

КВАНТОВЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОММИВОЯЖЕРА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ ОЦЕНКИ ФАЗЫ И КВАНТОВОГО ПОИСКА

Ч. Цзюньси^a, И. И. Бетеров^{b,a,c,d*}

^a Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия

^b Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

^c Новосибирский государственный технический университет
630072, Новосибирск, Россия

^d Институт лазерной физики Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 15 марта 2023 г.,
после переработки 28 апреля 2023 г.
Принята к публикации 28 апреля 2023 г.

Рассмотрен квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера методом квантовой оценки фазы и квантового поиска. Развивается подход, ранее предложенный для решения этой задачи. Использован один квантовый регистр для кодирования собственных состояний унитарного оператора, фаза которого задает длительность каждого из возможных маршрутов. Для оценки длительности маршрута используется алгоритм квантовой оценки фазы. Затем для нахождения минимальной длительности маршрута измеренные значения длительностей кодируются в состояния второго квантового регистра и проводится поиск оптимального маршрута с помощью модифицированного алгоритма Гровера. Проведено численное моделирование предложенного квантового алгоритма с использованием библиотеки Qiskit для одной и двух итераций модифицированного алгоритма Гровера.

*Статья представлена в рамках публикации материалов конференции
«Физика ультрахолодных атомов» (ФУХА-2022), Новосибирск, декабрь 2022 г.*

DOI: 10.31857/S0044451023080102
EDN:IAZOFF

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача коммивояжера относится к NP (non-deterministic polynomial) трудным задачам оптимизации. Это делает ее интересной для решения с использованием квантовых компьютеров [1]. В последнее время интерес к таким оптимизационным задачам значительно вырос в связи со значительным прогрессом в экспериментальной реализации квантовых процессоров и демонстрации так называемого квантового превосходства, которое заключается в способности квантовых компьютеров решать задачи, которые не могут быть решены с помощью

классических компьютеров [2–4]. Подобный класс NP-трудных задач интересен как для демонстрации квантового превосходства в различных физических системах, так и для практических приложений, например, маршрутизации. Элементарные задачи такого рода могут быть полезны для демонстрации возможностей альтернативных физических систем для квантовых вычислений, например, на основе ультрахолодных ионов или ультрахолодных атомов [5, 6].

Постановка задачи следующая: необходимо найти кратчайший путь через все указанные города с обязательным однократным посещением каждого из городов и возвратом в исходный город. На основе задачи коммивояжера были разработаны различные методы дискретной оптимизации. В работе [7]

* E-mail: betеров@isp.nsc.ru

был предложен квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера на основе квантовой оценки фазы. Было показано, что квантовый алгоритм позволяет достичь квадратичного ускорения в зависимости от числа городов по сравнению с классическим методом полного перебора. В дальнейшем на сайте Qiskit (общедоступной библиотеки для квантовых вычислений с использованием процессоров компании IBM) был опубликован методический материал [8] по решению задачи коммивояжера на основе работы [7]. В то же время решение задачи коммивояжера так и не было доведено до конца, поскольку вместо нахождения оптимального маршрута была получена длительность только одного из возможных маршрутов.

В работе [9] было предложено использовать модифицированный алгоритм Гровера для реализации квантового варианта алгоритма Дейкстры. Мы применили аналогичный подход для решения задачи коммивояжера в варианте, описанном в работе [7] и на сайте Qiskit [8]. Мы использовали один квантовый регистр для кодирования собственных состояний унитарного оператора, фаза которого задает длительность каждого из возможных маршрутов.

Для оценки длительности маршрута используется алгоритм квантовой оценки фазы. Затем для нахождения минимальной длительности маршрута измеренные значения длительностей кодируются в состояния второго квантового регистра и проводится поиск оптимального маршрута с помощью модифицированного алгоритма Гровера. В работе проведено численное моделирование предложенного квантового алгоритма с использованием библиотеки Qiskit для одной и двух итераций модифицированного алгоритма Гровера. Адаптивный алгоритм Гровера был предложен для решения аналогичной задачи в недавней работе [10].

Статья имеет следующую структуру: в разд. 2 рассматривается метод кодирования длительности маршрута в задаче коммивояжера в собственных состояниях унитарного оператора и оценки длительности маршрута методом квантовой оценки фазы. Приводятся оценки фазы маршрутов, полученные в результате численного моделирования с помощью библиотеки Qiskit. В разд. 3 описан модифицированный алгоритм Гровера для поиска минимума в неупорядоченной базе данных [11, 12] и приведена схема его использования для поиска минимальной длительности маршрута. Представлены результаты моделирования одной и двух итераций модифицированного алгоритма Гровера с помощью библиотеки Qiskit.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ МАРШРУТА МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ ОЦЕНКИ ФАЗЫ

Задача коммивояжера может быть представлена на графе, как показано на рис. 1. Каждый узел графа представляет собой город, расстояние между городами не зависит от направления движения. Максимальная длина маршрута может быть нормирована на величину 2π . Следуя работе [7], мы рассмотрели граф из четырех узлов с расстояниями между узлами $\phi_{12} = \pi/2$, $\phi_{13} = \phi_{23} = \phi_{24} = \pi/4$ и $\phi_{14} = \phi_{34} = \pi/8$. Для классического решения задачи следует рассматривать матрицу ϕ_{ij} , составленную из расстояний между узлами i и j . Для квантовой оценки фазы, согласно работе [7], будем использовать в качестве исходных данных матрицу $e^{i\phi_{ij}}$. Идея квантового алгоритма заключается в следующем: если закодировать передвижение между узлом i и всеми остальными узлами j состоянием некоторой квантовой системы, то можно построить действующий на это состояние унитарный оператор, собственное значение которого будет равно $e^{i\phi_{ij}}$. Любой маршрут по замкнутому циклу, проходящий однократно через все узлы графа, можно представить в виде тензорного произведения состояний квантовых систем, кодирующих маршрут между соседними узлами. Тогда можно построить унитарный оператор, являющийся тензорным произведением отдельных унитарных операторов, описывающих длительность маршрута через каждый из узлов. Фаза собственного значения такого унитарного оператора будет описывать длительность всего маршрута.

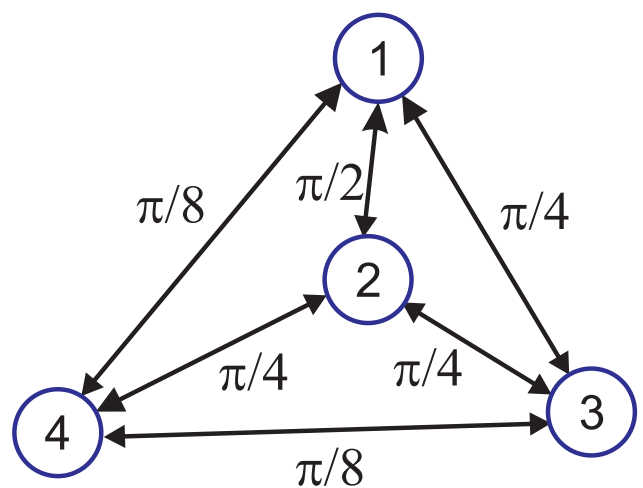


Рис. 1. Иллюстрация задачи коммивояжера на графе. Расстояния между городами $\phi_{12} = \pi/2$, $\phi_{13} = \phi_{23} = \phi_{24} = \pi/4$ и $\phi_{14} = \phi_{34} = \pi/8$ не зависят от направления движения

Таблица. Замкнутые маршруты, соответствующие им собственные состояния и собственные значения

Маршрут	$r(1)-r(2)-r(3)-r(4)$	Собственное состояние	Собственное значение (результат моделирования)	Длительность маршрута
1-2-3-4	4-1-2-3	$ 11000110\rangle$	1001	$\pi + \pi/8$
1-2-4-3	3-1-4-2	$ 10001101\rangle$	1000	π
1-4-2-3	3-4-2-1	$ 10110100\rangle$	0111	$\pi/2 + \pi/4 + \pi/8$

Следуя изложению на сайте Qiskit [8], проиллюстрируем построение квантовых состояний регистра, описывающих определенный маршрут. Определим функцию $i = r(j)$: ее значение i — это номер узла, из которого для данного конкретного маршрута коммивояжер пришел в узел j , т. е. для маршрута, в котором коммивояжер из города 1 попадает в город 2, можно записать $r(2) = 1$. Таким образом, число узлов задает число кубитов, необходимых для кодирования каждого элемента маршрута. Для четырех узлов достаточно задать 2 кубита. Поскольку состояние двух битов принимает значения от 0 до 3, будем кодировать перемещение между соседними узлами с помощью функции $r(j) - 1$. Соответственно, для каждого отдельного узла построим унитарный оператор, описывающий длительность каждого возможного пути из любого соседнего узла, завершающегося в данном узле. Например, для узла 1 этот оператор будет иметь следующий вид:

$$\hat{U}_1 = |00\rangle\langle 00| + e^{i\phi_{21}}|01\rangle\langle 01| + e^{i\phi_{31}}|10\rangle\langle 10| + e^{i\phi_{41}}|11\rangle\langle 11|. \quad (1)$$

Мы исключаем из рассмотрения квантовые состояния, описывающие переходы, для которых начальный и конечный узлы совпадают. Поэтому фаза для собственного состояния $|00\rangle$ оператора \hat{U}_1 может быть произвольной. Аналогичным образом можно закодировать переходы, завершающиеся во всех остальных узлах графа. Для четырех узлов мы получаем, что для кодирования любого маршрута требуется 8 кубитов. Каждый маршрут мы кодируем набором всех переходов между соседними узлами:

$$|r(1) - 1\rangle \otimes |r(2) - 1\rangle |r(3) - 1\rangle |r(4) - 1\rangle. \quad (2)$$

Так, маршрут 1-2-3-4 кодируется состоянием $|11\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle \otimes |10\rangle$. Здесь учтено, что переход замкнут и в узел 1 мы попадаем из узла 4. Унитарный оператор, описывающий длительность цикла, имеет вид

$$\hat{U} = \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2 \otimes \hat{U}_3 \otimes \hat{U}_4.$$

Обратим внимание, что вследствие такой формы определения оператора любой маршрут должен быть записан строго в форме, заданной уравнени-

ем (2), без изменения последовательности отдельных элементов. В частности, маршрут 1-4-2-3 описывается состоянием $|10\rangle \otimes |11\rangle \otimes |01\rangle \otimes |00\rangle$, а приведенное на сайте [6] собственное состояние для такого маршрута записано неверно, что в конечном итоге приводит к ошибочному результату при выполнении алгоритма. Обратим внимание, что в силу замкнутости цикла все маршруты, являющиеся циклической перестановкой узлов, будут иметь одинаковую длительность. Поэтому нам достаточно рассмотреть три маршрута, приведенные в таблице. При выполнении стандартного алгоритма квантовой оценки фазы унитарного оператора результат имеет вид

$$e^{i\phi} = e^{2\pi i\xi},$$

где $\xi = 0, \xi_1, \dots, \xi_t$ — последовательность t битов, полученных при измерении конечного квантового состояния регистра. В таблице приведены длительности маршрутов для графа, показанного на рис. 1, и соответствующие этим длительностям битовые последовательности, задающие собственные значения.

Общая схема использованного нами стандартного квантового алгоритма оценки фазы приведена на рис. 2 для маршрута 1-2-3-4, заданного состоянием $|11000110\rangle$. Мы ограничились минимально возмож-

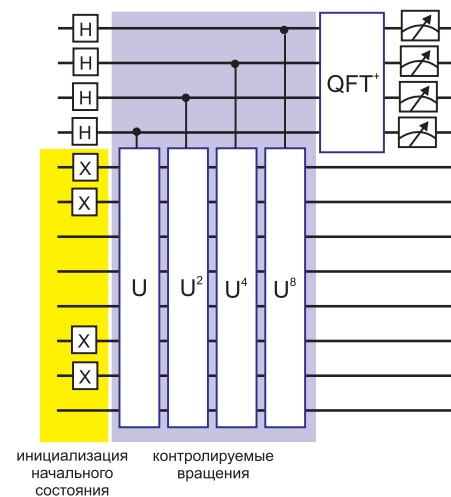


Рис. 2. Схема квантовой оценки фазы для оператора \hat{U} с использованием обратного квантового преобразования Фурье QFT^+ . Маршрут 1-2-3-4 задан состоянием $|11000110\rangle$

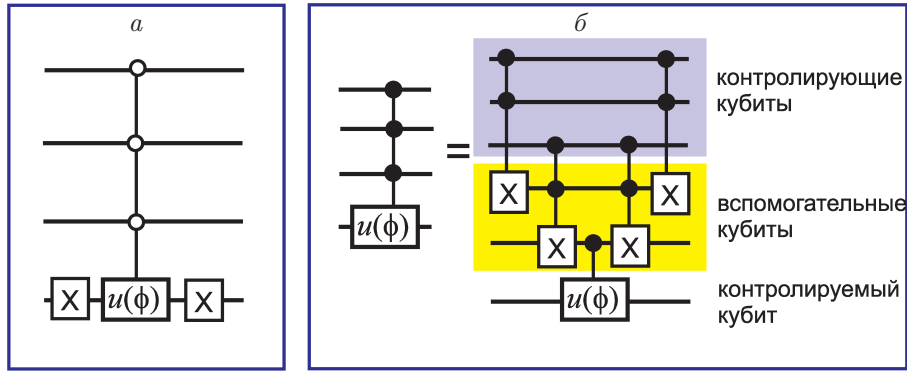


Рис. 3. а) Схема реализации фазового сдвига \hat{I}_φ . б) Схема декомпозиции контролируемой унитарной операции для множества контролирующих кубитов с использованием вентилей Тoffoli [11]

ным числом кубитов для кодирования маршрута (8 кубитов) и собственных значений (4 кубита). Для контролируемого выполнения унитарных операций над регистром мы использовали подход, описанный в работе [7]. Квантовый алгоритм был реализован с помощью библиотеки Qiskit [8]. В результате выполнения алгоритма были получены битовые последовательности, кодирующие собственные значения, которые совпадают с ожидаемыми длительностями маршрута, как видно из таблицы.

3. ПОИСК МИНИМУМА С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ГРОВЕРА

Для решения задачи коммивояжера необходимо из набора имеющихся маршрутов выбрать имеющий минимальную длительность. В работе [9] было предложено для аналогичной задачи использовать модифицированный алгоритм Гровера, известный также как алгоритм Гровера–Лонга [11]. Следуя такому подходу, мы завершили квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера следующим образом: была построена база данных из результатов измерений собственных значений оператора и найдено минимальное значение, представленное в этой базе. Поиск минимального значения проводим следующим образом, описанным в работе [12]:

- 1) кодируем все значения базы данных D в виде суперпозиции всех состояний квантового регистра, значения которых равны элементам этой базы;
- 2) выбираем из несортированной базы данных D случайное значение d_0 ;
- 3) для выбранного значения d_0 строим оракул, помечающий состояния $d \leq d_0$;

- 4) применяем алгоритм Гровера–Лонга для усиления амплитуды помеченных состояний;
- 5) измеряем конечное состояние квантового регистра; если в результате измерений мы получаем значение $d_1 \leq d_0$, то используем его для составления нового оракула.

Алгоритм Гровера–Лонга заключается в следующем: представим начальное состояние регистра в виде суперпозиции всех возможных состояний:

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \hat{W}|0\rangle^{\otimes N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle = \\
 &= \sqrt{\frac{M}{N}} |\psi_{good}\rangle + \sqrt{\frac{N-M}{N}} |\psi_{bad}\rangle. \quad (3)
 \end{aligned}$$

Здесь $|\psi_{good}\rangle$ — решения задачи поиска, $|\psi_{bad}\rangle$ — состояния, которые не являются решением задачи поиска, N — число элементов базы данных, n — число кубитов, M — число элементов базы данных, которые являются решением задачи поиска, \hat{W} — оператор, создающий суперпозицию всех элементов базы данных. В случае, когда $N = 2^n$, создание такой суперпозиции сводится к выполнению вентиля Адамара над каждым кубитом. Но в общем случае число элементов базы данных может быть любым. В рассмотренном нами случае база данных состоит из трех элементов, и построение суперпозиции всех возможных значений выполняется с помощью схемы, аналогичной представленной в работе [12].

Для решения задачи поиска вводится итерация Гровера

$$\hat{G} = -\hat{W}\hat{I}_0\hat{W}^{-1}\hat{O},$$

где \hat{O} — оракул, а \hat{I}_0 — фазовый сдвиг, инвертирующий фазу состояния $|0\rangle^{\otimes N}$. В модифицированном алгоритме Гровера инверсия фазы \hat{I}_0 заменяется на

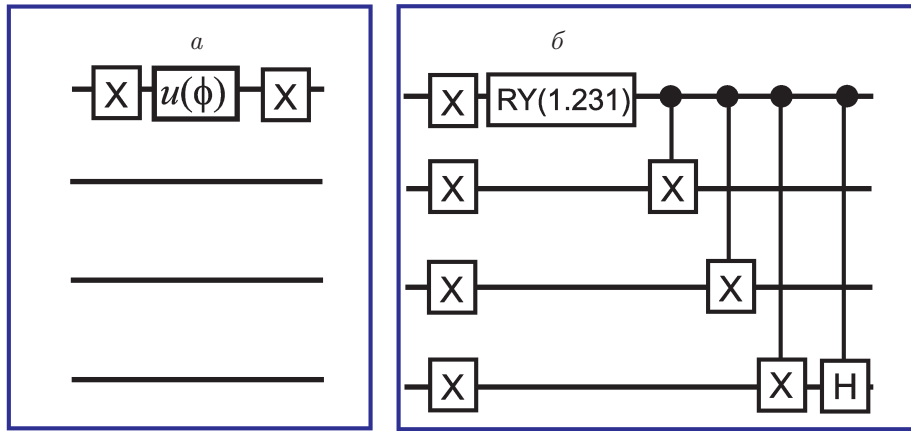


Рис. 4. а) Оракул, помечающий состояния в диапазоне от 0 до 7 включительно. б) Схема генерации квантовой суперпозиции $(1/\sqrt{3})(|1000\rangle + |1001\rangle + |0111\rangle)$

фазовый сдвиг \hat{I}_φ на величину

$$\varphi = 2 \arcsin \left[\frac{\sin \left(\frac{\pi}{4J+2} \right)}{\sin \beta} \right], \quad (4)$$

где $\sin \beta = \sqrt{M/N}$, а число итераций равно

$$J \geq \text{floor} \left[\frac{\pi/2 - \beta}{\beta} \right] + 1.$$

Фазовый сдвиг можно записать следующим образом:

$$\hat{I}_\varphi = e^{i\varphi} |0\rangle\langle 0| + \sum_{k=1}^{N-1} |k\rangle\langle k|. \quad (5)$$

На рис. 3а приведены квантовая схема выполнения фазового сдвига \hat{I}_φ и ее эквивалентная декомпозиция с использованием трехкубитовых контролируемых вентилях [13], доступных для квантового программирования с использованием библиотек Qiskit.

Ключевым элементом алгоритма является конструирование оракула, помечающего решения задачи поиска:

$$\hat{O} = e^{i\varphi} \sum_{k=0}^{M-1} |k\rangle\langle k| + \sum_{k=M}^{N-1} |k\rangle\langle k|. \quad (6)$$

Общая схема построения таких оракулов подробно рассмотрена в работе [10]. Нам достаточно отметить, что, например, изображенная на рис. 4а схема позволяет пометить состояния от 0 до 7 включительно для четырехкубитового регистра. Старший кубит для цепочки битов находится сверху. Поэтому будут помечены все состояния, для которых значение старшего бита равно логическому нулю. При этом состояния в диапазоне от 8 до 15 включительно помечены не будут. Далее нам необходимо провести ко-

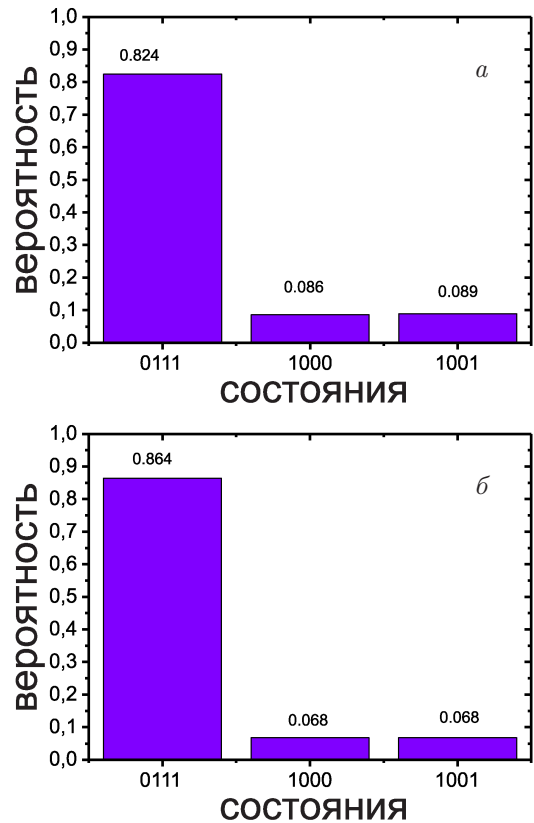


Рис. 5. Результаты моделирования одной (а) и двух (б) итераций квантового алгоритма поиска минимума

дирование полученных нами собственных значений длительности маршрута в квантовые состояния регистра. Поскольку собственные значения, приведенные в таблице, задаются четырьмя битами, потребуется квантовый регистр из четырех кубитов данных. Кроме того, будут необходимы два дополнительных кубита для декомпозиции фазового сдвига, как показано на рис. 3б. Таким образом, нужен регистр

из 6 кубитов. Схема создания суперпозиции

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(|1000\rangle + |1001\rangle + |0111\rangle)$$

изображена на рис. 4б. Здесь используется вращение одного из кубитов вокруг оси Y на угол 1.231 рад.

Мы провели численное моделирование итерации Гровера – Лонга для оракула, изображенного на рис. 4а, и выбранных значений $N = 3$ и $M = 1$, что дает $\varphi = 1.231$ и $J = 2$. Результаты моделирования с использованием библиотеки Qiskit приведены на рис. 5. Видно, что вероятность получить оптимальное решение задачи коммивояжера превышает 82% после одной итерации алгоритма (рис. 5а) и 86% для двух итераций алгоритма (рис. 5б). В общем случае значения числа результатов поиска M на каждой итерации оказываются неопределенными. Анализ влияния погрешности в определении значения M на успешность поиска приведен в работе [12]. Как отмечено в этой работе, успешность выполнения алгоритма снижается с увеличением размерности базы данных. Это требует дальнейших исследований для масштабирования предложенного алгоритма.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами реализован квантовый алгоритм решения задачи коммивояжера методом квантовой оценки фазы и поиска минимального значения в несортированной базе данных модифицированным методом Гровера. Рассмотренное нами решение представляет интерес как демонстрация некоторых принципов квантовой оптимизации с помощью библиотек Qiskit для моделирования квантовых вычислений.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-42-00031, <https://rscf.ru/project/23-42-00031/>

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Mott, J. Job, J. R. Vlimant, D. Lidar, and M. Spiropulu, *Nature* **550**, 375 (2017).
2. F. Arute, K. Arya, R. Babbush et al., *Nature* **574**, 505 (2019).
3. Y. Wu, W-S. Bao, S. Cao et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 180501 (2021).
4. H-S. Zhong, Y-H. Deng, J. Qin et al., *Phys. Rev. Lett.* **127**, 180502 (2021).
5. T. M. Graham, Y. Song, J. Scott et al., *Nature* **604**, 457 (2022).
6. C. Noel, P. Niroula, D. Zhu et al., *Nat. Phys.* **18**, 760 (2022).
7. K. Srinivasan, S. Satyajit, B. K. Behera, and P. K. Pagnrahi, arXiv:1805.10928 (2018).
8. <https://qiskit.org/textbook/ch-paper-implementations/tsp.html>
9. R. Botez, I.-A. Ivanciu, I. Marian, and V. Dobrota, *Proc. Rom. Acad. - Math. Phys. Tech. Sci. Inf. Sci.* **22**(41), 91 (2021).
10. J. Zhu, Y. Gao, H. Wang et al., arXiv:2212.02735 (2022).
11. G. L. Long, *Phys. Rev. A* **64**, 022307 (2001).
12. Y. Chen, S. Wei, X. Gao et al., arXiv:1908.07943 (2019).
13. M. Ghosh, N. Dey, D. Mitra, and A. Chakrabarti, *IET Quantum Communication* **3**(1), 13 (2022), DOI 10.1049/qtc2.12023.