

文章编号: 1000-5862(2016)05-0473-03

一种改进的量子退火算法

张洪涛 熊红梅 涂玲英

(湖北工业大学电气与电子工程学院 湖北 武汉 430068)

摘要: 为了进一步提高量子退火算法在优化问题上的计算速度,对量子退火算法如何移动到新解这个问题的方法进行改进,将粒子透射系数引入到量子退火算法中,并通过透射系数来确定是否移动到新解.实验结果表明:通过透射系数确定新解的方法能在更短的计算时间内得到最优解.

关键词: 量子退火算法; 能量本征态; 透射系数; 量子绝热定理; 优化算法

中图分类号: TP 306 文献标志码: A DOI: 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2016.05.05

0 引言

S. Kirkpatrick 等^[1]提出模拟退火(Simulated Annealing, SA)算法并成功地用来解决大规模的组合最优化问题.模拟退火算法模拟退火过程,即在一个已知初始温度的系统中,利用 Metropolis 接受准则在系统中找到能量比初始处低的点,并把这个点作为新解,重复这个过程,直到找到能量最低点,即全局最优解.

鉴于模拟退火解决大规模的组合最优化问题取得的有效成果, T. Kadowaki 等^[2]提出了量子退火算法(quantum annealing, QA).量子退火是利用量子扰动来实现的,量子扰动使量子有穿透比自身能量高势垒的能力,即量子力学中的量子隧穿效应.量子退火以绝热演化为基础,对量子隧穿效应进行了模拟,在量子效应下降过程中找到一个解.

在已有的研究中,量子退火算法在某些问题上展现出良好的优化效果^[3-9].近年来的主要研究进展有格林函数蒙特卡罗量子退火^[3]、路径积分蒙特卡罗量子退火^[4]等算法.这些量子退火算法采用 Metropolis 准则将当前解移动到新解,但这种准则实际上是用于模拟退火中的一种准则.对于量子退火算法,需要采用一种更有效、更快速的方法得到问题的最优解,提高量子退火算法的计算效率.

1 量子退火算法

1.1 能量本征方程

在势场 $V(r)$ 中运动粒子的薛定谔波动方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r, t) \equiv \hat{H} \psi(r, t), \quad (1)$$

对于不显含 t 的势场 $V(r)$, 其薛定谔方程解的形式为

$$\psi(r, t) = \psi(r) f(t), \quad (2)$$

将(2)式代入(1)式,可以得到如下形式的特解

$$\psi(r, t) = \psi(r) e^{-iEt/\hbar},$$

其中 $\psi(r)$ 满足方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(r) = E \psi(r), \quad (3)$$

E 是既不依赖于 t , 也不依赖于 r 的常数.(3)式称为不含时间的薛定谔方程,也称为能量或哈密顿算符 \hat{H} 的本征值方程^[10].

1.2 透射系数

在经典力学中,当能量比势垒较低时,粒子会被完全弹回而无法穿过势垒,但如果能量比势垒高,粒子就会完全穿过势垒.可是在量子力学中,粒子都有越过势垒的概率,粒子能量越大,越过势垒的概率也就越大,反之,能量越低,概率也就越小.这种粒子越过势垒的概率称之为透射系数^[10].

粒子在势场 $V(r)$ 中运动时,其透射系数为

收稿日期: 2016-01-09

基金项目: 湖北省武汉市科技局“十城千辆新动力汽车计划”(2013011801010600)资助项目.

作者简介: 张洪涛(1963-),男,内蒙古呼和浩特人,教授,博士,主要从事纳米电子技术与量子通信及量子计算的研究.

$$T = \frac{k_2}{k_1} |S|^2 = 1 - \frac{(\sqrt{E - V_1} - \sqrt{E - V_2})^2}{(\sqrt{E - V_1} + \sqrt{E - V_2})^2}, \quad (4)$$

其中 $k_i = \sqrt{2m(V_i - E)}/\hbar$ ($i = 1, 2$) 为能量本征方程的本征值, S 为透射波的波幅, $S = 2k_1/(k_1 + k_2)$, E 为粒子当前能量, V_1, V_2 为势场 $V(r)$ 中的两级势垒, $V_2 > V_1$.

由(4)式知,对于确定的势场 $V(r)$,粒子的透射系数 T 随入射电子能量 E 的变化可画出相应的曲线图(见图1)

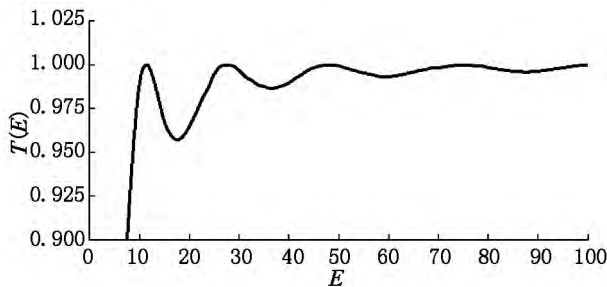


图1 有限深方势阱透射系数随入射粒子能量的变化

1.3 量子绝热定理

量子退火是一种模拟量子隧穿效应来寻找问题最优解的优化算法,其方法是利用量子力学中的绝热演化过程,让量子效应缓慢下降,并找到这个最优解.量子退火找寻最优解的过程实质上是遵从量子绝热定理的.

在量子绝热定理^[11-12]中,含时哈密顿系统的薛定谔方程的解.绝热要求 $\hat{H}(t)$ 时间变化缓慢,即时间变化率 $\partial \hat{H}(t)/\partial t \rightarrow 0$ 是个无穷小量.在绝热定理中,系统的瞬时哈密顿的本征值必须无简并,因此瞬时本征方程可以由瞬时哈密顿表示.引入参数 τ 表示 $\hat{H}(t)$ 的时间标度,当 $t \in (-\infty, +\infty)$ 时 $\hat{H}(t/\tau) = \hat{H}(t/\tau)$,绝热极限是 $\tau \rightarrow \infty$,也就是 $\partial \hat{H}(t)/\partial t \rightarrow 0$ 相当于 $\tau \rightarrow \infty$.

在绝热过程中,系统从 $|n(t=0)\rangle$ 开始,其初态为 $\hat{H}(t=0)$ 本征态.在 $t=T$ 时,瞬时本征态如 $|n(T)\rangle$ 的波函数为

$$|\Psi_\tau(T)\rangle = \exp\left(-i \int_0^T E(t/\tau) dt\right) |n(T)\rangle - O(1/\tau).$$

在绝热极限 $\tau \rightarrow \infty$ 下, $|\Psi_\tau(T)\rangle$ 与 T 时瞬时本征态 $|n(T)\rangle$ 只差一相乘的相位因子和量级为 $1/\tau$ 的项.若忽略 $O(1/\tau)$, $|\Psi_\tau(T)\rangle$ 就是绝热过程下薛定谔方程的近似解.绝热演化是一个理想的过程,它是用假想的完全绝热演化去逼近真实的物理

过程.

2 实验与分析

在关于量子退火算法的研究中,对于如何从当前解向其领域中的一个新解进行移动这个问题上,通常采用的是 Metropolis 接受准则,即依据一定的概率来决定当前解是否移向新解.在这种准则下,如果新状态的能量小于当前状态的能量,就无条件移动到新解处;否则,就按一定概率移动.

本文中利用粒子在势场中的透射系数来确定当前解是否需要移向新解.在确定势场下,粒子的透射系数 T 与能量 E 的关系是确定的.根据实际要求,取定一个常数 ε ,只有当透射系数不小于 ε 时,粒子才移动到新解,并根据其能量本征方程计算本征态;当透射系数 T 小于某一确定值 ε 时,取粒子当前状态的本征态为最优解.

一个量子比特有 2 种状态,而这 2 种状态对应 2 个 Hilbert 空间,因此 n 个量子比特的 Hilbert 空间数 $N = 2^n$.实验中以横向场伊辛模型^[13-15]为物理实验模型,对 2 种不同的方法进行测试.

图2给出的是当在同一 Hilbert 空间进行搜索时 2 种方法所需要的计算时间 t 的对比图.图2中,实线是方法1,即采用 Metropolis 接受准则确定新解的方法;虚线是方法2,即利用粒子在势场中的透射系数来确定当前解是否需要移向新解的方法.当粒子需要从当前解转移到新解的概率较小时,根据方法1,粒子将会留在当前解,而不会转移到新解处;然而在方法2中,无论概率多么小,粒子仍有转移到新解的可能性,即使新解处的能量比当前解的能量更高.所以为了避免出现这种情况,在实验中常数 ε 取 0.05.图2中数据显示,在同一 Hilbert 空间进行搜索时,方法2耗时显然比方法1更少,这说明方法2相比方法1更能节省时间,而且当所需 Hilbert 空间越多,方法1的效果更明显.

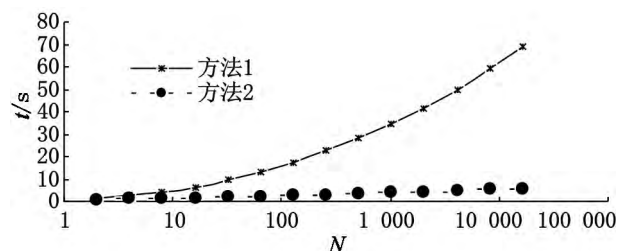


图2 2种移向新解的方法对比图

3 结束语

本文在已有文献的基础上对量子退火算法进行了研究,并就如何从当前解移动到新解这个问题进行了探讨,对2种方法进行了对比分析得出了结论.对量子退火算法进行深入研究,充分发挥量子退火算法的寻优能力,有关这方面的研究,将是一项非常有意义的工作.

4 参考文献

- [1] Kirkpatrick S, Gelatt C D, Vecchi M P. Optimization by simulated Annealing [J]. Science, 1983, 220 (4598): 671-680.
- [2] Kadowaki T, Hidetoshi N. Quantum annealing in the transverse ising model [J]. Physics Review E, 1998, 58(5): 5355-5364.
- [3] Lee Y, Berne B J. Global optimization: Quantum thermal annealing with path integral Monte Carlo [J]. Journal of Physical Chemistry A, 2000, 104(1): 86-95.
- [4] Stella L, Santoro G E, Tosatti E. Optimization by quantum annealing: Lessons from simple cases [J]. Physics Review B, 2005, 72(1): 14303-14317.
- [5] Stella L, Santoro G E, Tosatti E. Monte Carlo studies of quantum and classical annealing on a double-well [J]. Physics Review B, 2006, 73(14): 144302-144316.
- [6] Stella L, Santoro G E. Quantum annealing of an ising spin-glass by Green's function Monte Carlo [J]. Physics Review E, 2007, 75(3): 36703-036710.
- [7] Stella L. Studies of classical and quantum annealing [EB/OL]. [2015-04-09]. <http://www.sissa.it/cm/thesis/2005/stella.pdf>.
- [8] 杜卫林, 李斌, 田宇. 量子退火算法研究进展 [J]. 计算机研究与发展, 2008, 45(9): 1501-1508.
- [9] Masayuki O, Hidetoshi N. Quantum annealing: An introduction and new developments [J]. Journal of Computational & Theoretical Nanoscience, 2011, 8(6): 963-971.
- [10] 陈宏, 袁宏宽. 量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2014: 27-51.
- [11] 吴楠, 宋芳敏. 绝热量子计算 [J]. 南京邮电大学学报: 自然科学版, 2011, 31(2): 19-26.
- [12] 文家焱, 王国利. 绝热量子搜索算法中的纠缠与能量分析 [J]. 计算机研究与发展, 2008, 45(1): 81-86.
- [13] Giuseppe S, Roman M, Erio T, et al. Theory of quantum annealing of an ising spin glass [J]. Science, 2002, 295 (5564): 2427-2430.
- [14] Mark W J, Mohammad A S, Gildert et al. Quantum annealing with manufactured spins [J]. Nature, 2011, 473 (7346): 194-198.
- [15] Arnab D, Bikas C. Quantum annealing and analog quantum computation [J]. Reviews of Modern Physics, 2008, 80 (3): 1061-1081.

An Improved Quantum Annealing Algorithm

ZHANG Hongtao, XIONG Hongmei, TU Lingying

(School of Electrical and Electronic Engineering, Hubei University of Technology, Wuhan Hubei 430068, China)

Abstract: In order to enhance the computing speed of quantum annealing algorithm on optimization problems, the method on how to move to a new solution in quantum annealing algorithm has been improved. Transmission coefficient has been introduced into the quantum annealing algorithm, and it will determine whether to move to the new solution. Finally, experimental result verify that the new method that can obtain the optimal solution in a shorter time.

Key words: quantum annealing; energy eigen state; transmission coefficient; quantum adiabatic theorem; optimization algorithm

(责任编辑: 冉小晓)