightarrow \sum_n x_{n,t} = 1 \quad (1.7)$$

Эти задачи, как и многие другие практически значимые задачи, чрезвычайно трудно решаются. Традиционный подход их решения заключается в формировании эмпирик, основанных на математической структуре конкретных задач. Несмотря на то, что этот подход дает приемлимые результаты, он обладает качественным недостатком - для каждой конкретной задачи требуется разработать свой алгоритм, практически неприменимый для других задач.

1.2 QUBO

Основным барьером на пути создания универсального алгоритма для решения задачи комбинаторной оптимизации встают ограничения на множество, по которому ведется поиск. Одним из стандартных способов обойти этот барьер - воспользоваться релаксацией ограничений, предложенной в следующем пособии[3].

Квадратичную оптимизацию с линейными ограничениями вида **равно** и **больше-или-равно** можно переформулировать в оптимизацию со **штрафами**. Таким образом многие задачи комбинаторной оптимизации могут быть сведены к виду:

$$x^T Q_{obj} x + f_{penalty}(x) \rightarrow \min_{x_i \in \mathcal{B}} \quad (1.8)$$

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

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

Рис. 1.3: Список из некоторых ограничений, сводимых к квадратичным штрафам.
Таблица взята из того же пособия[3].

В случае, если удастся представить штраф в виде квадратичной функции, заданной матрицей Q_{eff} , то эта задача сводится к так называемой **Quadratic Unconstrained Binary Optimization**(QUBO[4]):

$$x^T Q_{eff} x \rightarrow \min_{x_i \in \mathcal{B}} \quad (1.9)$$

1.3 Фрустрированные Изинговские Цепочки

Используя замену $x_i = \frac{1+s_i}{2}$, можно показать, что эта задача эквивалентна поиску основного состояния в **модели Изинга**[5] со следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} - \sum_{i=1}^n h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} \quad (1.10)$$

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.

Особенно интересен случай с внешним полем $h = 0$. В таком случае эта задача имеет следующую эмпирику, называемую **local search**(LS)[6]:

Для каждой вершины случайно решаем, в какую сторону направлен спин, а затем переворачиваем один спин за один шаг, улучшая решение на каждом шаге до тех пор, пока улучшение возможно.

Неожиданно, но подобный алгоритм хорошо работает в случаях простых физических задач. К сожалению, на практике встречаются и задачи, в которых этот подход быстро сходится к локальному минимуму и останавливается. Одним из качественных примеров являются **фрустрированные Изинговские цепочки**[7].

Фрустрацией цепочки называют ситуацию, когда геометрия связей такова, что невозможно направить спины, одновременно обеспечивая локальный минимум энергии на всех связях.

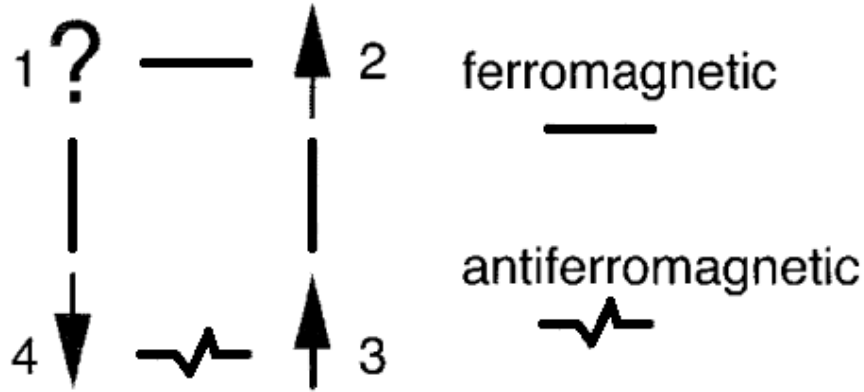


Рис. 1.4: Пример фрустрированной цепочки. Независимо от того, куда направлен первый спин, на одной из его связей не будет минимума энергии, а все остальные связи будут иметь минимальную энергию.

Задача о поиске основного состояния в подобных системах крайне трудна для классических алгоритмов. Наиболее распространенным является метод **ветвей и границ**, который можно назвать умным полным перебором.[7]

Теоретически, квантовые компьютеры могут дать экспоненциальное ускорение для решения подобных задач.[8] К сожалению, современные универсальные квантовые компьютеры слишком маленькие и шумные для применения в этих задачах.[9]

Компромиссным решением является **квантовый отжиг**[10] и **тензорные сети**[11] для классических компьютеров. В отличие от квантовых компьютеров, эти решения уже существуют и доступны. D-wave предоставляет облачный доступ к своему компьютеру[12], а для тензорных сетей написана библиотека ttpy[13].

Глава 2

Постановка задачи

Как было сказано выше, задача по поиску основного состояния фрустрированных цепочек Изинга крайне сложна для классических алгоритмов. При этом квантовый компьютер d-wave показывает свою эффективность на этом классе задач[14]. Другим, эффективным на задачах с большим кол-вом локальным минимумов алгоритмом, является TT-cross[15] - метод, показавший свою эффективность в задачах с большим кол-вом локальных экстремумов, например в задачах докинга белков[16].

Для двух этих подходов было интересно провести их сравнительный анализ. В качестве тестовой задачи было взято отыскания основного состояния для следующей фрустрированной цепочки Изинга:

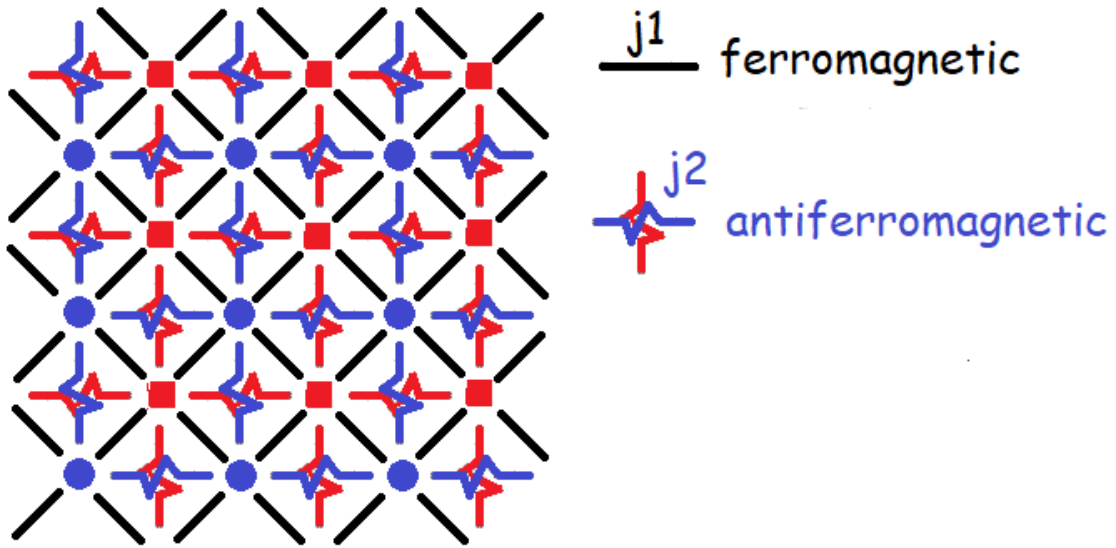


Рис. 2.1: Решетка для тестовой задачи. Она состоит из двух антиферромагнитных подрешеток с энергией взаимодействия j_2 , сдвинутых на пол-периода, взаимодействующих друг с другом ферромагнитным образом с энергией j_1 .

В зависимости от отношения $\frac{j_2}{j_1}$ меняется и поведение системы. При $\frac{j_2}{j_1} \rightarrow 0$ решетка обладает ферромагнитными свойствами, а при $\frac{j_2}{j_1} \rightarrow \infty$ антиферромагнитными. Именно наличие двух фаз и делает конкретно эту задачу сложной и интересной.

Так как квантовый отжигатель d-wave именно физический решатель, а не алгоритм, то помимо самого качества решения интересны и потенциальные источники ошибок.

Тогда поставленную задачу можно сформулировать следующим образом:

1. Провести на квантовом отжигателе d-wave эксперимент по поиску основного состояния тестовой цепочки Изинга при разных параметрах $\frac{j_2}{j_1}$.
2. Используя тензорно-сетевой подход TT-cross рассчитать основное состояние тестовой цепочки Изинга с параметрами из п.1
3. Провести сравнительный анализ качества решений, оценить характерную ошибку, выделить область параметров с аномалиями в решении.
4. На базе тензорной библиотеки ttpu разработать метод исследования квантового отжига и локализовать с его помощью источник ошибок d-wave.

В дальнейшем, полученные результаты можно применить не только к непосредственному решению задач оптимизации тензорными сетями, но использовать их для исследования квантового отжига. В случае, если источник ошибок не удастся локализовать, полученные результаты все еще будет возможно применить при адаптивном отжиге, ускорив его, и уменьшив кол-во ошибок в решении.

Глава 3

Обзор существующих решений

3.1 Метод Ветвей и Границ

Классическим методом решения подобных задач выступает, по сути, умный полный перебор. Одним из самых распространенных алгоритмов подобного толка является **метод ветвей и границ**.

Суть метода заключается в том, что в процессе перебора отбрасываются подмножества допустимых решений, среди которых не содержится оптимальных решений. Алгоритм состоит из двух фаз - **ветвления** и **ограничения**.

В первой фазе алгоритм сначала разбивает имеющееся множество допустимых значений на подмножества. Во второй фазе алгоритм проводит оценку оптимума для каждого подмножества по отдельности. Если для какого-то из рассматриваемых подмножеств оценка снизу оказывается хуже, чем уже существующая оценка сверху, то это множество выбрасывается из рассмотрения, а для одного из подмножеств, которое еще не было исследовано алгоритм применяется по рекурсии.

Для определения следующего подмножества в основном применяются две схемы: одновременного (многостороннего) и одностороннего ветвления. При одновременном ветвлении алгоритм может быть применен к любому подмножеству. Зачастую выбирают подмножество, обладающее наилучшей оценкой снизу из всех имеющихся.

При одностороннем ветвлении способ выбора следующего подмножества известен. Без ограничения общности можно считать, что на следующем рисунке они расположены слева. Важно, что в таком случае нет необходимости хранить все разбиения, что позволяет сэкономить используемую память.

Несмотря на то, что перебор идет только по представляющей интерес области, метод ветвей и границ все еще является алгоритмом перебора. Таким образом на средней задаче подобный подход все еще дает экспоненциально большое время работы. Хотя на практике этот алгоритм работает, теоретически метод ветвей и границ является "медленным".

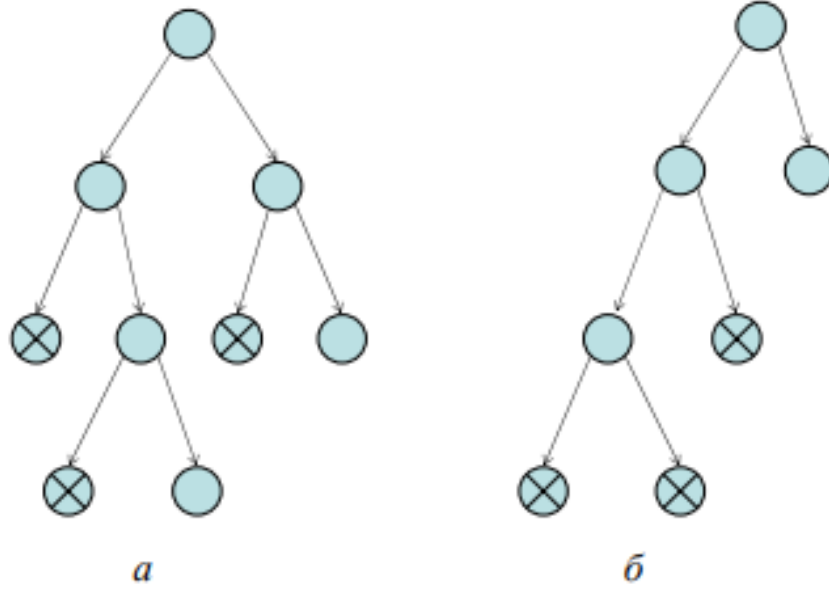


Рис. 3.1: Разбиения множеств решений (ветвление) удобно представлять в виде дерева решений. На рисунке приведены примеры одновременной (а) и односторонней (б) схем ветвления. Каждая вершина дерева соответствует некоторому подмножеству решений. Зачеркнутыми вершинами обозначены подмножества, вычеркнутые из рассмотрения.

Иллюстрация взята с <http://math.nsc.ru/>

3.2 Квантовый Отжиг

Как было сказано ранее, d-wave предоставляет доступ к своему квантовому отжигателю всем желающим.[12] Их компьютер представляет из себя набор сверхпроводящих кубитов, соединенных друг с другом каплерами и помещены в контролируемое поперечное поле при нулевой температуре. Гамильтониан этой системы можно записать следующим способом[17]:

$$\hat{H}(t) = \underbrace{-A \left(\frac{t}{\tau} \right) \sum_{i=1}^n \hat{\sigma}_x^{(i)}}_{\text{начальный гамильтониан}} - \underbrace{B \left(\frac{t}{\tau} \right) \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} + \sum_{i=1}^n h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} \right)}_{\text{гамильтониан задачи}} \quad (3.1)$$

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 $A(1) \ll B(1)$.

При квантовом отжиге, в момент времени $t = 0$ система находится в основном состоянии начального гамильтониана. По мере отжига, начальный гамильтониан плавно заменяется на гамильтониан задачи.

В идеале, система остается в основном состоянии на протяжении всего процесса квантового отжига, так что в конце мы получаем минимум для решаемой задачи.

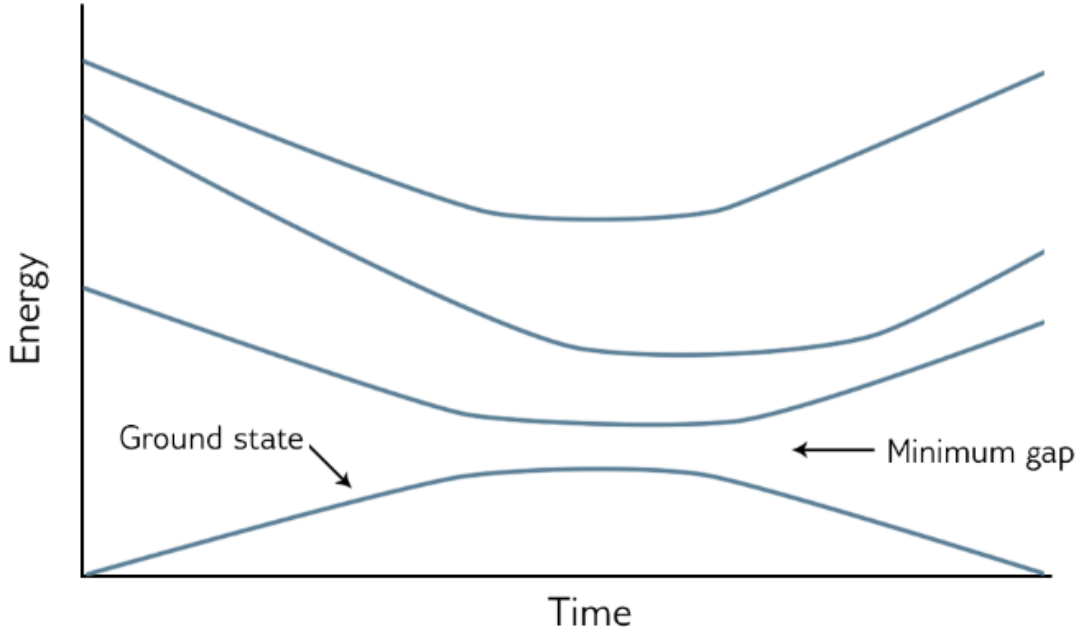


Рис. 3.2: Схематичный график уровней энергии от времени. В начальном гамильтониане основное состояние хорошо отделено от остальных, поэтому система быстро в него релаксирует. По мере перехода от начального гамильтониана к гамильтониану задачи, возбужденные уровни энергии могут приближаться к основному. Минимальное расстояние, на которое они приближаются в течении отжига, называется щелью. Взято с [17].

Как было сказано выше, квантовый отжиг базируется на предположении, что при плавной замене гамильтонианов основное состояние переходит в основное состояние. Это предположение имеет строгую формулировку, и называется Адиабатической Теоремой[18].

Теорема 1 (Адиабатическая Теорема) Пусть $\hat{H}(s)$ гамильтониан, непрерывно меняющийся на $\frac{t}{\tau} = s \in [0,1]$, где τ - время отжига. Так же пусть основное состояние не вырождено на интервале $[0,1]$, тогда

$$\| |\Psi(T)\rangle - |\psi_{adiabatic}(T)\rangle \| \rightarrow 0 \text{ при } T \rightarrow \infty \quad (3.2)$$

где $|\Psi(t)\rangle$ - решение уравнения Шредингера при условии $|\Psi(0)\rangle = |\psi_{ground}(0)\rangle$, $|\psi_{adiabatic}(t)\rangle = \exp(i\theta(t)) \exp(i\gamma(t)) |\psi_{ground}(0)\rangle$, а

$$\theta = - \int_0^t E_{ground}(t') dt' - \text{геометрическая фаза} \quad (3.3)$$

$$\gamma = \int_0^t i \langle \psi_{ground}(t') | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_{ground}(t') \rangle dt' - \text{фаза Берри} \quad (3.4)$$

К сожалению, существуют задачи, в которых основное состояние вырождается.[19] В таком случае адиабатическая теорема нарушается, а наивный квантовый отжиг с использованием поперечного поля может не подходить для поиска основного состояния.

Несмотря на то, из-за эффект Яна—Теллера[20] в реальной системе всегда появляется возмущение, снимающее вырождение основного состояния, полученная при таком снятии вырождения щель может оказаться крайне мала. В таком случае отжиг должен будет продолжаться неопределенно долго.

3.3 Крестовая Аппроксимация и DMRG

Помимо стандартных методов, по типу метода ветвей и границ, имеющих экспоненциальную асимптотику, и квантового отжига, требующего доступ к специфичному оборудованию, существуют и альтернативные методы.

Тензорно-сетевые алгоритмы, изначально спроектированные для симуляции квантовых систем, могут так же быть применены и для симуляции работы квантовых компьютеров. А значит и решаемым квантовыми компьютерами задачам.

Тензорные сети оказались невероятно важной техникой в изучении систем конденсированной материи[21]. Тензорные сети обеспечивают вариационные классы состояний, которые могут быть описаны малым кол-вом параметров. Например, минимизируя энергию в одном из этих классов, можно многое узнать о низкоэнергетическом поведении некоторой физической системы, представляющей интерес.

3.3.1 Тензорные Сети

Вместе с размером квантовой системы, размер Гильбертова пространства, описывающего систему, растет вместе с ней экспоненциально быстро. Этот экспоненциальный рост называют проклятием размерности. Именно это проклятие размерности является самым большим барьером на пути численного изучения многочастичных квантовых систем.

В общем случае это проклятие препятствует эффективному описанию состояний, не давая хранить его в памяти компьютера. Несмотря на это, физически значимые состояния часто обладают дополнительной структурой, упрощающей их описания, что позволяет эффективно записывать их.


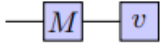
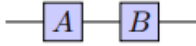

Conventional	Einstein	TNN
$\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle$	$x_\alpha y^\alpha$	
$M\vec{v}$	$M^\alpha_\beta v^\beta$	
AB	$A^\alpha_\beta B^\beta_\gamma$	
$\text{Tr}(X)$	X^α_α	

Рис. 3.3: В дальнейшем будут использованы следующие обозначения. Цветные квадраты обозначают тензоры. Черные линии, ведущие из квадратов обозначают индексы. В случае, если линии соединены, то по этим индексам идет суммирование.

Взято из [22].

Так как в случае системы кубитов состояния и операторы описываются как поли-вектора и поли-операторы соответственно, их можно представить в следующем виде:

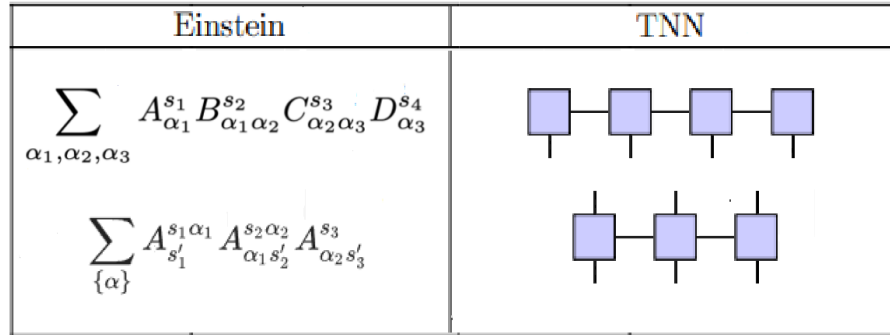


Рис. 3.4: Разложение поли-вектора и поли-оператора в тензорные сети. Подобные разложения называются **Matrix Product State** и **Matrix Product Operator** соответственно. Как нетрудно заметить, если размерности всех индексов сохраняются, то подобное разложение занимает $O(N)$ памяти, где N - кол-во кубитов в системе.

Подобное представление операторов не только позволяет записывать состояния, используя линейную память, но так же предоставляет быстрые алгоритмы по вычислению скалярного произведения:

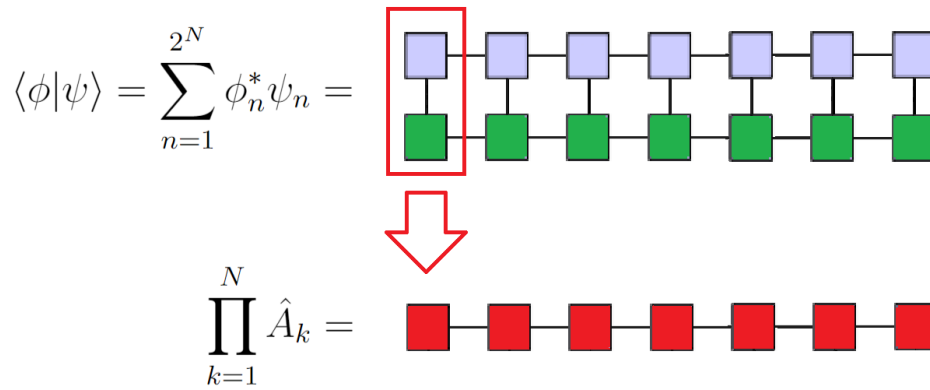


Рис. 3.5: Алгоритм для быстрого скалярного произведения двух MPS. Если умножать 2 вектора *в лоб*, то придется посчитать 2^N слагаемых. Если же воспользоваться структурой MPS, то поменяв порядок свертки, возможно свести задачу к произведению N матриц. Посчитать подобное произведение можно за $O(N)$, что оказывается гораздо быстрее, чем $O(2^N)$. Таким образом **MPS** и **MPO** позволяют не только записать вектора и операторы за **линейную** память, но и умножать их друг на друга за **линейное** время.

3.3.2 DMRG

Теперь рассмотрим задачу о поиске основного состояния гамильтониана \hat{H} :

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \rightarrow \min \quad (3.5)$$

Очевидно, что в общем случае эта задача крайне трудна, и требует экспоненциально много памяти. Как было сказано ранее, на практике гамильтонианы и состояния требуют гораздо меньше параметров для задачи, и часто допускают представление в виде MPS и MPO соответственно.

В таком случае можно применить метод **Density Matrix Renormalization Group**[23]. Не вдаваясь в историю названия сформулируем метод. Сначала переформулировав задачу в терминах тензорных сетей получаем:

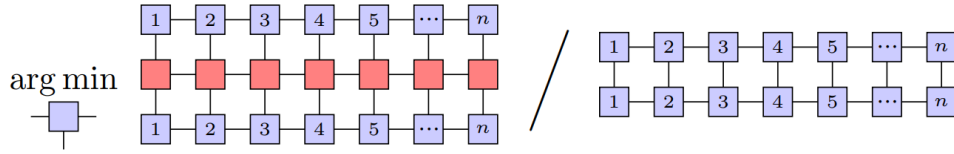


Рис. 3.6: Символьная запись задачи по поиску основного состояния в обозначениях тензорных сетей. Взято с [22]

Сложность заключается в том, что оптимизируемая функция существенно нелинейна. Однако, если зафиксировать все тензоры в разложении вектора, кроме одного, то полученная задача получается всего-лишь квадратична. В таком случае она уже решается крайне эффективно.

Последовательно оптимизируя маленькие тензоры, зафиксировав все остальные, мы можем эффективно найти среди MPS состояние с минимальной энергией. В случае, если реальный оптимум можно было представить как такое состояние, то полученный результат является хорошей аппроксимацией искомого состояния.

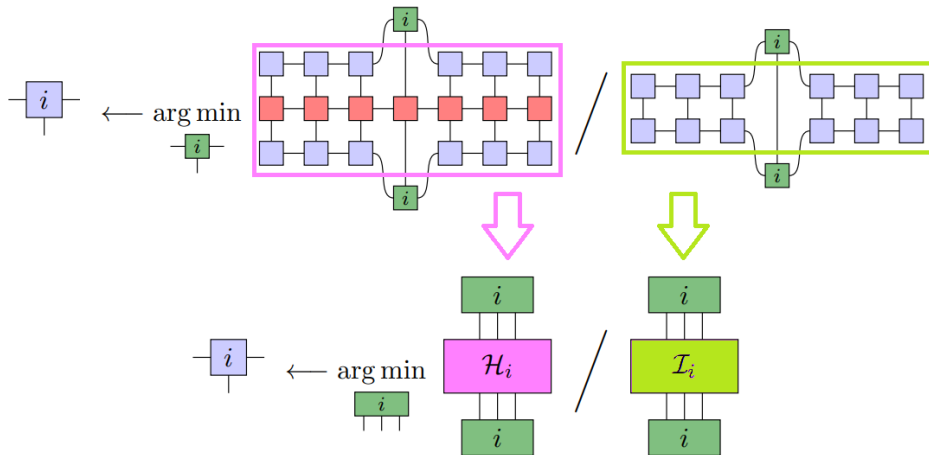


Рис. 3.7: Иллюстрация к DMRG. Вместо оптимизации по всем параметрам сразу, решают задачу последовательной оптимизации. В случае, если тензор по-правильному свернуть, эту задачу можно свести к поиску обобщенных собственных чисел для матриц малых размеров.

3.3.3 TT-cross

Вышеизложенный алгоритм позволяет находить основное состояние для произвольного гамильтониана, раскладываемого в МРО. В случаях, когда гамильтониан диагонален, данный метод становится крайне избыточным.

В таком случае вместо того, чтобы искать суперпозицию всех базисных состояний, можно найти конкретное базисное состояние, минимизирующее энергию. Тогда и энергию системы, вместо билинейной функции можно представить как псевдо-булеву $f : \{0,1\}^N \rightarrow \mathbb{R}$, а на ее основе сформулировать состояние $|f\rangle = \sum_{\{b\}} f(b_1 \dots b_N) |b_1 \dots b_N\rangle$.

Для того, чтобы получить этот вектор, нам бы пришлось посчитать все 2^N значений функции и записать их в таблицу. Вместо этого давайте сразу будем искать приближение этого вектора среди MPS. В таком случае нам потребуется только $O(N)$ обращений к функции, при этом минимум этой функции будет найден в процессе построения этого приближения.

Метод такого построения базируется на крестовой аппроксимации:

Незаслуженно малоизвестный факт:
Матрицу ранга r можно восстановить по r
столбцам и r строкам.

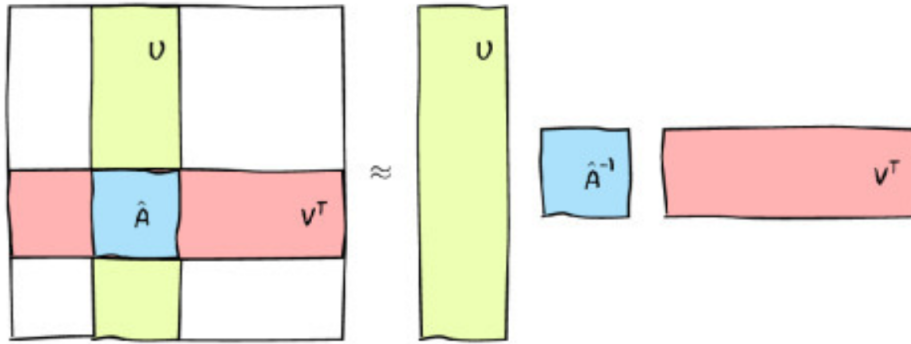


Рис. 3.8: Взято из выступления Ивана Оселедца на Data Fest 2016.

Для наибольшей точности приближения необходимо, чтоб матрица на пересечении строк и столбцов обладала максимальным модулем детерминанта, т.е. объемом.

К сожалению, в такой постановке задача об отыскании аппроксимации становится гораздо дольше, чем SVD-разложение с асимптотикой $O(M^3)$, где $M \times M$ - размер матрицы. Для решения этой проблемы был разработан алгоритм **MaxVol**[24].

Этот итерационный алгоритм не просто работает за $O(M)$, что существенно быстрее SVD разложения, но и содержит субоптимум в матрице, на пересечении выбранных строк и столбцов. Применив этот метод к декомпозиции нашего вектора $|f\rangle$ мы получим сложность $O(2^{\frac{N}{2}})$, что все еще неприемлемо долго.

Следующим шагом стало обобщение этого подхода для декомпозиции вектора в тензорный поезд. Для этого полученные матрицы из строк и столбцов деформировали в новые матрицы, для которых вновь применяли этот алгоритм.

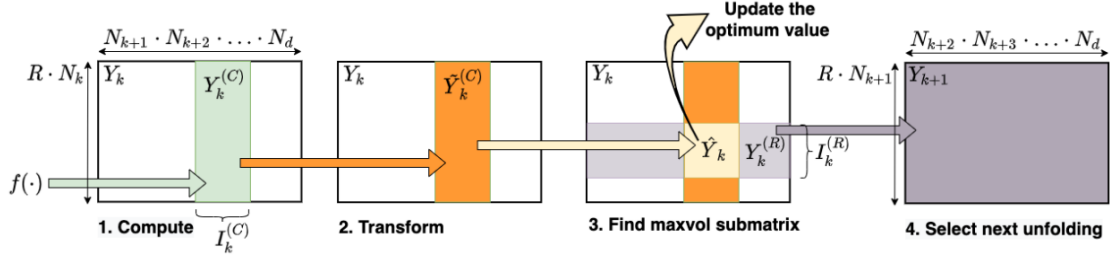


Рис. 3.9: Схематическая работа TT-CROSS.[25] Выбирается некий гиперпараметр

R , отвечающий за максимальный ранг связи в разложении. Вначале берется матрица размера $2R \times 2^{N-1}$, в ней фиксируются R строк. В полученной матрице $R \times 2^{N-1}$ делают один шаг алгоритма maxvol, затем полученные столбцы пересобирают в матрицу $2R \times 2^{N-2}$. Пройдя до края, алгоритм транспонирует матрицу, и не трогая первые выбранные строки обновляет столбцы.

После детального анализа получаем, что один шаг алгоритма занимает $O(NR^2)$ времени и требует $O(NR^3)$ обращений к оракулу, где R - гиперпараметр, отвечающий за максимальный ранг. К сожалению, вопрос как выбирать R все еще открыт.

Если выбрать его слишком маленьким, то это скажется на качестве найденного субоптимума, если выбрать его из теоретических соображений, то он часто получается экспоненциально большим, что критично снижает эффективность алгоритма.

В дальнейших экспериментах для решетки из $N = 49$ спинов было использовано значение $R = 10$, хотя из аналитического разложения для гамильтониана следовало, что $R = N^2 = 2500$, что несколько больше использованного гиперпараметра.

Глава 4

Исследование и построение решения задачи

4.1 Поиск Основного Состояния Цепочки

Для исследования основного состояния цепочки Изинга был выбран размер 7×7 . Задача все еще достаточно большая, чтоб плохо решаться наивными подходами, при этом все еще достаточно маленькая, чтоб ее без проблем можно было поместить в отжигатель d-wave с его специфичной топологией связности кубитов.

Для подобной решетки была измерена энергия основного состояния при разных отношениях $j_2/j_1 \in [0,1]$. Из соображений удобства отладки был выбран шаг 0.01. Кол-во запусков квантового отжигателя определялся из желания израсходовать все доступное время использования квантового компьютера. В итоге для каждой точки было произведено 23 запуска. Результаты запусков были отсортированы по точкам и нанесены на график ниже.

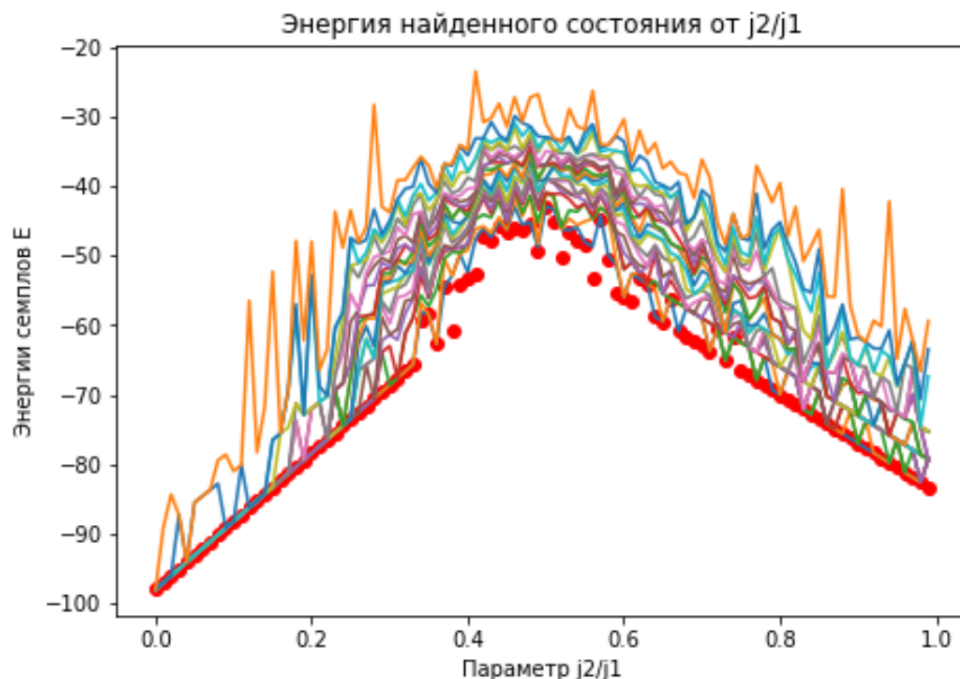


Рис. 4.1: График со статистикой по запускам квантового отжигателя d-wave. Жирными красными точками отмечены минимумы среди всех запусков с заданным отношением j_2/j_1 .

Для решения этой же задачи была использована реализация TT-cross из библиотеки[13]. Несмотря на то, что у аналитического разложения гамильтониана в МРО был ранг $R_{theor} = 2500$, практика показала, что при $R = 10$ алгоритм уже достигал встроеного условия остановки без эксцессов. Результаты его работы так же нанесены на следующий график.

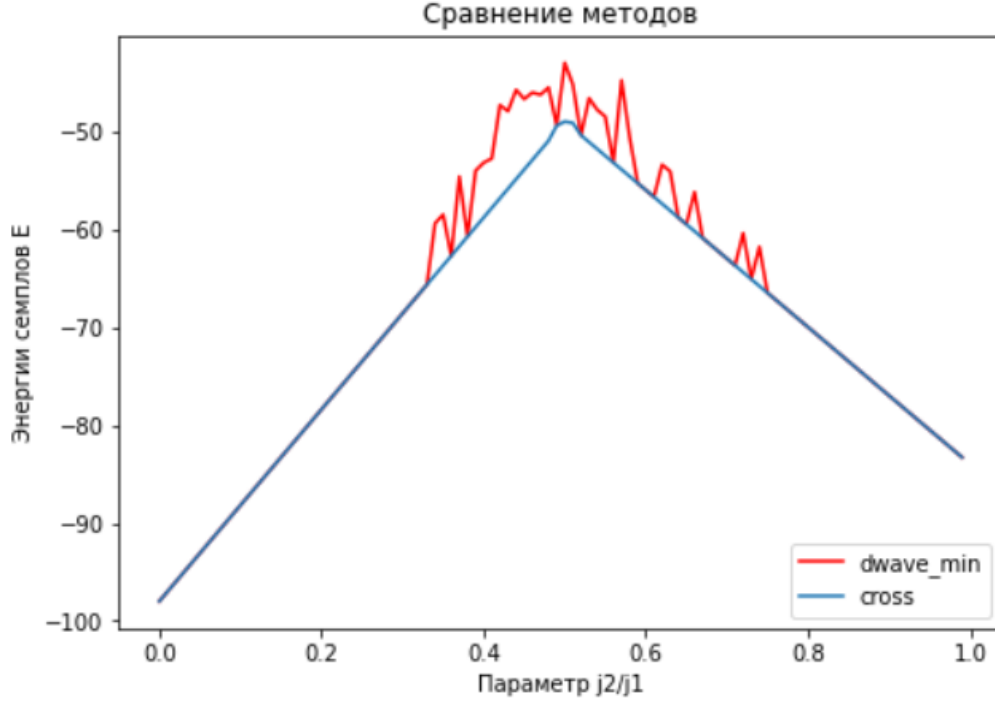


Рис. 4.2: Сравнение качества решения d-wave и TT-cross. Красным отмечен лучший из запусков d-wave, синим отмечен результат работы TT-cross.

Как видно из графика, в области $j_2/j_1 \in [0.4, 0.5]$ наблюдается аномально большая ошибка, которая скорее всего связана с какими-то физическими процессами, происходящими в этот момент в системе. Природа данного явления не очевидна, и требует дальнейшего исследования.

4.2 Гипотеза 1. Вырождение во Время Отжига

Потенциальным событием, при котором может происходить такой качественный рост ошибки, является вырождение основного состояния во время отжига. Как было сказано ранее, подобные задачи могут встретиться на практике. Для проверки этой гипотезы был разработан метод на базе TT-cross и DMRG. Принцип работы можно описать следующей последовательностью шагов:

1. Генерируем начальный гамильтониан $\hat{H}_0(j_2/j_1)$ через TT - cross
2. Для всех интересующих полей h считаем основное состояние для $\hat{H} = \hat{H}_0 + h\hat{H}_x$, получая энергию основного состояния E_0 и само основное состояние $|\psi_0\rangle$
3. Энергия $n+1$ уровня находится по индукции как энергия основного состояния гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + h\hat{H}_x + \alpha \sum_{k=0}^n |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$, где $\alpha : \forall k \leq n \mapsto \langle \psi_{n+1} | \psi_k \rangle = 0$

С использованием вышеизложенного алгоритма был проведен анализ профиля уровней энергии системы при $j_2/j_1 = 0.425$. Измерения первых трех уровней энергии происходили при полях $h \in [-0.6, 0]$. Из соображений удобства отладки был выбран шаг 0.006. График с уровнями энергии представлен ниже.

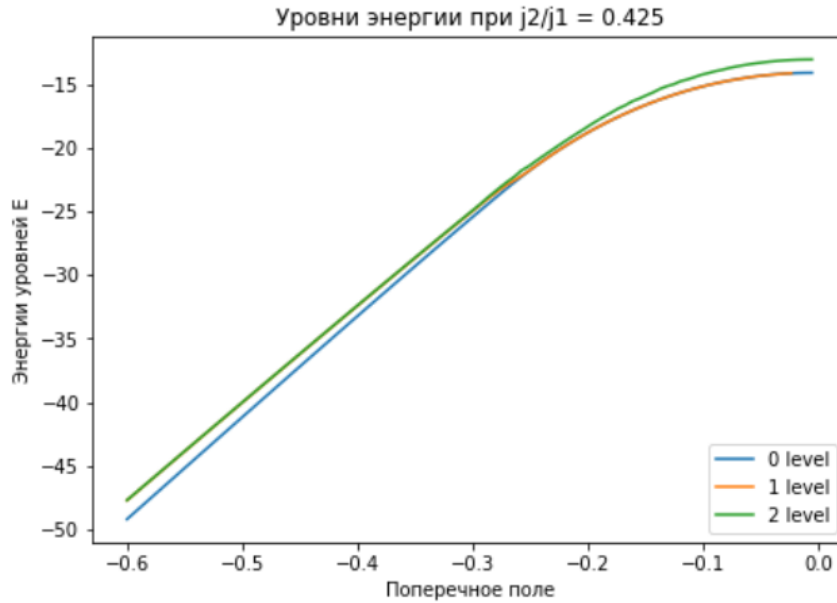


Рис. 4.3: Уровни энергии первых трех уровней в процессе отжига.

Как видно из динамики уровней энергии, при больших полях влияние гамильтониана задачи пренебрежимо, и кубиты ведут себя как свободные спины во внешнем поле, и основное состояние не вырождено. В случае же нулевого поперечного поля основное состояние 2-ды вырождено, т.к. задача это цепочка Изинга без внешнего поля. В течении отжига гарантированно происходит вырождение, но на таком масштабе трудно об этом сказать. Для дальнейшего анализа построим график разностей энергий.

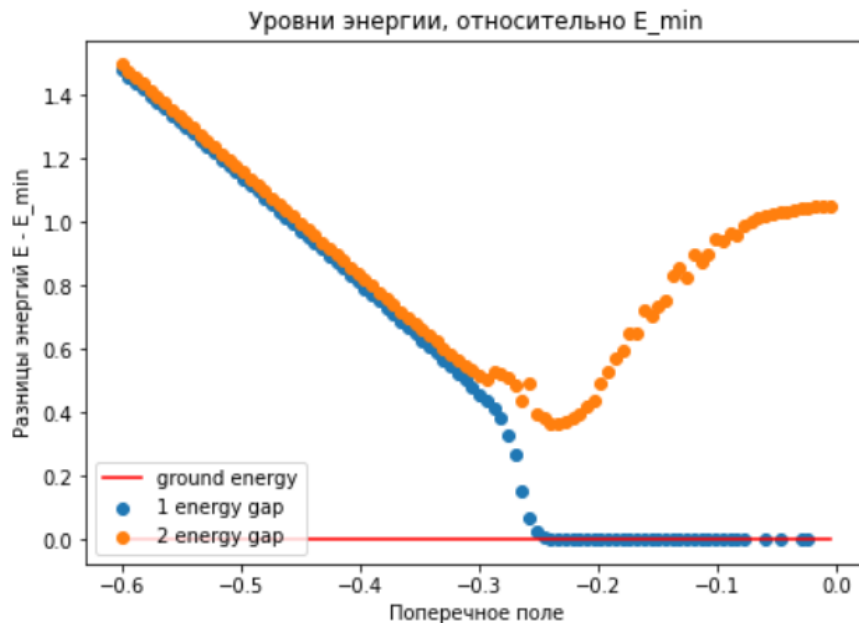


Рис. 4.4: Разницы энергии первых трех уровней в процессе отжига.

Как видно из графика, хоть первый возбужденный уровень вырождается с основным, это не должно приносить ошибки, т.к. после касания они становятся равны. В таком случае, независимо от того, как между ними распределяются населенности, итоговая энергия не должна меняться. Так же можно заметить, что 1 и 2 уровни энергии равны при сильном поперечном поле, а затем расходятся. К сожалению, пока они равны, их населенность равна нулю, а их расхождение начинается раньше, чем начинают приближаться 1 и основной уровни энергии. Таким образом вырождение в течении отжига не может быть причиной такой качественной ошибки.

4.3 Гипотеза 2. Влияние фазового перехода

Как было сказано при постановке задачи, цепочка из тестовой задачи обладает разными свойствами при $j_2/j_1 \rightarrow \infty, 0$. Не смотря на это свойство, неясно, обладает ли эта система фазовым переходом. При этом из курса статистической физики известно, что в окрестности фазового перехода второго рода оказываются аномально высокими.

Для проверки этой гипотезы была измерена спонтанная поляризация d-wave при разных значениях параметра j_2/j_1 и нанесена на один график вместе с относительной ошибкой с графика 4.2.

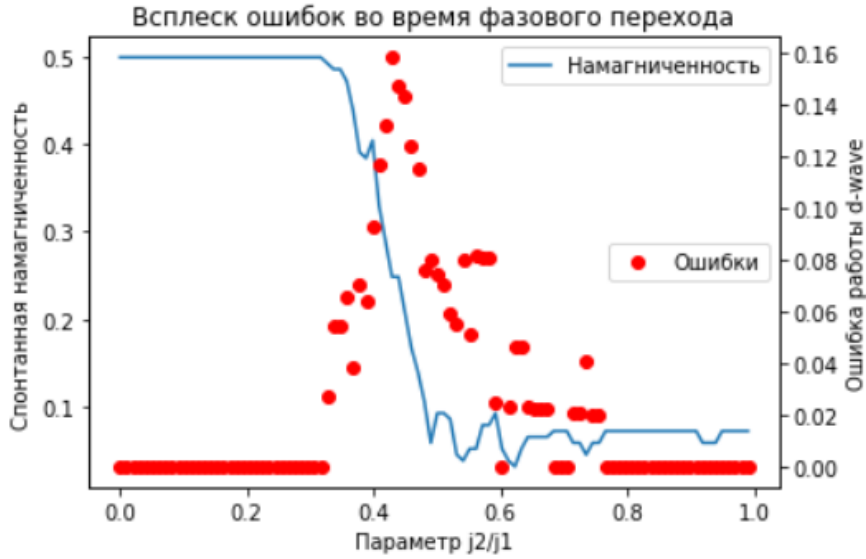


Рис. 4.5: Спонтанная намагниченность и уровень ошибок в зависимости от параметра j_2/j_1 . Как можно заметить, они обладают некой скореллированностью.

Несмотря на то, что явление резкого изменения спонтанной намагниченности часто связано с фазовым переходом второго рода, подобный график не позволяет сделать вывод о типе перехода. Очевидно лишь то, что в окрестности резкого скачка происходят некоторые процессы перехода, приводящие к качественному росту ошибок.

Глава 5

Заключение

Подведем итоги проделанной работы:

1. В данной работе был проведен эксперимент по поиску основного состояния фрустрированной цепочки Изинга через квантовый отжиг.
2. Для этой же задачи была проведена эмуляция с использованием тензорно-сетевых подходов.
3. В результате сравнения полученных экспериментальных данных с симуляцией были выдвинуты две гипотезы об их источнике:
 - (а) вырождение основного уровня энергии в процессе отжига
 - (б) аномально-большие флуктуации в окрестности фазового перехода
4. Для проверки гипотезы об вырождении основного состояния в процессе квантового отжига был разработан эффективный метод для его симуляции.
5. Для проверки гипотезы о флуктуациях был проведен эксперимент по измерению спонтанной намагниченности модели Изинга при изменении параметров цепочки.
6. Полученные данные позволили отметить гипотезу а) и дали веские аргументы в пользу гипотезы б)

Так же имеет ценность обозначить полученные выводы и потенциальные применения результатов:

1. Тензорные сети также оказались достаточно эффективны в поиске основного состояния в больших “не-классических” системах, чтоб соревноваться с специализированным вычислителем.
2. Информация об уровнях энергии, которые дает разработанный подход, может ускорить оптимизацию через адаптивный отжиг.
3. В процессе работы с тензорными сетями было обнаружено, что еще не разработано библиотек, которые одновременно поддерживали сложные алгоритмы по типу DMRG и TT-cross, и при этом использовали GPU.
4. Вышеупомянутый TT - cross потенциально применим в задачах псевдо-булевой оптимизации без ограничений, класс которых гораздо шире, чем QUBO.

Литература

- [1] *Argun, Irem Duzdar*. An Overview on Set Covering Problems With a Focus on Military Applications / Irem Duzdar Argun // Operations Research for Military Organizations. — 2019.
- [2] *C. A. Floudas, P. M. Pardalos*. Traveling Salesman Problem / P. M. Pardalos C. A. Floudas // Encyclopedia of Optimization (2nd ed.). — Springer, 2009.
- [3] *Glover, Fred*. A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models / Fred Glover, Gary Kochenberger, Yu Du // *arXiv.org*. — 2019.
- [4] *Kochenberger G., Hao JK. Glover F.* The Unconstrained Binary Quadratic Programming Problem: A Survey. / Hao JK. Glover F. Kochenberger, G. // *Comb Optim 28*, 58–81. — 2014.
- [5] *Ashkan Shekaari, Mahmoud Jafar*. Theory and Simulation of the Ising Model / Mahmoud Jafar Ashkan Shekaari // *arXiv.org*. — 2021.
- [6] *Williamson, David P.* Greedy Algorithms and Local Search / David P. Williamson, David B. Shmoys // The Design of Approximation Algorithms. — Cambridge University Press, 2011.
- [7] *Alexander K. Hartmann, Heiko Rieger*. Approximation Methods for Spin Glasses / Heiko Rieger Alexander K. Hartmann // Optimization Algorithms in Physics. — Wiley-VCH, 2002.
- [8] *Ehsan Zahedinejad, Arman Zaribafiyani*. Combinatorial Optimization on Gate Model Quantum Computers: A Survey / Arman Zaribafiyani Ehsan Zahedinejad // *arXiv.org*. — 2017.
- [9] Noisy intermediate-scale quantum algorithms / Kishor Bharti, Alba Cervera-Lierta, Thi Ha Kyaw et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2022. — Vol. 94. — P. 015004.
- [10] *Kadowaki, Tadashi*. Quantum annealing in the transverse Ising model / Tadashi Kadowaki, Hidetoshi Nishimori // *Phys. Rev. E*. — 1998. — Nov. — Vol. 58. — Pp. 5355–5363.
- [11] *Orús, Román*. A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states / Román Orús // *Annals of Physics*. — 2014. — Vol. 349. — Pp. 117–158.
- [12] D-wave leap. Облачный Доступ К Квантовому Компьютеру d-wave. <https://cloud.dwavesys.com/leap/>.
- [13] Библиотека для работы с тензорными поездками, python. <https://github.com/oseledets/ttpy>.

- [14] *King A.D., Raymond J. Lanting T. et al.* Scaling advantage over path-integral Monte Carlo in quantum simulation of geometrically frustrated magnets. / Raymond J. Lanting T. et al. King, A.D. // *Nature Communications*. — 2021. — Vol. 12. — P. 1113.
- [15] *Oseledets, Ivan.* TT-cross approximation for multidimensional arrays / Ivan Oseledets, Eugene Tyrtyshnikov // *Linear Algebra and its Applications*. — 2010. — Vol. 432, no. 1. — Pp. 70–88.
- [16] *Д.А. Желтков И.В. Офёркин, Е.В. Каткова А.В. Сулимов В.Б. Сулимов Е.Е. Тиртышников.* TTDock: Метод Докинга на Основе Тензорного Поезда / Е.В. Каткова А.В. Сулимов В.Б. Сулимов Е.Е. Тиртышников Д.А. Желтков, И.В. Офёркин // *Вычислительные Методы и Программирование*. — 2013. — Vol. 14. — Pp. 279–291.
- [17] QPU Solver Datasheet. https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_gs_2.html#id2.
- [18] *Sakurai J., Napolitano J.* Adiabatic Approximation / Napolitano J. Sakurai, J. // *Modern Quantum Mechanics* (3rd ed.). — Cambridge University Press, 2020.
- [19] *Matsuda, Yoshiki.* Quantum annealing for problems with ground-state degeneracy / Yoshiki Matsuda, Hidetoshi Nishimori, Helmut Katzgraber // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2009. — Vol. 143. — P. 012003.
- [20] *Bates, C.A.* Jahn-Teller effects in paramagnetic crystals / C.A. Bates // *Physics Reports*. — 1978. — Vol. 35, no. 3. — Pp. 187–304.
- [21] *D. Perez-Garcia F. Verstraete, M.M. Wolf J.I. Cirac.* Matrix Product State Representations / M.M. Wolf J.I. Cirac D. Perez-Garcia, F. Verstraete // *arXiv.org*. — 2007.
- [22] *Jacob C. Bridgeman, Christopher T. Chubb.* Hand-waving and Interpretive Dance: An Introductory Course on Tensor Networks / Christopher T. Chubb Jacob C. Bridgeman // *arXiv.org*. — 2017.
- [23] *White, Steven R.* Density matrix formulation for quantum renormalization groups / Steven R. White // *Phys. Rev. Lett.* — 1992. — Vol. 69. — Pp. 2863–2866.
- [24] *S. A. Goreinov I. V. Oseledets, D. V. Savostyanov.* How to find a good submatrix / D. V. Savostyanov S. A. Goreinov, I. V. Oseledets // *Matrix Methods: Theory, Algorithms, Applications* / Ed. by V. Olshevsky, E. Tyrtyshnikov. — World Scientific, 2010. — P. 247–256.
- [25] *Artyom Nikitin Andrei Chertkov, Rafael Ballester-Ripoll Ivan Oseledets Evgeny Frolov.* Are Quantum Computers Practical Yet? A Case for Feature Selection in Recommender Systems using Tensor Networks / Rafael Ballester-Ripoll Ivan Oseledets Evgeny Frolov Artyom Nikitin, Andrei Chertkov // *arXiv.org*. — 2022.