

Вариационная квантовая оптимизация открытого карьера

Г. Парадеженко¹⁾, А. Первишко, Д. Юдин

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 2023

После переработки 15 февраля 2024

Принята к публикации 22 февраля 2024

С учетом последних достижений в области создания многокубитных квантовых систем все более широко обсуждается возможность использования квантовых компьютеров для решения задач комбинаторной оптимизации. В данной работе рассматривается применимость вероятностного алгоритма оптимизации на основе тензорных поездов в вариационных квантовых алгоритмах для решения задачи о разработке открытого месторождения. Предложенная методология сравнивается с традиционными подходами, для которых, как правило, характерны проблема исчезающе малых градиентов с ростом размерности задачи, а также чувствительность к наличию многих локальных минимумов. Показано, что предложенный подход, основанный на использовании вероятностного метода тензорной оптимизации, позволяет достаточно точно определять оптимум рассматриваемой задачи.

DOI: 10.31857/S1234567824060090, EDN: SKGVVO

Введение. Вариационные квантовые алгоритмы (*variational quantum algorithms*, VQAs) в настоящее время считаются наиболее перспективным направлением реализации квантовых вычислений с использованием зашумленных квантовых устройств промежуточного масштабирования (*noisy intermediate-scale quantum*, NISQ) [1]. В отличие от классической модели вычислений, где входная битовая строка преобразуется в выходную битовую строку за счет применения конечного числа классических вентилей, выбранных из универсального набора, в случае квантовых вычислений существуют хотя эквивалентные, но все-таки различные, гейтовая модель вычислений [2], квантовые вычисления на основе измерений [3, 4] и адиабатические квантовые вычисления [5, 6]. В то время как гейтовая модель является ближайшим аналогом классической модели и представляет собой стандартный подход к реализации универсальных квантовых вычислений, адиабатические квантовые вычисления лежат в основе алгоритмов квантовой оптимизации [5]. Вариационные квантовые вычисления родились на стыке гейтовой и модели адиабатических квантовых вычислений [7, 8]. Значительный прогресс последних лет в области экспериментальной реализации многокубитных квантовых систем позволил на практике продемонстрировать возможность использования вариационных квантовых алгоритмов для решения ряда простейших задач комбинаторной оптимизации [9–12]. Тем не менее, более широкому использованию

зашумленных квантовых устройств промежуточного масштабирования препятствуют шумы, неизбежно присутствующие в квантовых вентилях и ограничивающие глубину используемых квантовых цепей, определяющую количество операций, которые можно выполнить с заданным набором кубитов.

В вариационной модели квантовых вычислений [13–15] квантовый процессор используется для приготовления семейства пробных анзац-состояний, задаваемых параметризованной квантовой схемой, параметры которой определяются исходя из условия минимизации целевой функции, полученной на выходе квантовой цепи, с помощью классического компьютера, а затем передаются обратно квантовому компьютеру. Говоря о практических приложениях, вариационные квантовые алгоритмы могут найти применение в квантовой химии [16], физике твердого тела [17, 18], квантовом машинном обучении [19, 20] и многих других областях (см. обзор [21]). Стоит отметить, что вариационные квантовые алгоритмы хорошо подходят для решения задач комбинаторной оптимизации, которые можно свести к задаче поиска основного состояния системы, определяемой некоторым гамильтонианом [14]. В то время как задачи о максимальном разрезе графа [22–25] и максимальном независимом наборе [10], задача коммивояжера [26, 27], задача маршрутизации транспорта [28] являются наиболее известными примерами использования данного подхода, в этой статье мы рассмотрим индустриально значимую задачу, связанную с определением оптимального предельного контура открытого карьера [29, 30].

¹⁾e-mail: g.paradezhenko@skoltech.ru

Задача о выборе стратегии оптимальной разработки открытого месторождения может быть записана через посредство блочной модели стоимости, включающей набор правильных прямоугольных блоков, полностью заполняющих рассматриваемое пространство добычи полезных ископаемых и характеризующих соответствующей прибылью от их извлечения [30]. Извлечение каждого такого блока может быть представлено в виде оптимизационной задачи для максимизации общей прибыли с учетом ограничений, налагаемых геологическими и горнотехническими особенностями системы. При такой форме записи в рамках классического подхода представленная задача сводится к задаче о максимальном замыкании ориентированного графа или задаче максимального потока, которые могут быть решены с использованием доступных графовых алгоритмов. На протяжении достаточно продолжительного времени подобные задачи традиционно решались с помощью хорошо известного в теории графов алгоритма Лерча–Гроссмана, являющегося эталонным методом в горнодобывающей промышленности, который гарантирует решение задачи нахождения оптимального контура открытого карьера за полиномиальное время [29, 31, 32]. Впоследствии был также предложен более эффективный алгоритм псевдопотока (*pseudoflow*) [33]. В рамках квантового подхода решение данной проблемы может быть предложено в рамках использования тензорных сетей, что подробно обсуждается в работе [34]. Данная методология позволяет моделировать задачу разработки месторождения открытым способом с помощью тензорной сети, построенной таким образом, что ее структура непосредственно учитывает ограничения, связанные с профилем карьера. В свою очередь, в работе [36] была впервые показана возможность использования вариационных квантовых алгоритмов в задаче оптимальной разработки двумерного (плоского) открытого карьера в логике вариационного квантового алгоритма поиска собственного состояния эрмитовой матрицы (*variational quantum eigenolver*, VQE) [35].

Основные преимущества вариационных квантовых алгоритмов связаны с их устойчивостью к шумам и возможностью использования относительно неглубоких квантовых схем, однако их эффективность в значительной степени определяется выбором вариационного анзац-состояния. В свою очередь, оптимизируемая целевая функция является, как правило, сильно невыпуклой с множеством локальных минимумов, что при оптимизации параметризованной квантовой схемы приводит к проблеме исчезающе малых градиентов целевой функции [37]. Вы-

бор подходящей стратегии оптимизации по-прежнему представляет собой актуальную задачу, поскольку в рамках классических подходов на основе градиентных методов оптимизации вероятность возникновения данной проблемы достаточно высока [38], однако даже использование неградиентных методов не гарантирует достижения глобального минимума целевой функции [39]. Отдельно стоит отметить, что результат решения оптимизационной задачи в значительной степени связан с выбором начального приближения для вариационных параметров. С целью обойти данное ограничение был предложен целый ряд эвристик [23, 40–42], но такого рода эвристики по-прежнему не гарантируют достижения оптимума [23]. Это в совокупности делает разработку эффективного универсального метода оптимизации параметризованных квантовых схем ключевым вопросом, ответ на который позволит перейти к решению практических задач с использованием вариационных квантовых алгоритмов.

В данной работе мы рассматриваем альтернативный подход, основанный на вероятностном методе тензорной оптимизации [43]. В этом случае целевая функция задается многомерным тензором, глобальный минимум которого вычисляется в рамках дискретной оптимизации с использованием полностью вероятностного подхода. Мы исследуем применимость данного метода и покажем его эффективность при оптимизации параметризованной квантовой схемы на примере задачи оптимальной разработки двумерного и трехмерного открытых карьеров в логике вариационного квантового алгоритма VQE. В частности, мы продемонстрируем, что конечный результат, полученный при использовании предложенной методологии, не зависит от выбора начальных значений вариационных параметров.

Задача определения оптимального контура открытого карьера. В общем случае задача открытой разработки месторождения может быть представлена с помощью пространственной сетки из n связанных элементов или блоков, задаваемых своими координатами. Для каждого блока считается известной прибыль от его извлечения $w_i \in \mathbb{R}$. В силу особенностей разработки карьера необходимо принимать во внимание тот факт, что, если извлечен некоторый i -й блок, то все блоки, лежащие поверх него, также должны быть извлечены. Здесь и далее будем называть эти блоки дочерними для i -го блока и обозначать как $j \in P_i$. Другими словами, данную модель можно представить в виде ориентированного графа $G = (V, E)$, вершины которого $i \in V$ соответствуют i -м блокам карьера и имеют веса w_i , а направленные

ребра $(i, j) \in E$ обозначают связь i -го блока с его дочерними блоками $j \in P_i$ (см. рис. 1). Тогда исходную задачу можно сформулировать в логике задачи о максимальном замыкании графа. В используемых обозначениях, замыканием графа $G = (V, E)$ называется такое подмножество $V' \subset V$, что от вершин $i \in V'$ к вершинам $j \in V/V'$ не отходит ни одно ребро $(i, j) \in E$. Максимальное замыкание графа – это замыкание $V' \subset V$, при котором $\sum_{i \in V'} w_i$ достигает максимума.

Формально задача максимизации прибыли в процессе разработки открытого месторождения может быть сведена к задаче бинарного программирования. Для этого сопоставим булеву переменную $\sigma_i = \{0, 1\}$ каждой вершине так, чтобы $\sigma_i = 1$ (0) в случае, если i -ый блок извлечен (неизвлечен). Тогда задача определения предельного контура карьера состоит в поиске такого булева вектора $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, который максимизирует общую прибыль с учетом ограничений:

$$C(\sigma) = \sum_{i=1}^n w_i \sigma_i \rightarrow \max_{\sigma \in \{0,1\}^n}, \quad (1)$$

$$S(\sigma) = \sum_{i=1}^n \sum_{j \in P_i} \sigma_i (1 - \sigma_j) = 0. \quad (2)$$

Как можно заметить, условие (1) направлено на максимизацию прибыли, а выражение (2) учитывает естественное ограничение на извлечение i -го блока: если $\sigma_i = 1$, то для всех его дочерних блоков $j \in P_i$ справедливо $\sigma_j = 1$. Заметим, что выражения (1)–(2) можно переформулировать в терминах задачи неограниченной бинарной оптимизации путем добавления штрафного слагаемого к целевой функции,

$$L(\sigma) = C(\sigma) - \gamma S(\sigma) \rightarrow \max_{\sigma \in \{0,1\}^n}, \quad (3)$$

где $\gamma > 0$ – штрафной коэффициент.

Теперь задача оптимизации (1)–(3) естественным образом сводится к задаче отыскания основного состояния квантового гамильтониана. Поставим каждой вершине $i \in V$ графа в соответствие кубит, а булеву вектору $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ – состояние $|\sigma\rangle = \otimes_{i=1}^n |\sigma_i\rangle$. Используя подстановку $\sigma_i \mapsto (1 - Z_i)/2$, запишем выражения (1) и (2) в виде

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i (1 - Z_i), \quad (4)$$

$$H_S = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n \sum_{j \in P_i} (1 - Z_i)(1 + Z_j). \quad (5)$$

Теперь задача сводится к поиску основного состояния $|\sigma\rangle$ гамильтониана $-H_C$ при условии, что оно

принадлежит ядру оператора H_S , т.е. $H_S |\sigma\rangle = 0$. Аналогично (3) она может быть записана как задача неограниченной оптимизации за счет добавления штрафного слагаемого. Соответственно задача сводится к поиску основного состояния гамильтониана $H = -H_C + \gamma H_S$.

Как было упомянуто выше, геометрия открытого карьера вообще говоря может быть определена с использованием направленного графа. Для того, чтобы сделать наше рассмотрение как можно более общим, рассмотрим как двумерную, так и трехмерную реализации, показанные на рис. 1. В первом случае граф строится таким образом, что i -й блок соединяется с тремя дочерними блоками $j \in P_i$, координаты которых $(x_i \pm 1, y_i + 1)$ и $(x_i, y_i + 1)$. На рисунке 1a рассматривается сценарий, моделирующий распространенную ситуацию в горнодобывающей промышленности, которая заключается в исследовании экономической эффективности извлечения экономически нерентабельных блоков при разработке верхних слоев для достижения высокомаржинального блока, расположенного на глубине карьера. На рисунке 1b, в свою очередь, показан более общий случай двумерной задачи. При описании трехмерной геометрии необходимо построить модель, в которой i -й блок связан с четырьмя дочерними блоками $j \in P_i$, координаты которых $(x_i \pm 1, y_i - 1, z_i + 1)$ и $(x_i \pm 1, y_i + 1, z_i + 1)$ (см. рис. 1c). Отметим, что для дальнейшего исследования мы выбираем общее число вершин графа (соответствующих кубитам) так, чтобы численное решение задачи с использованием квантового алгоритма на классическом компьютере могло быть проведено в разумное время. Как мы обнаружили, для числа кубитов $n \geq 14$ эти расчеты становятся чрезвычайно времязатратными.

В качестве штрафного коэффициента γ в выражении (3) используем [36],

$$\gamma = \max_i \left(w_i - \sum_{j \in P_i} w_j \right) / p, \quad (6)$$

где p – число дочерних блоков $j \in P_i$. Очевидно, что $p = 3$ и 4 для двумерной и трехмерной моделей, соответственно.

Вариационный квантовый алгоритм поиска собственного состояния эрмитовой матрицы. В задачах комбинаторной оптимизации, например, о максимальном разрезе графа или вершинном покрытии, наиболее естественным выглядит использование вариационного квантового алгоритма приближенной оптимизации (QAOA) [14]. Однако, в рамках QAOA целевая функция исследуемой задачи (1) предпола-

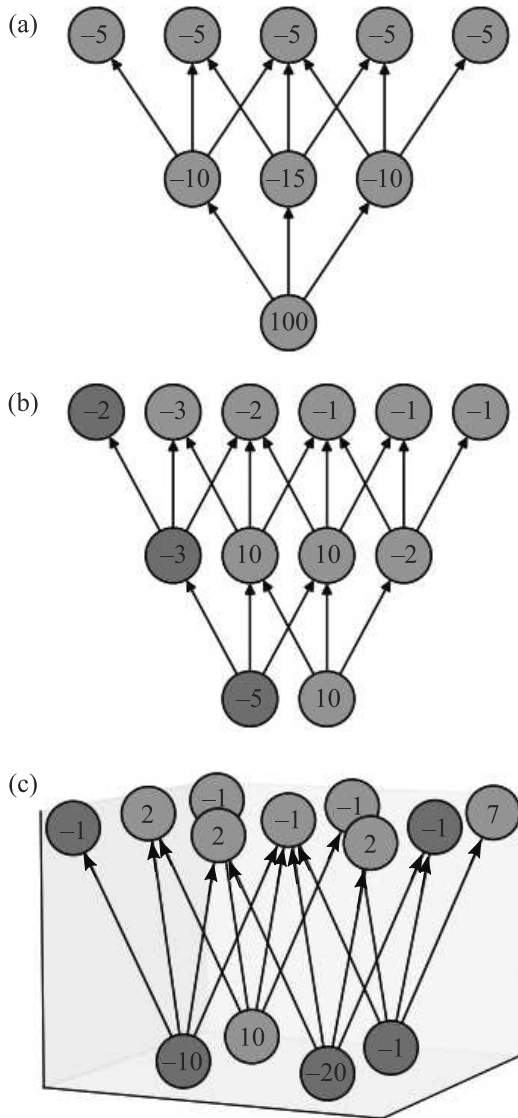


Рис. 1. (Цветной онлайн) Блочные модели открытого карьера в виде ориентированных графов $G = (V, E)$ с вершинами $i \in V$, представляющими блоки горной породы, прибыль от извлечения которых определяется w_i , а ребра $(i, j) \in E$ связывают i -й блок с его дочерними блоками $j \in P_i$. Для оптимальных решений зеленым (красным) цветом отмечены вершины, соответствующие извлекаемым (неизвлекаемым) блокам. (a) – Двумерная модель задачи о разработке месторождений открытым способом, когда максимальная прибыль $C(\sigma^*) = 40$ достигается при извлечении экономически нерентабельных блоков в верхних слоях, являющихся дочерними к высокомаржинальному блоку, расположенному на глубине карьера. (b) – Обобщенная двумерная модель открытого карьера для которой максимальная прибыль соответствует $C(\sigma^*) = 20$. (c) – Трехмерная модель открытого карьера с максимальной прибылью $C(\sigma^*) = 20$

гается неотрицательной [23]. Поскольку значения весов w_i в уравнении (1) могут быть отрицательными, целевая функция $C(\sigma)$ задачи разработки открытого месторождения может также принимать отрицательные значения. Следуя таким образом [36], для решения поставленной задачи мы предлагаем вместо этого использовать вариационный квантовый алгоритм поиска основного состояния эрмитовой матрицы (VQE) [35]. VQE – это квантово-классический гибридный алгоритм поиска основного состояния взаимодействующей квантовой системы. Для запуска алгоритма необходимо задать гамильтониан H системы кубитов, который нужно минимизировать, вариационное анзац-состояние, определяемое унитарным оператором $U(\theta)$, параметризованным $\theta \in \mathbb{R}^d$, где d – количество параметров, некоторое легко подготавливаемое начальное квантовое состояние $|\psi_0\rangle$ и выбрать классический оптимизатор. Квантовый процессор (или его симулятор) готовит семейство пробных состояний $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$ и оценивает математическое ожидание заданного гамильтониана, $E(\theta) = \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$, что позволяет, в свою очередь, ввести в рассмотрение многопараметрическую целевую функцию $E(\theta)$. Оптимальные значения вариационных параметров пробного состояния $|\psi(\theta)\rangle$, аппроксимирующего основное состояние H , находятся из условия минимизации $E(\theta)$:

$$\theta_* = \arg \min_{\theta \in \Omega} E(\theta), \quad (7)$$

где Ω – компакт вариационных параметров θ , зависящий от выбора конкретного анзаца $U(\theta)$.

На практике реализация алгоритма VQE состоит из нескольких ключевых шагов. Во-первых, нам нужно выбрать подходящую параметризованную квантовую схему, определяемую унитарным оператором $U(\theta)$, иными словами, анзац-состояние $|\psi(\theta)\rangle$. Как правило, для этих целей используют аппаратно-эффективный анзац (НЕА), но иногда также удается построить состояние, соответствующее специфике задачи. В общем случае, НЕА включает в себя набор параметризованных одно- и двухкубитных вентилях, которые могут быть непосредственно реализованы с использованием квантовых систем промежуточного масштабирования [44]. Однако, стоит отметить спорность его выразительности [45], а также необходимость использования экспоненциального количества параметров относительно количества кубитов n [46]. С другой стороны, выбор анзаца, продиктованного спецификой рассматриваемой задачи, может быть эффективным с точки зрения количества вариационных параметров, обес-

печивающих систематическое приближение к основному состоянию H . К ним можно отнести вариационный связанный кластер [47], анзац-схемы малой глубины [48], гамильтонов вариационный анзац [49].

В задаче разработки открытого месторождения (4)–(5) будем использовать анзац-состояние, предложенное в [36]:

$$|\psi(\theta)\rangle = \prod_{i=1}^n \prod_{j \in P_i} CR_y(\theta_{ij}) \prod_{i=1}^n R_y(\theta_i) |\psi_0\rangle, \quad (8)$$

где $R_y(\theta_i) = e^{-i\theta_i Y_i/2}$ – Y -вращение i -ого кубита, $CR_y(\theta_{ij})$ – вентиль управляемого Y -вращения, применяемый к паре i -го и j -го кубитов, где целевой кубит есть $j \in P_i$. Начальное состояние принимается равным $|\psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes n}$. Общее количество вариационных параметров θ в (8) равно $d = n + |E|$, где $|E|$ – количество направленных ребер в графе $G = (V, E)$. Пространство этих параметров θ ограничено $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$. Заметим, что анзац (8) характеризуется ограниченной глубиной, а его структура повторяет геометрию задачи о разработке открытого карьера. Более того, пробное состояние $|\psi(\theta)\rangle$ остается вещественным в процессе оптимизации, что уменьшает количество требуемых вариационных параметров d .

Во-вторых, нам нужно выбрать подходящий классический оптимизатор для поиска оптимальных вариационных параметров (7). Оптимизация параметризованных квантовых схем, что неоднократно подчеркивалось выше, представляет собой довольно тонкий момент, поскольку целевая функция $E(\theta)$ в VQE обычно имеет несколько локальных минимумов при наличии проблемы исчезающе малых градиентов [37]. Эта проблема присутствует даже при использовании неградиентных методов оптимизации [39], таких как ограниченная оптимизация с линейной аппроксимацией (COBYLA) [50]. Кроме того, оптимизация вариационных анзац-состояний зависит от выбора начальных значений вариационных параметров. Чтобы преодолеть эти проблемы, ранее было разработано несколько методов, включающих стратегию инициализации идентификационного блока [40], схему оптимизации унитарного блока (UBOS) [51], эвристическую стратегию эволюции состояния [52] и другие [23, 41, 42]. В этой работе мы предлагаем другой подход, основанный на вероятностной оптимизации с использованием тензорных поездов [43].

Вероятностная оптимизация на основе тензорных поездов. В VQE внешний цикл классической оптимизации направлен на поиск глобаль-

ного минимума вещественнозначной целевой функции стоимости $E(\theta)$, где $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d) \in \mathbb{R}^d$ – d -мерный вектор вариационных параметров, ограниченный на компакте $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$. Введем d -мерную сетку дискретизации для θ на Ω с N узлами на каждое измерение. Теперь функцию $E(\theta)$ можно рассматривать как неявный d -мерный тензор $E[i_1, i_2, \dots, i_d] \in \mathbb{R}^{N \times N \times \dots \times N}$, где мультииндекс $(i_1, i_2, \dots, i_d)$ обозначает узлы сетки, а $1 \leq i_k \leq N$ для $k = 1, 2, \dots, d$. В результате наша изначальная задача непрерывной оптимизации (7) сводится к поиску минимального элемента тензора $E[i_1, i_2, \dots, i_d]$.

Алгоритм вероятностной тензорной оптимизации PROTES [43] основан на идее построения дискретного распределения $P[\tilde{\theta}]$ мультииндексов $\tilde{\theta} = (i_1, i_2, \dots, i_d)$, который с высокой вероятностью выбирает минимальный элемент $\tilde{\theta}_*$ тензора $E[\tilde{\theta}]$. Ясно, что это d -мерное распределение $P[\tilde{\theta}]$ является тензором той же размерности, что и исходный тензор $E[\tilde{\theta}]$. Однако общее число его элементов N^d растет экспоненциально с ростом d . Таким образом, для достаточно больших d невозможно вычислить и сохранить в памяти устройства целиком тензор $P[\tilde{\theta}]$. Для того, чтобы преодолеть эту проблему, можно применить малоранговые разложения в формате тензорных поездов (TT) [53, 54]

$$P[i_1, i_2, \dots, i_d] \cong \sum_{r_0=1}^{R_0} \sum_{r_1=1}^{R_1} \dots \sum_{r_d=1}^{R_d} G_1[r_0, i_1, r_1] \times \\ \times G_2[r_1, i_2, r_2] \dots G_d[r_{d-1}, i_d, r_d], \quad (9)$$

где $R_0, R_1, \dots, R_d$ (здесь предполагается, что $R_0 = R_d = 1$) – ранги тензорных поездов, а $G_k \in \mathbb{R}^{R_{k-1} \times N \times R_k}$ – трехмерные ядра для $k = 1, 2, \dots, d$. В PROTES ранги тензорных поездов предполагаются одинаковыми и равными $R \ll N$, где R – гиперпараметр алгоритма. Формат (9) тензора $P[\tilde{\theta}]$ позволяет сохранять его в компактной малоранговой форме так, что общее количество элементов линейно по d , $(d \cdot N \cdot R^2)$. Но что более важно, многие алгебраические операции, включая умножение матрицы на вектор, интегрирование, свертку и т.д., могут быть эффективно реализованы с тензорами в формате тензорных поездов с линейной по d сложностью (подробный обзор см. [55, 56]). В частности, PROTES производит выборку мультииндекса $\tilde{\theta}$ с вероятностью, пропорциональной соответствующему значению $p = P[\tilde{\theta}]$ тензора, представленного в формате тензорного поезда, методом последовательного вычисления одномерных условных плотностей с эффективным интегрированием [57].

Опишем вкратце техническую сторону, связан-

ную с реализацией алгоритма PROTES. Мы начинаем алгоритм с выбора некоторого случайного неотрицательного тензора $P[\tilde{\theta}]$ в формате тензорного поезда, после чего реализуем следующие шаги, до тех пор пока не будет превышено заданное количество итераций:

Шаг 1. Выбираем из текущего распределения $P[\tilde{\theta}]$ произвольным образом K векторов-индексов и сохраняем их как $\Theta_K = \{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_K\}$.

Шаг 2. Вычисляем значения целевой функции для каждого вектора-индекса $e_1 = E[\tilde{\theta}_1]$, $e_2 = E[\tilde{\theta}_2]$, $\dots$, $e_K = E[\tilde{\theta}_K]$.

Шаг 3. Отбираем k векторов-индексов $S = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$ из Θ_K таких, что соответствующие значения целевой функции $e_i \leq e_j$ для всех $i \in S$ и $j \in \{1, 2, \dots, K\}/S$.

Шаг 4. Модифицируем тензор $P[\tilde{\theta}]$ таким образом, чтобы увеличить вероятность появления векторов-индексов из множества Θ_K на следующей итерации, используя k_{gd} шагов градиентного спуска для функции правдоподобия

$$L(\{\tilde{\theta}_{s_1}, \tilde{\theta}_{s_2}, \dots, \tilde{\theta}_{s_k}\}) = \sum_{i=1}^k \ln(P[\tilde{\theta}_{s_i}]). \quad (10)$$

со скоростью обучения λ .

После выполнения достаточного количества итераций тензор $P[\tilde{\theta}]$ должен иметь ярко выраженные пики для тех значений индексов, которые соответствуют минимальному элементу тензора $E[\tilde{\theta}]$. Обратим особое внимание на то, что в процессе выполнения алгоритма нет необходимости хранить все значения тензора $E[\tilde{\theta}]$, вместо этого нам необходимо вычислять лишь K элементов на каждой итерации. Кроме того, работа с тензором плотности вероятности $P[\tilde{\theta}]$ происходит в формате тензорного поезда. Вместе эти факторы обуславливают эффективность алгоритма. В свою очередь, значения ранга тензорных поездов R , количества отбираемых векторов-индексов на первом K и третьем k шагах алгоритма, а также число шагов градиентного спуска k_{gd} и скорость обучения λ на последнем шаге алгоритма являются гиперпараметрами и задаются пользователем.

Основные преимущества, связанные с использованием PROTES в рамках вариационных квантовых алгоритмов, можно резюмировать следующим образом. Во-первых, расчет в данной методологии не требует задания начальных значений вариационных параметров θ в отличие от стандартных методов оптимизации. Это позволяет избежать использования различных эвристических стратегий при

оптимизации параметризованных анзац-состояний с несколькими слоями. Во-вторых, в PROTES отсутствует необходимость локального приближения целевой функции $E(\theta)$, напротив глобальный минимум разыскивается с использованием полностью вероятностного подхода. В дальнейшем мы рассмотрим применение алгоритма PROTES в комбинации с классическим оптимизационным алгоритмом. Ключевая идея здесь будет состоять в том, чтобы сначала получить близкие к оптимальным значения вариационных параметров методом PROTES, а затем использовать их в качестве начального приближения для классического оптимизатора, улучшив тем самым конечный результат.

Численные результаты. Вычисления в рамках вариационного квантового алгоритма VQE выполнены с использованием программной реализации на основе пакета Qiskit [58]. В свою очередь для нахождения минимума целевой функции $E(\theta)$ нами сначала использовался алгоритм PROTES [43] для локализации окрестности оптимума, после чего проводились несколько итераций в рамках стандартного метода градиентного спуска на основе солвера BFGS (алгоритм Бroyдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно) [59]. Для PROTES были выставлены следующие значения гиперпараметров $R = 5$, $K = 1000$, $k = 100$, $k_{gd} = 1$, а также $\lambda = 0.05$; число обращений к целевой функции $E(\theta)$ было ограничено величиной $m = 10^5$. Для дискретизации целевой функции для каждого из параметров $\Omega = [0, 2\pi]^{\times d}$ использовались $N = 100$ точек. Несмотря на то, что PROTES принадлежит к числу вероятностных алгоритмов, мы не обнаружили влияние его вариативности на конечный результат. После достаточного количества итераций PROTES за один запуск можно достичь точки θ , которая в рамках последующих итераций в рамках алгоритма BFGS позволит идентифицировать основное состояние данной системы. Для сравнения мы минимизировали целевую функцию $E(\theta)$ с использованием классических градиентных методов вроде BFGS и безградиентного COBYLA, реализованных в библиотеке SciPy (версия 1.10.0) [60]. Отметим, что в обеих реализациях использовались значения параметров по умолчанию и 100 запусков VQE со случайно выбранными значениями вариационных параметров θ , равномерно распределенных на Ω .

Мы продемонстрировали преимущества, связанные с использованием алгоритма PROTES для оптимизации параметризованных квантовых схем, в случае трех различных задач, приведенных на рис. 1. Для удобства статистика по 100 запускам моделирования VQE с использованием классических оптими-

Таблица 1. Результаты расчетов для модельных задач открытой разработки месторождений (рис. 1) с использованием классических оптимизаторов BFGS и COBYLA, где d – общее количество вариационных параметров, E_* – оптимальное значение целевой функции, а статистика, собранная на основе 100 запусков алгоритма VQE, включает в себя среднее значение целевой функции $\langle E_{\text{calc}} \rangle$, среднее число вычислений целевой функции N_{eval} , и число успешных случаев достижения минимального оптимального значения целевой функции в процентном соотношении

Задача	d	E_*	BFGS			COBYLA		
			$\langle E_{\text{calc}} \rangle$	N_{eval}	Успешный %	$\langle E_{\text{calc}} \rangle$	N_{eval}	Успешный %
Рис. 1a	21	–40	–3.90	229.24	10	–18.74	1035.05	50
Рис. 1b	30	–20	–12.60	753.61	11	–15.63	1098.14	15
Рис. 1c	29	–20	–16.33	648.90	11	–18.04	1494.61	12

заторов BFGS и COBYLA сведена в табл. 1. Эволюция целевой функции $E(\theta)$ в зависимости от числа обращений к ней для первой двумерной задачи, представленной на рис. 1a, показана на рис. 2. Штрафной коэффициент (6) принимается равным $\gamma = 45$. Как можно заметить, результаты обоих классических оптимизаторов BFGS и COBYLA сильно зависят от начального выбора вариационных параметров. Производительность BFGS очень низкая, поскольку усредненная целевая функция $E(\theta)$ сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -3.90$, что достаточно далеко от оптимального значения $E_* = -40$ (см. рис. 2a). Наши численные результаты показывают, что только около 10 % запусков VQE с оптимизатором BFGS успешно достигают минимума. Большинство симуляций (около 75 %) попадают в локальный минимум при $E = 0$. Ситуация улучшается при использовании неградиентного оптимизатора COBYLA. Здесь усредненное значение целевой функции сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -18.74$, а около 50 % расчетов достигают оптимального значения целевой функции. Здесь можно указать на значительное преимущество неградиентного метода COBYLA над градиентным BFGS, применяемым для оптимизации вариационных квантовых схем, однако даже использование COBYLA не гарантирует достижения оптимального значения. Напротив, оптимизатор PROTES не зависит от выбора начального приближения для вариационных параметров и сходится к $E_* = -40$. Как видно на рис. 2b, после 10^5 обращений к целевой функции PROTES достигает такого приближения к оптимальным вариационным параметрам θ_* , что для сходимости к минимуму требуется лишь несколько последующих вычислений функции с использованием оптимизатора BFGS.

Такое поведение справедливо и для общего случая двумерной задачи, показанной на рис. 1b. Значение штрафного коэффициента условимся считать равным $\gamma = 5, 33$. Как видно на рис. 3a, для этой модели оптимизатор COBYLA снова превосходит результаты BFGS. В частности, усредненная целевая функция, рассчитанная с помощью оптимизатора

BFGS, сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -12.60$, при этом только в 11 % случаях удается достичь оптимального значения целевой функции. Оптимизатор COBYLA обеспечивает лучшую оценку $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -15.63$, но его производительность сравнима с результатами BFGS по количеству успешных запусков (15 %). Интересно, что использование алгоритма PROTES с последующими несколькими итерациями оптимизатора BFGS позволяет сойтись к оптимальному значению целевой функции (см. рис. 3b).

Для трехмерной задачи определения предельных контуров открытого карьера (см. рис. 1c) численные результаты представлены на рис. 4. Здесь мы установили штрафной коэффициент (6) равным $\gamma = 2.75$. Результаты VQE аналогичны результатам, полученным для двумерных моделей. Используя оптимизатор BFGS, мы получаем усредненное значение целевой функции $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -16.33$, что показано на рис. 4a. В этом случае около 11 % запусков VQE достигают оптимального значения $E_* = -20$, а более 30 % из них застревают на уровне $E = -18$. Оптимизатор COBYLA немного улучшает результаты: $E(\theta)$ в среднем сходится к $\langle E_{\text{calc}} \rangle = -18.04$ (см. рис. 4a). Однако только в 12 % случаев удается достичь оптимального значения целевой функции, в то время как в большинстве случаев (около 40 %) система оказывается в одном из локальных минимумов при $E = -19$. Наконец, используя комбинацию оптимизаторов PROTES и BFGS, можно преодолеть проблемы оптимизации и получить оптимальные вариационные параметры θ_* целевой функции $E(\theta)$, соответствующие оптимальному значению $E_* = -20$ (см. рис. 4b).

Данные о расчетах с использованием классических оптимизаторов также представлены в табл. 1. Наши результаты показывают, что в рамках одного запуска VQE необходимо выполнить около 10^2 – 10^3 вычислений целевой функции $E(\theta)$. Таким образом, для анализа статистики, собранной за 100 запусков, необходимо провести около 10^5 вычислений целевой функции, что сопоставимо с одним запуском с ис-

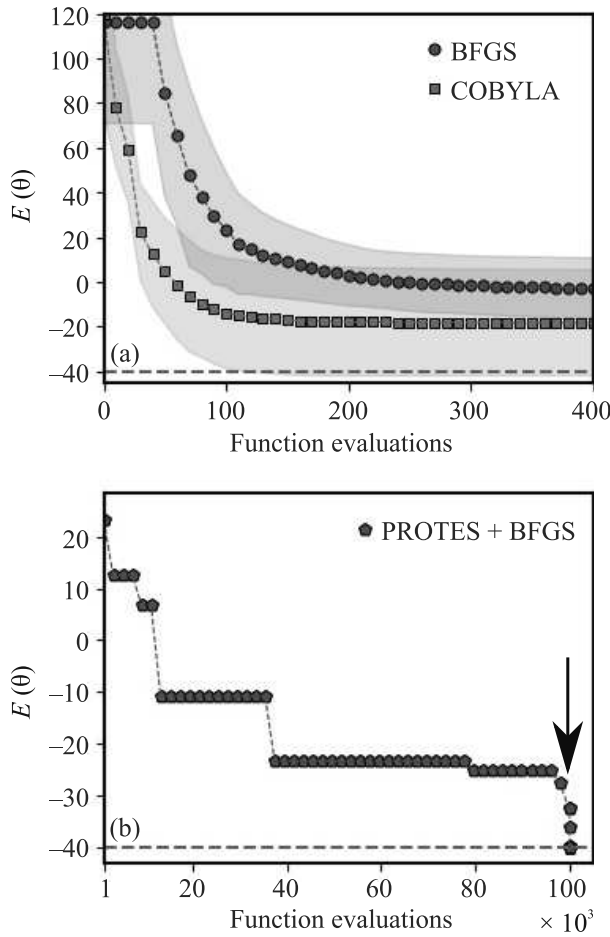


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость целевой функции $E(\theta)$ в алгоритме VQE от количества ее вычислений для оптимизаторов BFGS, COBYLA (a) и комбинации методов PROTES и BFGS (b) для двумерной задачи открытой разработки месторождения, показанной на рис. 1a. Расчеты с помощью классических методов BFGS и COBYLA усреднены по 100 запускам со случайным начальным приближением, распределенным равномерно на $[0, 2\pi]^{\times d}$. Закрашенные области соответствуют среднеквадратичному разбросу значений $E(\theta)$, а пунктиром отмечен уровень оптимального значения целевой функции $E_* = -40$. Черной стрелкой обозначена точка переключения, после которой расчет в рамках тензорного метода PROTES заменяется на классический оптимизатор BFGS

пользованием алгоритма PROTES. Также стоит отметить, что для сложных задач невозможно определить точное минимальное значение целевой функции, что ограничивает возможность проверки оптимального значения энергии после серии запусков расчета с использованием классического оптимизатора. Представленный альтернативный подход, основанный на алгоритме PROTES, позволяет избежать накопления статистических ошибок за несколько рас-

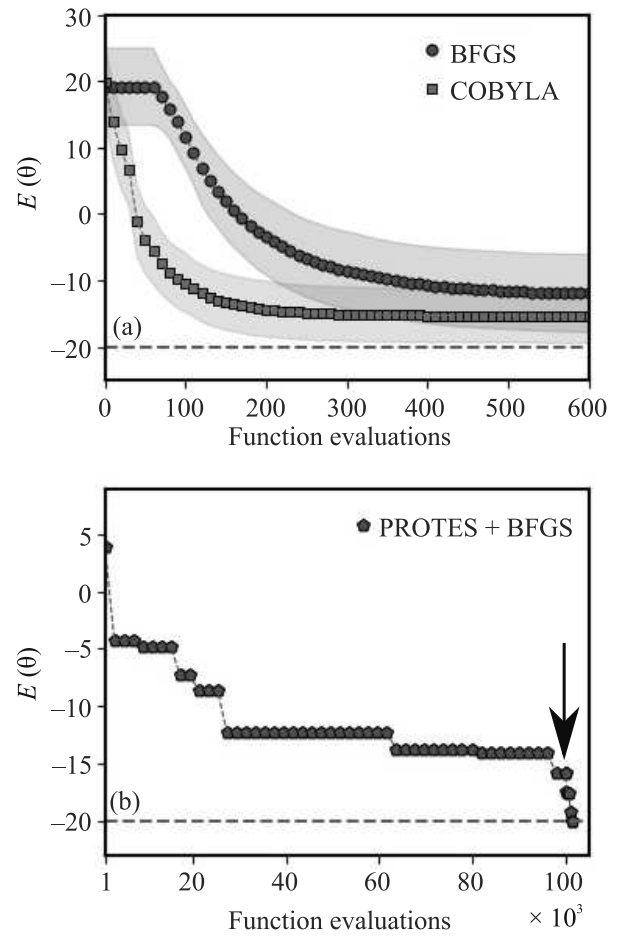


Рис. 3. (Цветной онлайн) Аналогично рис. 2, но для обобщенной двумерной модели открытого карьера, показанной на рис. 1b. Пунктирная линия обозначает уровень оптимального значения целевой функции $E_* = -20$

четов и гарантирует достижение оптимального значения, что можно использовать для верификации результатов, полученных с использованием различных доступных методов оптимизации. В то же время для некоторых конкретных неглубоких параметризованных квантовых схем, где общее число вариационных параметров невелико, например, в QAOA, подход на основе алгоритма PROTES требует на порядки меньшего количества вычислений целевой функции для достижения оптимального значения по сравнению с представленными результатами для задачи открытой добычи полезных ископаемых (см. [61]), что также делает этот подход альтернативой существующим классическим методам оптимизации.

Заключение. В рамках квантового алгоритма VQE нами предложен новый метод оптимизации параметризованных квантовых схем, предполагающий использование комбинации вероятностного алгорит-

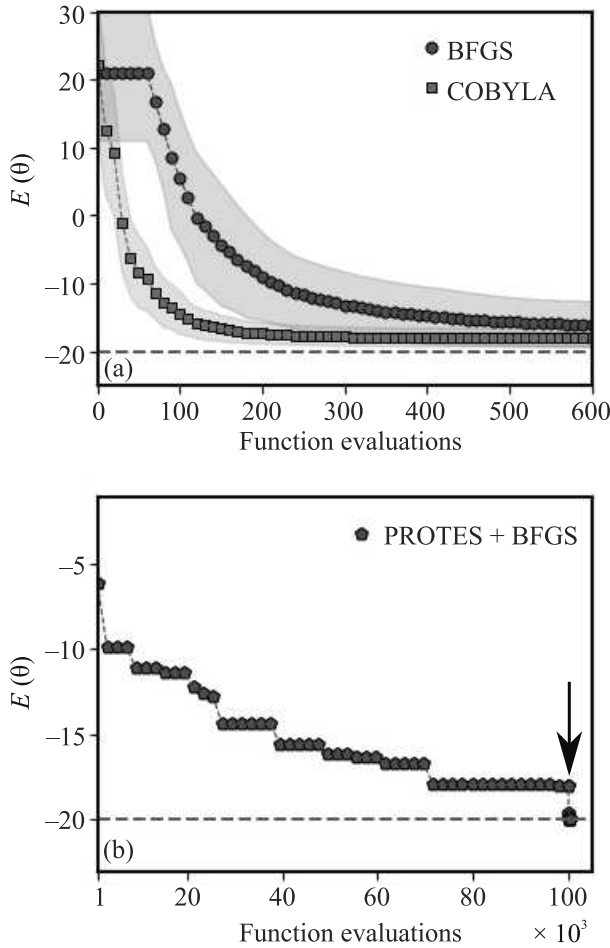


Рис. 4. (Цветной онлайн) Аналогично рис. 2, но для случая трехмерной модели открытого карьера, показанного на рис. 1с. Пунктирная линия отмечает положение уровня оптимального значения целевой функции $E_* = -20$

ма тензорной оптимизации и классического подхода на основе градиентного спуска для нахождения оптимального значения целевой функции. Оптимизация включает таким образом два шага: на первом – целевая функция $E(\theta)$ алгоритма VQE рассматривается дискретным образом в форме многомерного тензора, глобальный минимум которого θ_* вычисляется с помощью PROTES. Небезынтересно, что данный метод обладает несколькими достоинствами с точки зрения оптимизации параметризованных квантовых схем: в самом деле, он не предполагает использование эвристик для задания начального приближения для вариационных параметров. Не менее важно то, что PROTES не использует локальные свойства целевой функции, например, ее градиент; напротив, использует подход в духе стохастической оптимизации, что позволяет избежать проблемы с исчезающе ма-

лыми градиентами. На втором этапе предложенного нами подхода, значения вариационных параметров θ'_* , полученные с использованием PROTES, передаются в качестве начального значения классическому градиентному оптимизатору, несколько итераций которого позволяют улучшить конечный результат оптимизации в локальной окрестности θ'_* .

Преимущества предложенного подхода продемонстрированы нами на примере задачи разработки открытого месторождения, представленной в форме задачи бинарной оптимизации, где структура месторождения моделируется с помощью направленного графа. Для решения задачи, которую можно свести к задаче поиска основного состояния соответствующего гамильтониана, использован вариационный квантовый алгоритм VQE. Для двумерной и трехмерной задач разработки открытого карьера исследована эволюция целевой функции $E(\theta)$ в зависимости от числа обращений к ней различными оптимизаторами. Показано, что результат оптимизации как в случае использования классических градиентных, так и в случае неградиентных методов оптимизации, крайне чувствителен к выбору начального приближения для вариационных параметров. Продemonстрировано, что неградиентный метод оптимизации COBYLA обладает лучшей сходимостью по сравнению с градиентным методом BFGS, однако в обоих случаях расчет застревает в состоянии локального минимума. Использование метода оптимизации на основе PROTES позволяет избежать данной проблемы и гарантирует достижение целевой функцией $E(\theta)$ оптимального значения. Для рассмотренных нами задач найдено, что использование PROTES в квантовом алгоритме VQE требует большего числа вычислений целевой функции по сравнению с классическими оптимизаторами, но позволяет избежать сбора статистики по нескольким расчетам в рамках квантового алгоритма. Мы предполагаем, что предложенный нами подход может найти приложения для разработки эффективных методов оптимизации в контексте вариационных квантовых алгоритмов.

Авторы выражают признательность за предоставление вычислительных ресурсов суперкомпьютера Сколтеха “Zhores” [62] для проведения вычислений.

Финансирование работы. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда #22-11-00074.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. J. Preskill, *Quantum* **2**, 79 (2018).
2. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 10th Anniversary Edition, Cambridge University Press, Cambridge (2010).
3. H. J. Briegel, D. Browne, W. Dür, R. Raussendorf, and M. van den Nest, *Nat. Phys.* **5**, 19 (2009).
4. R. Raussendorf and T.-C. Wei, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **3**, 239 (2012).
5. E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, arXiv:quant-ph/0001106 (2000).
6. D. Aharonov, W. van Dam, J. Kempe, Z. Landau, S. Lloyd, and O. Regev, arXiv:quant-ph/0405098 (2004).
7. J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, and S. Lloyd, *Nature* **549**, 195 (2017).
8. J. Biamonte, *Phys. Rev. A* **103**, L030401 (2021).
9. M. P. Harrigan, K. J. Sung, M. Neeley et al. (Collaboration), *Nat. Phys.* **17**, 332 (2021).
10. S. Ebadi, A. Keesling, M. Cain et al. (Collaboration), *Science* **376**, 1209 (2022).
11. S. Yarkoni, E. Raponi, T. Bäck, and S. Schmitt, *Rep. Prog. Phys.* **85**, 104001 (2022).
12. M.-T. Nguyen, J.-G. Liu, J. Wurtz, M. D. Lukin, S.-T. Wang, and H. Pichler, *PRX Quantum* **4**, 010316 (2023).
13. A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *Nat. Commun.* **5**, 4213 (2014).
14. E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, arXiv:1411.4028 (2014).
15. N. Moll, P. Barkoutsos, L. S. Bishop et al. (Collaboration), *Quantum Sci. Technol.* **3**, 030503 (2018).
16. Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferova, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N. P. D. Sawaya, S. Sim, L. Veis, and A. Aspuru-Guzik, *Chem. Rev.* **119**, 10856 (2019).
17. A. Kardashin, A. Pervishko, J. Biamonte, and D. Yudin, *Phys. Rev. A* **104**, L020402 (2021).
18. J. Kattemölle and J. van Wezel, *Phys. Rev. B* **106**, 214429 (2022).
19. M. Schuld, I. Sinayskiy, and F. Petruccione, *Contemp. Phys.* **56**, 172 (2015).
20. J. Biamonte, P. Wittek, N. Pancotti, P. Rebentrost, N. Wiebe, and S. Lloyd, *Nature* **549**, 195 (2017).
21. M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cincio, and P. J. Coles, *Nat. Rev. Phys.* **3**, 625 (2021).
22. G. E. Crooks, arXiv:1811.08419 (2018).
23. L. Zhou, S.-T. Wang, S. Choi, H. Pichler, and M. D. Lukin, *Phys. Rev. X* **10**, 021067 (2020).
24. F. G. Fuchs, H. Kolden, N. H. Aase, and G. Sartor, *SN Comput. Sci.* **2**, 89 (2021).
25. S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang, *Quantum* **6**, 678 (2022).
26. M. T. Khumalo, H. A. Chieza, K. Prag, and M. Woolway, *Neural. Comput. & Applic.*, 1 (2022).
27. W. Qian, R. A. M. Basili, M. M. Eshaghian-Wilner, A. Khokhar, G. Luecke, and J. P. Vary, *Entropy* **25**, 1238 (2023).
28. U. Azad, B. K. Behera, E. A. Ahmed, P. K. Panigrahi, and A. Farouk, *IEEE Trans. Intell. Transp. Sys.* **24**, 7564 (2023).
29. H. Lerch and I. F. Grossmann, *Trans. CIM* **68**, 17 (1965).
30. C. Meagher, R. Dimitrakopoulos, and D. Avis, *J. Min. Sci.* **50**, 508 (2014).
31. D. S. Hochbaum and A. Chen, *Oper. Res.* **48**, 894 (2000).
32. R. Khalokakaie, P. A. Dowd, and R. J. Fowell, *Min. Tech.* **109**, 77 (2000).
33. D. S. Hochbaum, *Oper. Res.* **56**, 992 (2008).
34. T. Hao, X. Huang, C. Jia, and C. Peng, *Front. Phys.* **10**, 90659010 (2022).
35. A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *Nat. Commun.* **5**, 4213 (2014).
36. Y. Hindy, J. Pointing, M. Tolunay, S. Venkatarao, M. Motta, and J. A. Latone, arXiv:2107.11345 (2021).
37. J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Neven, *Nat. Commun.* **9**, 4812 (2018).
38. D. Wierichs, C. Gogolin, and M. Kastoryano, *Phys. Rev. Res.* **2**, 043246 (2020).
39. A. Arrasmith, M. Cerezo, P. Czarnik, L. Cincio, and P. J. Coles, *Quantum* **5**, 558 (2021).
40. E. Grant, L. Wossnig, M. Ostaszewski, and M. Benedetti, *Quantum* **3**, 214 (2019).
41. A. A. Mele, G. B. Mbeng, G. E. Santoro, M. Collura, and P. Torta, *Phys. Rev. A* **106**, L060401 (2022).
42. K. Zhang, L. Liu, M.-H. Hsieh, and D. Tao, arXiv:2203.09376 (2022).
43. A. Batsheva, A. Chertkov, G. Ryzhakov, and I. Oseledets, arXiv:2301.12162 (2023).
44. A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Nature* **549**, 242 (2017).
45. S. Sim, P. D. Johnson, and A. Aspuru-Guzik, *Adv. Quantum Technol.* **2**, 1900070 (2019).
46. M. Larocca, N. Ju, D. García-Martín, P. J. Coles, and M. Cerezo, *Nat. Comput. Sci.* **3**, 542 (2023).
47. J. Romero, R. Babbush, J. R. McClean, C. Hempel, P. J. Love, and A. Aspuru-Guzik, *Quantum Sci. Technol.* **4**, 014008 (2019).
48. P.-L. Dallaire-Demers, J. Romero, L. Veis, S. Sim, and A. Aspuru-Guzik, *Quantum Sci. Technol.* **4**, 045005 (2019).

49. D. Wecker, M. B. Hastings, and M. Troyer, *Phys. Rev. A* **92**, 042303 (2015).
50. M. J. D. Powell, *A Direct Search Optimization Method That Models the Objective and Constraint Functions by Linear Interpolation* in *Advances in Optimization and Numerical Analysis*, Springer, Dordrecht (1994).
51. L. Slattey, B. Villalonga, and B. K. Clark, *Phys. Rev. Res.* **4**, 023072 (2022).
52. M. S. Jattana, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michielsen, *Phys. Rev. Appl.* **19**, 024047 (2023).
53. I. Oseledets and E. Tyrtyshnikov, *Linear Algebra Appl.* **432**, 70 (2010).
54. I. V. Oseledets, *SIAM J. Sci. Comput.* **33**, 2295 (2011).
55. A. Cichocki, N. Lee, I. Oseledets, A. H. Phan, Q. Zhao, and D. P. Mandic, *Found. Trends Mach. Learn.* **9**, 249 (2016).
56. A. Cichocki, N. Lee, I. Oseledets, A. H. Phan, Q. Zhao, and D. P. Mandic, *Found. Trends Mach. Learn.* **9**, 431 (2017).
57. S. Dolgov, K. Anaya-Izquierdo, C. Fox, and R. Scheichl, *Stat. Comput.* **30**, 603 (2020).
58. G. Aleksandrowicz, T. Alexander, P. Barkoutsos et al. (Collaboration), <https://doi.org/10.5281/zenodo.2562111> (2019).
59. J. E. Dennis and R. B. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia (1996).
60. P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant et al. (Collaboration), *Nat. Methods* **17**, 261 (2020).
61. G. Paradezhenko, A. Pervishko, and D. Yudin, *Phys. Rev. A* **109**, 012436 (2024).
62. I. Zacharov, R. Arslanov, M. Gunin et al. (Collaboration), *Open Eng.* **9**, 512 (2019).