



## محاسبه حالت‌های پایه و برانگیخته مدل آیزینگ با استفاده از الگوریتم بهینه سازی تقریبی کوانتومی

حسین داودی یگانه\*، محمود مهدیان و رضا محمدی آقدرق

گروه فیزیک نظری و اختر فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

پست الکترونیکی: h.yeganeh@tabrizu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۵/۲۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۸/۳)

### چکیده

مدل آیزینگ کوانتومی یک بعدی برای توصیف بسیاری از سیستم‌های فیزیکی به کار می‌رود، از این رو محاسبه انرژی حالت‌های پایه و ابرنگیخته آن که کاربردهای زیادی در مکانیک آماری دارد، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. ما با استفاده از الگوریتم بهینه سازی تقریبی کوانتومی که از نوع الگوریتم‌های ترکیبی کوانتومی-کلاسیکی است، حالت‌های پایه و برانگیخته این مدل را به دست می‌آوریم. برای این منظور، ابتدا با استفاده از الگوریتم بهینه سازی تقریبی کوانتومی حالت پایه را پیدا می‌کنیم سپس با اضافه کردن یک جمله هم‌پوشانی این الگوریتم را تعمیم می‌دهیم تا حالت‌های برانگیخته به دست آید. ما انرژی حالت پایه و برانگیخته را برای ضرایب مختلف جفت‌شدگی محاسبه کرده‌ایم که سازگاری بسیار بالایی با محاسبات دقیق دارد.

**واژه‌های کلیدی:** مدل آیزینگ یک بعدی، حالت پایه و برانگیخته، الگوریتم بهینه سازی تقریبی کوانتومی، الگوریتم ترکیبی کوانتومی-کلاسیکی

### ۱. مقدمه

کار می‌رود [۱]. با توجه به کاربرد گسترده این مدل در زمینه‌های مختلفی از جمله مدل گاز شبکه‌ای [۲]، مدل شبکه‌ای گاز-مایع [۳] و سیستم‌های زیستی [۴ و ۵] و انتقال فاز [۵]، یافتن حل دقیق، دینامیک و انرژی حالت پایه و برانگیخته آن بسیار مورد توجه قرار گرفته است [۶]. محاسبه ویژه مقادیر هامیلتونی سیستم‌های کوانتومی با درجات آزادی زیاد یکی از مسائل چالش برانگیز و سخت محسوب می‌شود. ویژه مقادیر هامیلتونی، انرژی حالت پایه و حالت برانگیخته را مشخص

بسیاری از سیستم‌های فیزیکی را می‌توان به طور دقیق توسط یک شبکه از اتم‌هایی با اندرکنش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها نشان داد. ساده‌ترین و عمومی‌ترین نسخه از این نظریه همان مدل آیزینگ کوانتومی یک بعدی است. مدل آیزینگ با برهم کنش نزدیک‌ترین همسایه، یکی از ساده‌ترین مدل‌های اسپینی است که برای توصیف رفتار فرومغناطیسی در مکانیک آماری به

تقریبی کوانتومی<sup>۱</sup> (QAOA) است [۱۲].

الگوریتم QAOA یک روش بهینه سازی مناسب برای یافتن پاسخ تقریبی مسائل بهینه سازی ترکیبی است. از این الگوریتم در یافتن برش بیشینه در گراف‌های منظم استفاده می‌شود. این الگوریتم پاسخ مسئله بهینه سازی ترکیبی را به طور تقریبی به دست می‌دهد و طراحی آن طوری است که به عدد صحیح  $P \geq 1$  بستگی داشته و کیفیت و پاسخ تقریبی مسئله بهینه سازی ترکیبی نیز با افزایش گام  $P$  بهتر و به پاسخ دقیق نزدیک‌تر می‌شود. عدد  $P$  در الگوریتم تعداد پارامترهای به کار رفته را مشخص می‌کند بدین صورت که با افزایش عدد  $P$  تعداد پارامترهای که در حالت اولیه به کار گرفته می‌شود زیاد می‌شود یا به عبارت دیگر تعداد گیت‌های کوانتومی در الگوریتم افزایش می‌یابد. بدین منظور هامیلتونی مسئله مورد نظر به یک هامیلتونی آیزینگ نگاشت داده می‌شود و یک حالت پارامتری اولیه در نظر گرفته می‌شود سپس ویژه مقادیر هامیلتونی با استفاده از حالت پارامتری محاسبه می‌شود. این مقادیر محاسبه شده به یک کامپیوتر کلاسیکی فرستاده می‌شود تا پارامترهای جدید به دست آیند. در ادامه این پارامترها به کامپیوتر کوانتومی فرستاده می‌شود تا یک حالت جدید ایجاد شود. این مراحل تا یافتن جواب بهینه ادامه می‌یابد. در حقیقت با این کار، ویژه مقادیر هامیلتونی که متناظر با جواب‌های مسئله برش بیشینه است به دست می‌آید (برای جزییات بخش ۲ را ببینید). در اینجا ما با تعمیم الگوریتم QAOA به محاسبه حالت‌های برانگیخته هامیلتونی آیزینگ می‌پردازیم. برای این کار با اضافه کردن جمله هم‌پوشانی حالت‌ها به الگوریتم و استفاده از چارچوب کلی الگوریتم‌های ترکیبی، حالت‌های برانگیخته و پایه را پیدا می‌کنیم.

این مقاله در بخش‌های زیر تنظیم شده است. در بخش دوم الگوریتم QAOA و مدل تعمیم یافته آن را معرفی می‌کنیم. در بخش سوم با استفاده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته حالت پایه و برانگیخته مدل آیزینگ را محاسبه می‌کنیم و در نهایت در بخش چهارم به نتیجه گیری و بحث پرداخته خواهد شد.

می‌کند. کامپیوترهای کلاسیکی، به دلیل رشد نمایی متغیرهایی که برای توصیف سیستم کوانتومی به کار گرفته می‌شود، قادر به شبیه سازی این سیستم‌ها نیستند. برای رفع این مشکل ایده کامپیوترهای کوانتومی توسط فاینمن مطرح شد [۷] که در آن از یک سیستم کنترل‌پذیر برای شبیه سازی رفتار سایر سیستم‌های کوانتومی استفاده می‌شود. به عبارت ساده‌تر یک کامپیوتر کوانتومی متشکل از الگوریتم‌های کوانتومی است که شامل گیت‌های کوانتومی است که روی یک حالت اولیه معین اثر می‌کند و طوری تنظیم شده‌اند که حالت نهایی پس از اندازه گیری جواب یک مسئله معین را با احتمال بسیار خوب در برداشته باشد. بسیاری از الگوریتم‌های کوانتومی به منابع فیزیکی زیادی احتیاج دارند که با توجه به منابع فیزیکی حال حاضر، این امکان فراهم نیست. برای حل این مشکل، الگوریتم‌های ترکیبی کوانتومی-کلاسیکی معرفی شده‌اند [۱۳-۸]. الگوریتم‌های ترکیبی، برای استفاده همزمان از هر دو منابع کوانتومی و کلاسیکی طراحی شده‌اند و قادر به حل مسائلی هستند که حل آنها با کامپیوتر کلاسیکی امکان پذیر نیست. این الگوریتم‌ها روی کامپیوترهای کوانتومی مقیاس-متوسط نوفه‌ای به کار گرفته می‌شوند. ایده اصلی این روش، تقسیم مسئله به دو قسمت است که هر قسمت وظیفه‌ای مجزا دارد و به طور مؤثری روی کامپیوتر کوانتومی و کامپیوتر کلاسیکی اجرا می‌شود. فرض اساسی در کامپیوترهای کوانتومی مقیاس-متوسط نوفه‌ای این است که به تصحیح خطای کوانتومی نیازی نیست. با توجه به تعداد محدودی از کیوبیت‌هایی که در الگوریتم‌های ترکیبی به کار گرفته می‌شوند تصحیح خطا لازم نیست. این الگوریتم‌ها یک جواب تقریبی برای مسئله بیان می‌کنند. آماده سازی حالت کوانتومی پارامتری و اندازه‌گیری کوانتومی در کامپیوتر کوانتومی انجام می‌شود و بهینه‌سازی پارامترها در کامپیوتر کلاسیکی صورت می‌گیرد. این الگوریتم‌ها کاربرد وسیعی در محاسبات کوانتومی دارند. برای مثال یافتن انرژی حالت پایه سیستم‌های مولکولی یا یافتن دینامیک کوانتومی یک سیستم کوانتومی با استفاده از این الگوریتم‌ها امکان پذیر است. یکی از این الگوریتم‌ها، الگوریتم بهینه سازی

۱. Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

## ۲. الگوریتم QAOA

الگوریتم QAOA از دسته الگوریتم‌های ترکیبی کوانتومی - کلاسیکی که بر اساس قوانین وردشی کار می‌کنند، محسوب می‌شود که در زمینه مسائل بهینه سازی به کار می‌رود. همانگونه که اشاره شد یک حالت پارامتری باید در نظر گرفته شود. این حالت به صورت زیر بیان می‌شود:

$$|\beta, \gamma\rangle_p = e^{-i\beta_p H_x} e^{-i\gamma_p H_I} \dots e^{-i\beta_1 H_x} e^{-i\gamma_1 H_I} |+\rangle, \quad (1)$$

که در آن  $H_I$  هامیلتونی اندرکنشی و  $H_x$  عملگر پارامغناطیس و  $|+\rangle$  ویژه حالت عملگر  $\sigma_x$  با ویژه مقدار یک است. پس:

$$H_I = -\sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \\ H_x = -\sum_{i=1}^N \sigma_i^x, \quad (2)$$

$$|+\rangle = \otimes (|0\rangle + |1\rangle) / \sqrt{2},$$

که در آن  $\sigma_x$  و  $\sigma_z$  عملگرهای پاولی هستند. مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی مسئله ( $H$ ) با رابطه زیر داده می‌شود که در حقیقت تابع هدف است و باید بهینه شود:

$$f_p(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma | H | \beta, \gamma \rangle_p, \quad (3)$$

توجه کنید که در الگوریتم بهینه سازی تقریب کوانتومی به ازای هر  $P$  دلخواه  $2P$  تا پارامتر (زاویه) به صورت  $(\gamma, \beta) = (\gamma_1 \dots \gamma_p, \beta_1 \dots \beta_p)$  تعریف می‌شود که به ترتیب در محدوده‌های  $\gamma \in [0, 2\pi]$  و  $\beta \in [0, \pi]$  قرار دارند، و با بهینه کردن تابع هدف  $f_p(\beta, \gamma)$  دست می‌آیند. با کمینه یا بیشینه کردن تابع هدف  $f_p(\beta, \gamma)$  جواب مسئله بهینه سازی به دست می‌آید. برای مثال با بیشینه کردن  $f_p(\beta, \gamma)$  جواب‌های مسئله بیشینه برش به دست می‌آید یا با کمینه کردن آن انرژی حالت پایه هامیلتونی به دست می‌آید. نکته دیگر آن است که هامیلتونی حتما باید به شکل آیزینگ باشد. آماده سازی حالت اولیه و اندازه گیری در کامپیوتر کوانتومی انجام می‌شود و بهینه سازی تابع هدف در یک کامپیوتر کلاسیکی انجام می‌شود.

حال ما این الگوریتم را برای یافتن حالت‌های برانگیخته به صورت زیر در نظر می‌گیریم که در آن تابع هدف به صورت

زیر بیان می‌شود:

$$f_k(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma | H | \beta, \gamma \rangle_k + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i |\beta, \gamma | \beta^*, \gamma^* \rangle_i|^2, \quad (4)$$

در این رابطه، ضریب حقیقی  $\beta_i$  در شرط  $\beta_i \leq E_k - E_i$  صدق می‌کند که مرتبط با اختلاف بین ترازهای انرژی است. برای یافتن حالت‌های برانگیخته باید تابع  $f_k(\beta, \gamma)$  کمینه شود. جمله اول در رابطه فوق ویژه مقادیر انرژی را می‌دهد که می‌توان آن را با استفاده از چارچوب الگوریتم QAOA به دست آورد. جمله دوم یک جمع روی جملات هم‌پوشانی حالت‌های پارامتری است که می‌توان آن را با استفاده از کامپیوتر کوانتومی محاسبه کرد. توجه کنید در رابطه (۴)، ابتدا پارامترهای  $\beta, \gamma$  حالت پایه محاسبه می‌شود سپس با کمینه کردن تابع  $f_k(\beta, \gamma)$  مقادیر  $\beta, \gamma$  مربوط به اولین حالت برانگیخته به دست می‌آید و این کار تا یافتن تمام حالت‌های برانگیخته ادامه می‌یابد؛ یعنی برای یافتن حالت برانگیخته  $k$  باید پارامترهای حالت صفر تا  $k-1$  به دست آیند. توجه به این نکته ضروری است که الگوریتم تعمیم یافته به طور بالقوه برای محاسبه حالت‌های برانگیخته کم انرژی به کار می‌رود؛ زیرا با افزایش انرژی تعداد پارامترهای بهینه‌سازی  $k-1$  می‌شود که بررسی مسئله بسیار دشوار می‌شود.

## ۳. محاسبه حالت پایه و برانگیخته مدل آیزینگ

مدل آیزینگ کوانتومی یک بعدی با جفت‌شدگی بین همسایه‌های نزدیک در حضور میدان مغناطیسی عرضی با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$H_{TFIM} = -j \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h_x \sum_{i=1}^N \sigma_i^x, \quad (5)$$

در این رابطه  $\sigma_i^x, \sigma_i^z$  ماتریس‌های پائولی بوده و  $j, h_x$  به ترتیب نشان دهنده قدرت میدان مغناطیسی عرضی و ضریب جفت‌شدگی بین همسایه‌های  $i$  و  $i+1$  هستند. حل دقیق این مدل با استفاده از روش‌های عددی و روش تحلیلی امکان پذیر است. مرسوم‌ترین روش حل، استفاده از تبدیل جردن-ویگنر برای تبدیل هامیلتونی اسپینی به هامیلتونی فرمیونی است تا

$\epsilon_k = 2J(1 + h_x^x - 2h_x \cos ka)^{1/2}$   
این هامیلتونی قطری می‌شود و می‌توان انرژی و حالت‌های آن را به دست آورد. هامیلتونی آیزینگ یک سیستم اسپینی را نیز توصیف می‌کند که در محاسبات کوانتومی به کیوبیت تعبیر می‌شود. پس ما یک سیستم کیوبیتی را در نظر می‌گیریم و  $h_x = 1$  را قرار می‌دهیم. حال حالت پایه و برانگیخته این مدل را با استفاده از الگوریتم تعمیم یافته QAOA به دست می‌آوریم.

### ۳.۱. یافتن حالت پایه مدل آیزینگ

بدون از دست دادن کلیت مسئله، تعداد کیوبیت‌ها را  $N = 4$  و  $j = 1$  در نظر می‌گیریم. پس خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} H_X &= -(\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x + \sigma_4^x) \\ H_I &= -(\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^z \sigma_3^z + \sigma_3^z \sigma_4^z + \sigma_4^z \sigma_1^z) \\ |\beta, \gamma\rangle_p &= e^{-i\beta_p H_x} e^{-i\gamma_p H_I} \dots e^{-i\beta_p H_x} e^{-i\gamma_p H_I} / \\ &+ \rangle_1 / + \rangle_2 / + \rangle_3 / + \rangle_4 \end{aligned} \quad (6)$$

همچنین تابع هدف به صورت زیر است:

$f_p(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma | P H_{TFIM} | \beta, \gamma \rangle_p$   
در حالت عمومی برای مدل آیزینگ یک بعدی با  $N$  های زوج و ذرات اسپین  $\frac{1}{2}$  با شرایط مرزی دوره‌ای، هر حالت کوانتومی توسط الگوریتم QAOA<sub>p</sub> برای  $P$  های اختیاری با حالت  $|\beta, \gamma\rangle_p$  مشخص می‌شود. پس می‌توان این حالت را برای  $QAOA_{P=\frac{N}{4}}$  هم به دست آورد. حالت پایه هامیلتونی  $H_{TFIM}$  با کمینه کردن رابطه (۳) به دست می‌آید. حالت  $|\beta, \gamma\rangle_p$  و تابع هدف برای سیستم چهار کیوبیتی و گام  $P = 1$  به صورت زیر داده می‌شود:

$$\begin{aligned} |\beta, \gamma\rangle_1 &= e^{-i\beta H_x} e^{-i\gamma H_I} |+\rangle_1 |+\rangle_2 |+\rangle_3 |+\rangle_4 \\ f_1(\beta, \gamma) &= \langle \beta, \gamma | H_{TFIM} | \beta, \gamma \rangle_1, \end{aligned} \quad (7)$$

برای قسمت کوانتومی از بسته کوانتومی کیوتیپ و پلتفرم پایکیول استفاده می‌کنیم. کیوتیپ [۱۴] یک بسته محاسباتی است که بر اساس زبان پایتون نوشته شده است و پایکیول [۱۵] پلتفرمی برای اتصال به کامپیوتر کوانتومی است که در فضای ابری

توان آن را در پایه‌های فرمیونی قطری کرد. ما در اینجا به اختصار این روش را شرح می‌دهیم [۱]. عملگرهای بالا و پایین برنده اسپینی با رابطه  $\sigma_i^\pm = (\sigma_i^x \pm i\sigma_i^y) / 2$  داده می‌شوند. عملگر پایین برنده  $\sigma_i^-$  هم‌ارز عملگر خلق فرمیونی  $c_i^\dagger$  و عملگر بالا برنده  $\sigma_i^+$  هم‌ارز عملگر فنا فرمیونی  $c_i$  است. بیان این هم‌ارزی به زبان ریاضی با استفاده از تبدیل جردن-ویگنر امکان پذیر است یعنی:

$$\begin{aligned} \sigma_i^- &= \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) c_i^\dagger, \quad \sigma_i^+ = \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) c_i, \\ c_i &= \left( \prod_{j<i} \sigma_j^z \right) \sigma_i^+, \quad c_i^\dagger = \left( \prod_{j<i} \sigma_j^z \right) \sigma_i^-, \\ \sigma_i^x, \sigma_i^z & \text{ برای عملگرهای پاولی} \end{aligned}$$

خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \sigma_i^z &= \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) (c_i + c_i^\dagger), \quad \sigma_i^x = 1 - 2c_i^\dagger c_i, \end{aligned}$$

بنابراین هامیلتونی آیزینگ با استفاده از تبدیل جردن-ویگنر به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_{i+1} c_i - 2h_x c_i^\dagger c_i + h_x), \\ \text{با استفاده از تبدیل فوریه } c_k &= 1/\sqrt{M} \sum_j c_j e^{ikja} \text{ که } M \end{aligned}$$

تعداد سایت‌ها و  $a$  فاصله شبکه است خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} H &= J \sum_k [ \gamma (h_x - \cos(ka)) c_k^\dagger c_k - \\ & \quad i \sin(ka) (c_{-k}^\dagger c_k^\dagger - c_{-k} c_k) - h_x ], \end{aligned}$$

هامیلتونی  $H$  در صورتی قطری پذیر است که عملگرهای  $c_{-k}^\dagger c_k^\dagger$  بر حسب ترکیب خطی از عملگرهای فرمیونی جدید  $c_k^\dagger$  و  $c_k$  نوشته شوند. با اثر دادن تبدیل بوگولیوبو، عملگرهای جدید  $\gamma_k$  به صورت زیر بیان می‌شوند:

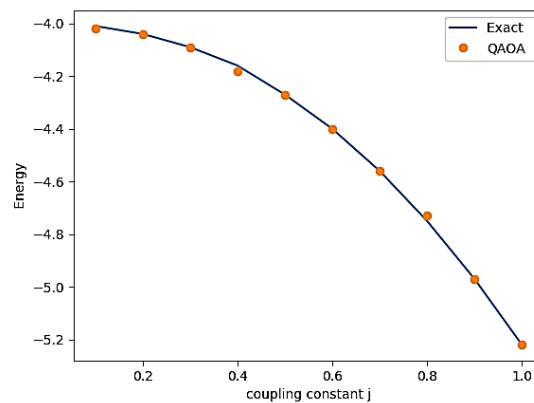
$$\gamma_k = \alpha_k c_k - i\beta_k c_{-k}^\dagger, \quad \alpha_k, \beta_k \in \mathbb{R}, \alpha_k + \beta_k = 1,$$

در این صورت با انتخاب

$$\alpha_k = \cos(\theta_k / 2), \beta_k = \sin(\theta_k / 2), \theta_k = \frac{\sin(ka)}{\cos(ka) - g}$$

هامیلتونی قطری به صورت زیر به دست می‌آید:

$$H = \sum_k \epsilon_k \left( \gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{4} \right)$$



شکل ۱. نمودار انرژی حالت پایه بر حسب ضریب جفت شدگی  $j$  در حل دقیق و الگوریتم QAOA. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم و جواب‌های حل دقیق برابر  $5 \times 10^{-2}$  است.

عرضی و در نقطه بحرانی  $h_x = 1$  و با فرض  $j = 1$  معادل با مقدار  $E_0 = -5/22$  به دست می‌آید. با قرار دادن مقادیر پارامترهای رابطه (۱۰) در  $(\beta, \gamma)_P$ ، حالت پایه به دست می‌آید. مشابه آنچه در بالا بیان شد، برای ضرایب جفت‌شدگی متفاوت انرژی حالت پایه را در گام  $P = 2$  برای  $f_2(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*)$  محاسبه کرده‌ایم. نتایج حاصل از الگوریتم با جواب‌های دقیق مقایسه شده است که نتایج آن در شکل ۱ آمده است. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم و جواب‌های حل دقیق برابر  $5 \times 10^{-2}$  است.

### ۲.۳. یافتن حالت‌های برانگیختگی مدل آیزینگ با استفاده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته

در این بخش سه حالت برانگیخته و انرژی‌های متناظر با آن را برای مدل آیزینگ یک بعدی برای یک سیستم چهار کیوبیتی با استفاده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته، به دست می‌آوریم. در حالت کلی برای به دست آوردن سه حالت برانگیخته هامیلتونی  $H_{TFIM}$  برای سیستم چهار کیوبیتی، از رابطه زیر استفاده می‌کنیم:

$$f_k(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma |_k H_{TFIM} | \beta, \gamma \rangle_k + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i |\langle \beta, \gamma |_k \beta^*, \gamma^* \rangle_i|^2 \quad k = 1, 2, 3 \quad (11)$$

(ایترنت) در دسترس است. همچنین از یک کامپیوتر کلاسیکی برای یافتن مقدار کمینه تابع هدف به روش بهینه سازی نلدر-مید<sup>۱</sup> مقدار استفاده شده است. نتایج زیر به دست می‌آیند:

$$\beta_1^* = 0/392, \quad \gamma_1^* = 1/767 \quad (8)$$

$$f_1(\beta_1^*, \gamma_1^*) = -4/82,$$

گام الگوریتم بهینه سازی تقریب کوانتومی را تا مرحله

$$P = \frac{N}{2}$$

برای سیستم  $N = 4$  کیوبیتی محاسبه می‌کنیم برای گام  $P = 2$ ، مشابه قسمت قبل خواهیم داشت:

$$|\beta_1, \gamma_1, \beta_2, \gamma_2\rangle_2 =$$

$$e^{-i\beta_1 H_x} e^{-i\gamma_1 H_I} e^{-i\beta_2 H_x} e^{-i\gamma_2 H_I} |+\rangle_1 |+\rangle_2 |+\rangle_3 |+\rangle_4,$$

$$f_2(\beta_1, \gamma_1, \beta_2, \gamma_2) = \langle \beta_1, \gamma_1, \beta_2, \gamma_2 | H_{TFIM} | \beta_1, \gamma_1, \beta_2, \gamma_2 \rangle_2 \quad (9)$$

با کمینه کردن تابع هدف خواهیم داشت:

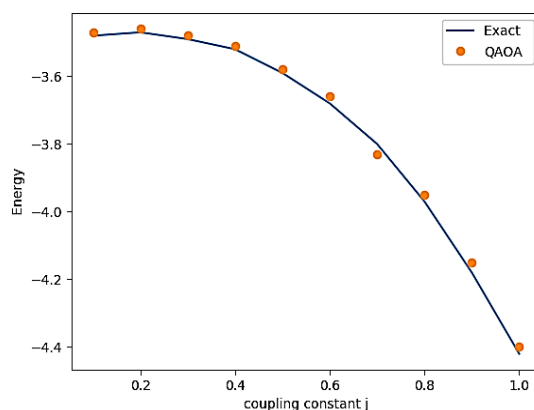
$$\beta_1^* = 1/719, \quad \gamma_1^* = 4/04$$

$$\beta_2^* = 2/56, \quad \gamma_2^* = 5/14 \quad (10)$$

$$f_2(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*) = -5/22$$

بنابراین در گام  $P = 2$  حالت پایه هامیلتونی  $H_{TFIM}$  به دست می‌آید. پس مقدار تابع  $f_2(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*)$  معادل با انرژی حالت پایه سیستم بوده و آن را با نماد  $E_0$  نمایش می‌دهیم. با این توصیف انرژی حالت پایه مدل آیزینگ در حضور میدان

۱. Nelder-Mead



شکل ۲. انرژی اولین حالت برانگیخته مدل آیزینگ بر حسب ضرایب جفت‌شدگی  $J$  در حل دقیق و الگوریتم QAOA تعمیم یافته QAOA. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم و جواب‌های حل دقیق برابر  $6/5 \times 10^{-2}$  است.

همچنین برای ضرایب جفت‌شدگی مختلف، انرژی اولین حالت برانگیخته را محاسبه کرده‌ایم و نتایج آن در نمودار شکل ۲ نشان داده شده است. در اینجا خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته و جواب‌های حل دقیق برابر با  $6/5 \times 10^{-2}$  است.

به همین ترتیب برای محاسبه دومین حالت برانگیخته هامیلتونی  $H_{TFIM}$ ، رابطه (۱۱) را برای  $k=2$  می‌نویسیم. در این صورت خواهیم داشت:

$$f_2(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma |_2 H_{TFIM} | \beta, \gamma \rangle_2 + \beta_0 \langle \beta, \gamma |_2 \beta^*, \gamma^* \rangle_0^2 + \beta_1 \langle \beta, \gamma |_2 \beta^*, \gamma^* \rangle_1^2, \quad (15)$$

که در آن  $|\beta^*, \gamma^*\rangle_1$  با قرار دادن پارامترهای رابطه (۱۴) در حالت  $|\beta, \gamma\rangle_p$  به دست می‌آید. همچنین مشابه آنچه در قسمت بالا بیان شد، و با در نظر گرفتن  $\beta_1 = 1/8$  انرژی دومین حالت برانگیخته و پارامترهای تابع هدف به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \beta_1^* &= 1/42 & \gamma_1^* &= 0/67 \\ \beta_2^* &= 0/58 & \gamma_2^* &= 5/85 \\ f_2(\beta^*, \gamma^*) &= f_2(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*) = E_2 = -2/56, \end{aligned} \quad (17)$$

همچنین به ازای ضرایب جفت‌شدگی مختلف انرژی دومین

برای بالا بردن دقت الگوریتم و یافتن جواب‌های دقیق‌تر، مسئله را در گام  $P=2$  در نظر می‌گیریم. برای یافتن حالت برانگیخته اول هامیلتونی  $H_{TFIM}$  در رابطه کلی (۱۲)، عدد  $k$  را برابر یک قرار می‌دهیم، پس داریم:

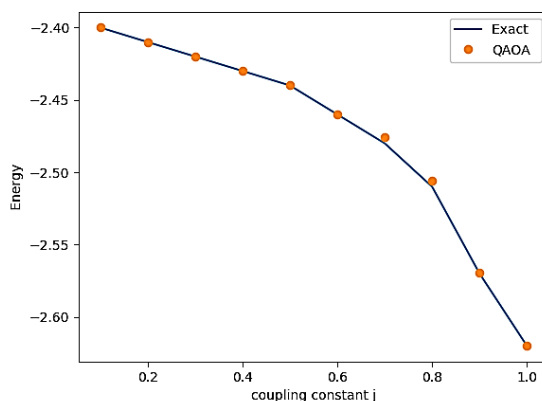
$$f_1(\beta, \gamma) = \langle \beta, \gamma | H_{TFIM} | \beta^*, \gamma^* \rangle_1 + \beta_0 \langle \beta, \gamma | \beta^*, \gamma^* \rangle_0 \quad (12)$$

که در آن حالت  $|\beta, \gamma\rangle_1$  به صورت زیر است:

$$|\beta, \gamma\rangle_1 = e^{-i\beta_x H_x} e^{-i\gamma_y H_y} e^{-i\beta_x H_x} e^{-i\gamma_y H_y} |+\rangle_1 |+\rangle_2 |+\rangle_3 |+\rangle_4 \quad (13)$$

با قرار دادن مقادیر پارامترهای رابطه (۱۰) در  $|\beta, \gamma\rangle_p$ ، حالت  $|\beta^*, \gamma^*\rangle_0$  به دست می‌آید. مشابه قسمت اول، برای قسمت کوانتومی الگوریتم از بسته کوانتومی کیوتیپ و پلتفرم پایکیول استفاده می‌کنیم و با در نظر گرفتن  $\beta_0 = 0/8$  و کمینه کردن تابع  $f_1(\beta, \gamma)$  به روش نلدر-مید و قرار دادن پارامترهای بهینه در تابع  $f_1(\beta, \gamma)$  و حالت کوانتومی  $|\beta, \gamma\rangle_1$  اولین حالت برانگیخته همراه با انرژی آن  $E_1$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \beta_1^* &= 0/95, & \gamma_1^* &= 6/04 \\ \beta_2^* &= 1/21, & \gamma_2^* &= 2/76 \\ f_1(\beta^*, \gamma^*) &= f_1(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*) = E_1 = -4/42, \end{aligned} \quad (14)$$



شکل ۳. انرژی دومین حالت برانگیخته مدل آیزینگ بر حسب ضرایب جفت‌شدگی  $J$  در حل دقیق و الگوریتم QAOA تعمیم یافته QAOA. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم و جواب‌های حل دقیق برابر  $4 \times 10^{-2}$  است.

$$f_3(\beta^*, \gamma^*) = f_3(\beta_1^*, \gamma_1^*, \beta_2^*, \gamma_2^*) = E_3 = -2/16, \quad (20)$$

مشابه قسمت‌های قبل به ازای ضرایب جفت‌شدگی مختلف انرژی سومین حالت برانگیخته محاسبه شده است. نتایج حاصل در نمودار شکل ۴ نشان داده شده است. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته و جواب‌های دقیق برابر با  $7 \times 10^{-2}$  است.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، با استفاده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته حالت پایه و برانگیخته مدل آیزینگ کوانتومی یک بعدی را محاسبه کردیم. بدین منظور در ابتدا با استفاده از الگوریتم QAOA حالت پایه را برای یک سیستم چهارکیوبیتی به دست آوردیم که در آن از بسته محاسبات کوانتومی کیوتیپ و پلتفرم پایکیول و روش بهینه‌سازی سازی نلدر-مید، انرژی و حالت پایه را به دست آوردیم. سپس برای محاسبه حالت‌های برانگیخته مدل آیزینگ الگوریتم QAOA را تعمیم دادیم. برای این کار یک جمله هم‌پوشانی تابع هدف اضافه کردیم و حالت‌های برانگیخته را در چارچوب الگوریتم معرفی شده به دست آوردیم. نتایج حاصل را به ازای ضرایب جفت‌شدگی مختلف به دست آوردیم. بدین صورت با استفاده از یک الگوریتم ترکیبی کوانتومی-کلاسیکی

حالت برانگیخته محاسبه شده است. نتایج حاصل در نمودار شکل ۳ نشان داده شده است. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم QAOA تعمیم یافته و جواب‌های حل دقیق برابر با  $4 \times 10^{-2}$  است.

در نهایت سومین حالت برانگیخته و انرژی آن مشابه دو حالت قبلی برای ضرایب جفت‌شدگی مختلف به صورت زیر به دست می‌آید:

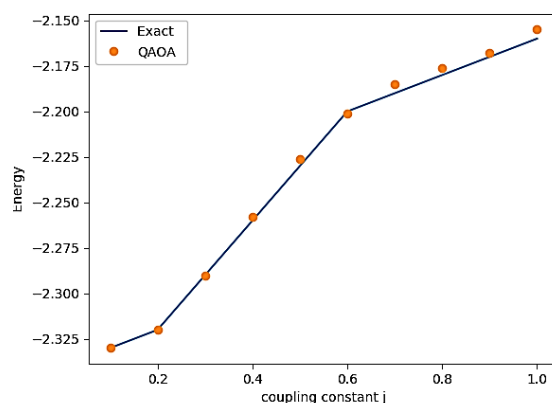
$$\begin{aligned} f_3(\beta, \gamma) = & (\langle \beta, \gamma |_3 H_{TFIM} | \beta, \gamma \rangle_3 \\ & + \beta_0 | \langle \beta, \gamma |_3 \beta^*, \gamma^* \rangle_0 |^2 \\ & + \beta_1 | \langle \beta, \gamma |_3 \beta^*, \gamma^* \rangle_1 |^2 \\ & + \beta_2 | \langle \beta, \gamma |_3 \beta^*, \gamma^* \rangle_2 |^2), \end{aligned} \quad (18)$$

که در آن  $| \beta^*, \gamma^* \rangle_p$  با قرار دادن پارامترهای رابطه (۱۸) در حالت  $| \beta, \gamma \rangle_p$  به دست می‌آید. همچنین حالت  $| \beta^*, \gamma^* \rangle_3$  به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} | \beta, \gamma \rangle_3 = & e^{-i\beta_0 H_x} e^{-i\gamma_0 H_1} e^{-i\beta_1 H_x} e^{-i\gamma_1 H_1} | + \rangle_1 | + \rangle_2 | + \rangle_3 | + \rangle_4 \\ & (19) \end{aligned}$$

همچنین:

$$\begin{aligned} \beta_1^* &= 1/28, & \gamma_1^* &= 1/53 \\ \beta_2^* &= 1/28, & \gamma_2^* &= 5/55 \end{aligned}$$



شکل ۴. انرژی سومین حالت برانگیخته مدل آیزینگ بر حسب ضریب جفت‌شدگی  $J$  در حل دقیق و الگوریتم QAOA تعمیم یافته QAOA. خطای جواب‌های به دست آمده از الگوریتم و جواب‌های حل دقیق برابر  $7 \times 10^{-2}$  است.

حالات پایه و برانگیخته مدل آیزینگ به دست آمد. همچنین مقایسه کردیم که سازگاری بالایی با آنها داشتند. جواب‌های به دست آمده از الگوریتم را با جواب‌های حل دقیق

## مراجع

1. S Sachdev, *Physics world* **12**, 4 (1999) 33.
2. M L Frazier, et al., *Biophysical journal* **92**, 7 (2007) 2422.
3. A R Honerkamp-Smith et al., *Biophysical journal* **95**, 1 (2008) 236.
4. Y Liu and J P Dilger, *Biophysical journal* **64**, 1 (1993) 26.
5. S Miyazima, *Progress of Theoretical Physics* **40**, 3 (1968) 470.
6. J Strecka and M Jascur, *A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results*. arXiv preprint arXiv:1511.03031, 2015.
7. R P Feynman, *Int. J. Theor. Phy* **21** (1982) 467.
8. A Peruzzo, et al., *Nature communications* **5** (2014) 4213.
9. P J O'Malley, et al., *Physical Review X* **6**, 3 (2016) 031007.
10. Y Li and S C Benjamin, *Physical Review X* **7**, 2 (2017) 021050.
11. O Higgott, D Wang, and S Brierley, *Quantum* **3** (2019) 156.
12. E Farhi, J Goldstone, and S Gutmann, *A quantum approximate optimization algorithm*. arXiv preprint arXiv:1411.4028, 2014.
13. R Somma, et al., *International Journal of Quantum Information* **1**, 2 (2003) 189.
14. J R Johansson, P D Nation and, F Nori, *Computer Physics Communications*, **184**, 4 (2013) 1234.
15. R S Smith, M J Curtis and W J Zeng, *A practical quantum instruction set architecture*. arXiv preprint arXiv:1608.03355, 2016.