



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ

**Αλγόριθμος Κβαντικής Προσεγγιστικής
Βελτιστοποίησης για το πρόβλημα Max-Cut:
Μελέτη Περίπτωσης σε Τυχαίες Τοπολογίες
Γραφημάτων**

ΚΑΡΑΣ ΑΛΕΞΑΝΔΡΟΣ
ΑΜ: 2119234

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ

ΚΟΛΟΜΒΑΤΣΟΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ
ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

Λαμία 2025



UNIVERSITY OF
THESSALY

SCHOOL OF SCIENCE

DEPARTMENT OF COMPUTER SCIENCE & TELECOMMUNICATIONS

**Quantum Approximate Optimization
Algorithm for the Max-Cut Problem: A Case
Study for Random Graph Topologies**

KARAS ALEXANDROS
AM: 2119234

FINAL THESIS

ADVISOR

KOLOMVATSOS KONSTANTINOS
ASSOCIATE PROFESSOR

Lamia 2025

«Με ατομική μου ευθύνη και γνωρίζοντας τις κυρώσεις ⁽¹⁾, που προβλέπονται από της διατάξεις της παρ. 6 του άρθρου 22 του Ν. 1599/1986, δηλώνω ότι:

1. Δεν παραθέτω κομμάτια βιβλίων ή άρθρων ή εργασιών άλλων αυτολεξεί **χωρίς να τα περικλείω σε εισαγωγικά** και χωρίς να αναφέρω το συγγραφέα, τη χρονολογία, τη σελίδα. Η αυτολεξεί παράθεση χωρίς εισαγωγικά χωρίς αναφορά στην πηγή, είναι λογοκλοπή. Πέραν της αυτολεξεί παράθεσης, λογοκλοπή θεωρείται και η παράφραση εδαφίων από έργα άλλων, συμπεριλαμβανομένων και έργων συμφοιτητών μου, καθώς και η παράθεση στοιχείων που άλλοι συνέλεξαν ή επεξεργάστηκαν, χωρίς αναφορά στην πηγή. Αναφέρω πάντοτε με πληρότητα την πηγή κάτω από τον πίνακα ή σχέδιο, όπως στα παραθέματα.
2. Δέχομαι ότι η αυτολεξεί **παράθεση χωρίς εισαγωγικά**, ακόμα κι αν συνοδεύεται από αναφορά στην πηγή σε κάποιο άλλο σημείο του κειμένου ή στο τέλος του, είναι αντιγραφή. Η αναφορά στην πηγή στο τέλος π.χ. μιας παραγράφου ή μιας σελίδας, δεν δικαιολογεί συρραφή εδαφίων έργου άλλου συγγραφέα, έστω και παραφρασμένων, και παρουσίασή τους ως δική μου εργασία.
3. Δέχομαι ότι υπάρχει επίσης περιορισμός στο μέγεθος και στη συχνότητα των παραθεμάτων που μπορώ να εντάξω στην εργασία μου εντός εισαγωγικών. Κάθε μεγάλο παράθεμα (π.χ. σε πίνακα ή πλαίσιο, κλπ), προϋποθέτει ειδικές ρυθμίσεις, και όταν δημοσιεύεται προϋποθέτει την άδεια του συγγραφέα ή του εκδότη. Το ίδιο και οι πίνακες και τα σχέδια
4. Δέχομαι όλες τις συνέπειες σε περίπτωση λογοκλοπής ή αντιγραφής.

Ημερομηνία: 05/06/2025

Ο Δηλών



(1) «Όποιος εν γνώσει του δηλώνει ψευδή γεγονότα ή αρνείται ή αποκρύπτει τα αληθινά με έγγραφη υπεύθυνη δήλωση του άρθρου 8 παρ. 4 Ν. 1599/1986 τιμωρείται με φυλάκιση τουλάχιστον τριών μηνών. Εάν ο υπαίτιος αυτών των πράξεων σκόπευε να προσπορίσει στον εαυτόν του ή σε άλλον περιουσιακό όφελος βλάπτοντας τρίτον ή σκόπευε να βλάψει άλλον, τιμωρείται με κάθειρξη μέχρι 10 ετών.»

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα Πτυχιακή εργασία παρουσιάζεται μια ειδική περίπτωση κβαντικού αλγορίθμου και πιο συγκεκριμένα αυτή του *Αλγόριθμου Κβαντικής Προσεγγιστικής Βελτιστοποίησης* (QAOA). Περιγράφεται ο τρόπος λειτουργίας του και στην συνέχεια εφαρμόζεται σε ένα πρόβλημα Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης που ονομάζεται *Max-Cut* (Μέγιστη Διαμέριση). Το πρόβλημα αυτό εμφανίζεται στην Θεωρία Γράφων και σχετίζεται με την εύρεση της καλύτερης δυνατής Τομής που θα διαπερνά τις ακμές του γραφήματος και θα χωρίζει τις κορυφές του σε δύο ίσα σύνολα. Ο αλγόριθμος QAOA θα επιχειρήσει να βρει προσεγγιστικές λύσεις στο πρόβλημα αυτό έχοντας σαν δεδομένα τρεις κατηγορίες τυχαίων γραφημάτων με όνομα *Erdos - Renyi*, *Regular Random* και *Barabasi - Albert*, ούτως ώστε να εξεταστεί η απόδοση του κάτω από διαφορετικές τοπολογίες. Προκειμένου να παρουσιαστεί καλύτερα η ακρίβεια του QAOA θα χρησιμοποιηθεί και μια κλασική περίπτωση αλγορίθμου, που ονομάζεται Goemans-Williamson και θα αποτελέσει ένα μέσο σύγκρισης Κλασικών και Κβαντικών αλγορίθμων.

ABSTRACT

In this thesis we present a special case of a Quantum Algorithm and more specifically the *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA). We describe how it operates and then we apply it to a Combinatorial Optimization problem called the *Max-Cut problem*. This problem arises in Graph Theory, and it involves finding the best possible Intersection that crosses through the edges of the graph and partitions its vertices into two equal sets. The QAOA will attempt to find approximate solutions to this problem by taking as input three categories of Random graphs named Erdos - Renyi, Regular Random and Barabasi - Albert, so we can examine its performance under different topologies. To better illustrate the accuracy of QAOA, a classic case of an algorithm called Goemans-Williamson will also be utilized as a means of comparing Classical and Quantum algorithms.

Table of Contents

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	I
ABSTRACT	III
ΠΙΝΑΚΑΣ ΕΙΚΟΝΩΝ	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ	4
1.1 ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ	4
1.2 ΜΕΤΑΒΛΗΤΟΙ ΚΒΑΝΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ.....	4
1.2.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ RAYLEIGH-RITZ.....	5
1.2.2 ΔΟΜΗ ΕΝΟΣ VQA	5
1.3 ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΠΟΛΥΠΛΟΚΟΤΗΤΑ	7
1.3.1 ΚΛΑΣΕΙΣ P-NP	7
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ	9
2.1 ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ	9
2.1.1 QUBITS	9
2.1.2 ΚΒΑΝΤΙΚΕΣ ΠΥΛΕΣ.....	10
2.1.3 ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΔΙΕΜΠΛΟΚΗ	13
2.1.4 ΜΕΤΡΗΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΜΕΝΟΜΕΝΗ ΤΙΜΗ	14
2.2 ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΗΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	15
2.2.1 ΑΔΙΑΒΑΤΙΚΟΣ ΚΒΑΝΤΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ.....	15
2.2.2 Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ QAOA	15
2.2.3 ΜΕΛΕΤΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ: MAX-CUT.....	17
2.3 ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ GOEMANS-WILLIAMSON.....	19
2.3.1 ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ	19
2.3.2 SEMIDEFINITE PROGRAMMING	19
2.3.3 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ GW	20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	22
3.1 ΜΟΝΤΕΛΑ ΤΥΧΑΙΩΝ ΓΡΑΦΩΝ.....	22
3.1.1 ΓΡΑΦΟΣ ERDOS–RENYI.....	22
3.1.2 ΓΡΑΦΟΣ RANDOM REGULAR.....	24
3.1.3 ΓΡΑΦΟΣ BARABASI–ALBERT	25
3.1.4 ΛΟΓΟΣ ΧΡΗΣΗΣ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΤΥΧΑΙΩΝ ΓΡΑΦΩΝ	26
3.2 MAX-CUT ΜΕ ΤΟΝ GOEMANS-WILLIAMSON	27
3.3 MAX-CUT ΜΕ ΤΟΝ QAOA	32
3.3.1 ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΤΩΝ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	39
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΣΥΓΚΡΙΣΗ QAOA – GW	44

4.1 ΛΟΓΟΣ ΕΠΙΔΟΣΗΣ ΓΙΑ ΓΡΑΦΟΥΣ ERDOS–RENYI.....	44
4.2 ΛΟΓΟΣ ΕΠΙΔΟΣΗΣ ΓΙΑ ΓΡΑΦΟΥΣ RANDOM D-REGULAR	47
4.3 ΛΟΓΟΣ ΕΠΙΔΟΣΗΣ ΓΙΑ ΓΡΑΦΟΥΣ BARABASI–ALBERT	49
4.4 ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΤΩΝ ΕΞΑΦΑΝΙΖΟΜΕΝΩΝ ΚΑΙΣΕΩΝ.....	51
4.5 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	52
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	53
A. ΕΠΠΡΟΣΘΕΤΟΙ ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΑΙ ΕΙΚΟΝΕΣ	53
A.1 ERDOS-RENYI GRAPH.....	53
A.2 RANDOM D-REGULAR GRAPH.....	58
A.3 BARABASI-ALBERT GRAPH	65
B. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΕΣ ΑΠΟΔΕΙΞΕΙΣ.....	72
B.1 GOEMANS-WILLIAMSON IS 0.878-APPROXIMATE	72
B.2 SUZUKI-TROTTER DECOMPOSITION	72
B.3 MAX-CUT IS NP-HARD	75
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	76

Πίνακας Εικόνων

Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση ενός Μεταβλητού Κβαντικού Αλγορίθμου.	6
Εικόνα 2: Οι κλάσεις της υπολογιστικής Πολυπλοκότητας.	8
Εικόνα 3: Αναπαράσταση σφαίρας Bloch ενός qubit.	10
Εικόνα 4: Σύνοψη των σημαντικότερων πυλών του ενός qubit.	12
Εικόνα 5: Καλλιτεχνική ερμηνεία της κβαντικής διεμπλοκής.	14
Εικόνα 6: Σχηματική αναπαράσταση του QAOA.	17
Εικόνα 7: Χαρακτηριστικό παράδειγμα Μέγιστης Τομής (διακεκομμένη γραμμή) σε ένα Γράφο με 5 κορυφές και 6 ακμές.	18
Εικόνα 8: Σύνδεση του προβλήματος Maximum-Cut με ένα μοντέλο Spin Glass.	18
Εικόνα 9: Παραδείγματα <i>Erdős-Rényi</i> γραφημάτων για διαφορετικές τιμές του p	23
Εικόνα 10: Περιπτώσεις regular γράφων για διαφορετικές τιμές του βαθμού.	24
Εικόνα 11: Παράδειγμα γράφου Barabasi-Albert.	26
Εικόνα 12: Διαγραμματική αναπαράσταση ενός QNode.	32
Εικόνα 13: Αποτελέσματα του QAOA σε μορφή ιστογράμματος για το πρόβλημα Max- Cut.	38
Εικόνα 14: Εξέλιξη των παραμέτρων του QAOA, καθώς το βάθος (τιμές p) του κβαντικού κυκλώματος αυξάνεται.	42
Εικόνα 15: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 6-node Erdos- Renyi graph.	53
Εικόνα 16: Η μέγιστη τομή για τον 6-node ER, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	54
Εικόνα 17: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β	54
Εικόνα 18: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 8-node Erdos- Renyi graph.	55
Εικόνα 19: Η μέγιστη τομή για τον 8-node ER, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	56
Εικόνα 20: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου ER των 8 κόμβων.	56
Εικόνα 21: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ και β για όλες τις περιπτώσεις των γραφημάτων Erdos-Renyi.	57
Εικόνα 22: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 3-Regular graph.	58
Εικόνα 23: Η μέγιστη τομή για τον 3-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	59
Εικόνα 24: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 3-Regular.	59
Εικόνα 25: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 4-Regular graph.	60
Εικόνα 26: Η μέγιστη τομή για τον 4-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	61
Εικόνα 27: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 4-Regular.	61
Εικόνα 28: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 5-Regular.	62
Εικόνα 29: Η μέγιστη τομή για τον 5-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	63
Εικόνα 30: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 5-Regular.	63
Εικόνα 31: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ και β για όλες τις περιπτώσεις του d των γραφημάτων Regular.	64
Εικόνα 32: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m6-BA graph.	65
Εικόνα 33: Η μέγιστη τομή για τον m6-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	66

Εικόνα 34: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m6-BA.	66
Εικόνα 35: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m8-BA graph.	67
Εικόνα 36: Η μέγιστη τομή για τον m8-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	68
Εικόνα 37: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m8-BA.	68
Εικόνα 38: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m10-BA graph.	69
Εικόνα 39: Η μέγιστη τομή για τον m10-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.	70
Εικόνα 40: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m10-BA.	70
Εικόνα 41: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ και β για όλες τις περιπτώσεις του preferential attachment m για τα γραφήματα Barabasi-Albert.	71

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

1.1 Κβαντική Θεωρία

Η Κβαντική Θεωρία αποτελεί, μαζί με την Γενική Θεωρία της Σχετικότητας, τους δύο πυλώνες της σύγχρονης Φυσικής, πάνω στην οποία αναδιατυπώθηκε η περιγραφή της πραγματικότητας στην μικροσκοπική κλίμακα. Η κβαντομηχανική θεωρείται ένα σύνολο μαθηματικών κανόνων που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή φυσικών θεωριών. Μια από τις πρώτες ενδείξεις ένωσης της κβαντικής θεωρίας με την επιστήμη των Υπολογιστών ήρθε το 1980 όταν ο φυσικός Paul Benioff προχώρησε στην δημοσίευση μιας πολύ σημαντικής εργασίας. Το θέμα της εργασίας αφορούσε την περιγραφή ενός κβαντομηχανικού μοντέλου μιας μηχανής Turing [1]. Στην ουσία, αυτή ήταν η πρώτη εμφάνιση μιας κβαντομηχανικής εκδοχής του κλασικού υπολογιστή που σήμερα ονομάζεται κβαντικός υπολογιστής, και έθεσε τα θεμέλια για μια νέα κατηγορία, αυτή της *Κβαντικής Υπολογιστικής*. Η γέννηση της θεωρίας αυτής έφερε στην επιφάνεια πολλές νέες μεθόδους επεξεργασίας της πληροφορίας αλλά και αρκετές νέες εφαρμογές και για τους δύο κλάδους. Η ειδοποιός διαφορά που διακατέχει τους κβαντικούς υπολογιστές σε αντίθεση με τους κλασικούς, είναι το γεγονός πως οι πρώτοι εκμεταλλεύονται δύο πολύ σημαντικά φαινόμενα της κβαντικής φυσικής, την *υπέρθωση* (superposition) και την *σύμπλεξη* (entanglement) αλλά και τα qubits, το κβαντικό ανάλογο ενός κλασικού bit. Η ικανότητα των qubits να βρίσκονται σε υπέρθεση και να επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω της διεμπλοκής έχει ως αποτέλεσμα την εκθετική ταχύτητα των κβαντικών υπολογισμών. Ακόμη, επιτρέπει την δημιουργία ταχύτατων αλγορίθμων όπως αυτός του Shor για παραγοντοποίηση και του Grover για αναζήτηση σε μη δομημένες βάσεις δεδομένων.

1.2 Μεταβλητοί Κβαντικοί Αλγόριθμοι

Η γέννηση της Κβαντικής Υπολογιστικής δημιούργησε ένα νέο μονοπάτι εφαρμογών όχι μόνο για την Φυσική αλλά και για κλάδους όπως η Χημεία, η Βιολογία και η επιστήμη των Υπολογιστών. Παραδείγματα αυτών των εφαρμογών αποτελούσαν η προσομοίωση πολύπλοκων κβαντικών συστημάτων [2], η περιγραφή δύσκολων χημικών αντιδράσεων αλλά και η επίλυση προβλημάτων συνδυαστικής βελτιστοποίησης. Αυτού του είδους τα ζητήματα αποτελούσαν παράλληλα, προκλήσεις για τις κλασικές μηχανές εξαιτίας του υψηλού υπολογιστικού κόστους που είχαν. Οι σημερινοί κβαντικοί επεξεργαστές ανήκουν στην λεγόμενη «*εποχή NISQ*» των κβαντικών υπολογιστών, διότι αποτελούνται από μερικές δεκάδες έως εκατοντάδες qubits και βιώνουν σε πολύ μεγάλο βαθμό φαινόμενα όπως είναι ο θόρυβος και οι περιορισμοί στο βάθος του κβαντικού κυκλώματος [3]. Επομένως, μέχρι να επέλθει μια πλήρης κβαντική ανεξαρτησία γνώστη και ως *Fault-Tolerance Quantum Computing Era*, είναι σημαντική η εύρεση μιας εναλλακτικής προσέγγισης. Οι **Μεταβλητοί Κβαντικοί Αλγόριθμοι** (Variational Quantum Algorithms/VQAs) αποτελούν αυτού του είδους την προσέγγιση και θεωρούνται ως το επόμενο βήμα που θα φέρει την ανθρώπινη τεχνολογία ένα βήμα πιο κοντά στο κβαντικό πλεονέκτημα.

Οι Μεταβλητοί Κβαντικοί Αλγόριθμοι είναι ένα είδος υβριδικών κβαντικών-κλασικών αλγορίθμων, οι οποίοι εκμεταλλεύονται υπολογιστικούς πόρους από τον κβαντικό αλλά και τον κλασικό κόσμο προκειμένου να επιλύσουν ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Η βασική ιδέα που οδήγησε στην ανάπτυξή τους προήλθε από την μέθοδο *Μεταβολών Rayleigh-Ritz*,

μια τεχνική που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό των Ιδιοτιμών ενέργειας βασικής κατάστασης (ground state energy) στην κβαντομηχανική. Το κομμάτι της «Μεταβλητότητας» αναφέρεται στην μεταβολή των παραμέτρων ενός δοκιμαστικού μοντέλου για την αντιμετώπιση μιας εργασίας, κάτι που αποτελεί και την κεντρική ιδέα για όλα τα σύγχρονα μοντέλα Μηχανικής Μάθησης.

1.2.1 Η μέθοδος Rayleigh-Ritz

Η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται σε προβλήματα εύρεσης της ενέργειας βασικής κατάστασης E_0 από μια Hamiltonian συνάρτηση H της μορφής

$$H = \sum_j h_j \sigma_j \quad (1)$$

Στην σχέση αυτή, θεωρείται ότι το H ορίζεται ως ένα γραμμικός συνδυασμός από τανυστικά γινόμενα τελεστών σ_j με κάποιους συντελεστές h_j . Η **ενέργεια βασικής κατάστασης** είναι η λύση του προβλήματος

$$E_0 = \min_{|\psi\rangle} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2)$$

Όπου η ελαχιστοποίηση αφορά καταστάσεις ολόκληρου του χώρου *Hilbert*. Επειδή όμως το μέγεθος του χώρου *Hilbert* αυξάνεται εκθετικά με το μέγεθος του συστήματος, η αναζήτηση με χρήση μεθόδων brute-force σε όλο το μήκος του αποτελεί ένα δύσκολο υπολογιστικά πρόβλημα [4]. Η μέθοδος Rayleigh-Ritz πραγματοποιεί την αναζήτηση μόνο σε κάποια υποσύνολα του χώρου Hilbert με σκοπό να βρει μια προσεγγιστική λύση [5].

1.2.2 Δομή ενός VQA

Τα βασικά μέρη ενός μεταβλητού κβαντικού αλγορίθμου είναι:

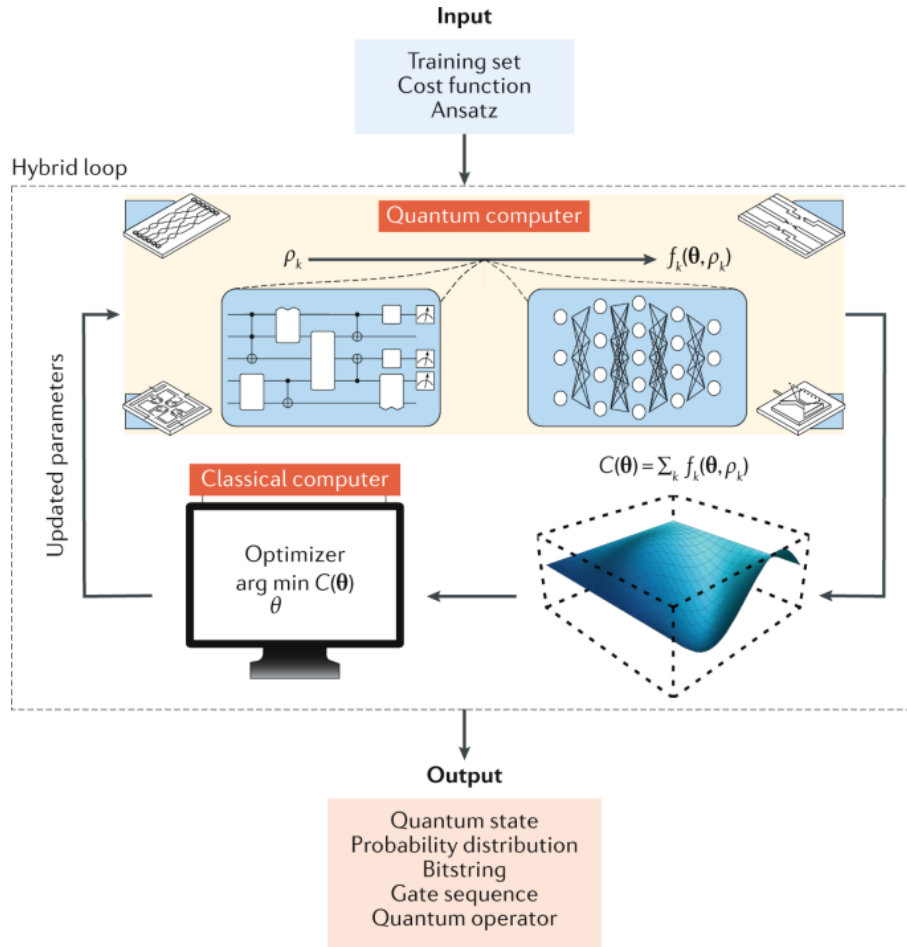
- I. Ο ορισμός μιας **Συνάρτησης Κόστους** η οποία θα καταγράφει την απόδοση του αλγορίθμου και
- II. Ένα **Μεταβλητό Κβαντικό Κύκλωμα** ή *ansatz*, που θα εμπεριέχει ένα σύνολο ρυθμιζόμενων παραμέτρων οι οποίες θα αναπαριστούν μια λύση του προβλήματος.

Ο στόχος κάθε αλγορίθμου αυτού του είδους είναι η εύρεση του βέλτιστου σετ παραμέτρων $\theta \in \mathbb{R}^p$ που θα ελαχιστοποιούν την συνάρτηση κόστους $C(\theta): \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}$, δηλαδή θα ισχύει η παρακάτω σχέση

$$\theta' = \arg \min_{\theta} C(\theta) \quad (3)$$

Όπου το κόστος $C(\theta)$ είναι μια συνάρτηση της αναμενόμενης τιμής ενός τελεστή (πχ της Hamiltonian), ο οποίος μετριέται στην παραμετροποιημένη κατάσταση που προκύπτει από το μεταβλητό κβαντικό κύκλωμα:

$$C(\theta) = \langle H \rangle_{\theta} = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \quad (4)$$



Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση ενός Μεταβλητού Κβαντικού Αλγορίθμου.

Η λειτουργία ενός VQA αναδεικνύεται στην **Εικόνα 1** και ο βρόγχος επανάληψης περιγράφεται ως εξής:

- I. Κβαντική ρουτίνα:** Γίνεται χρήση ενός παραμετροποιημένου κβαντικού κυκλώματος συναρτήσει κάποιων παραμέτρων θ το οποίο αναπαρίσταται από ένα μοναδιαίο τελεστή $U(\theta)$, με σκοπό την προετοιμασία μιας δοκιμαστικής (trial) κατάστασης $|\psi\rangle = U(\theta)|0\rangle$. Το επόμενο βήμα είναι η μέτρηση της συνάρτησης κόστους $C(\theta) = \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$, ούτως ώστε να γίνει η εξαγωγή αποτελεσμάτων της αναμενόμενης τιμής.
- II. Κλασική ρουτίνα:** Τα αποτελέσματα των μετρήσεων περνούν στον κλασικό υπολογιστή, οποίος εκτελεί ένα κλασικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης (συνήθως gradient descent, Adam κτλ.) με αποτέλεσμα να βρει νέες τιμές παραμέτρων θ' που θα αντιστοιχούν σε χαμηλότερο κόστος C . Στο τέλος θα ελέγχεται πάντα η συνθήκη $C(\theta') < C(\theta)$.

Ο βρόγχος επανάληψης θα συνεχίζεται έως ότου υπάρξει σύγκλιση σε μια βέλτιστη τιμή θ_{opt} , η οποία ελαχιστοποιεί την συνάρτηση κόστους και αντιπροσωπεύει την λύση του προβλήματος.

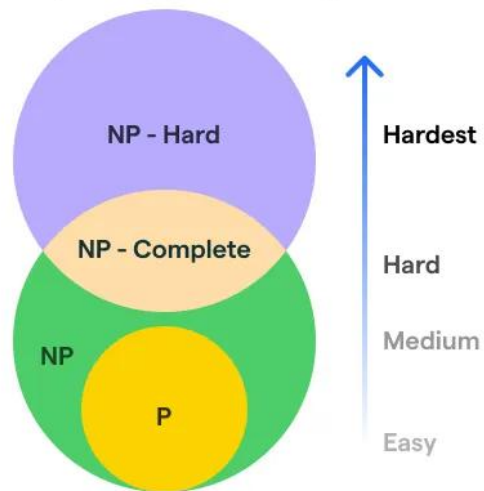
1.3 Υπολογιστική Πολυπλοκότητα

Στον πυρήνα της Θεωρητικής Επιστήμης των Υπολογιστών συναντάται μια θεωρία που χρήζει μεγάλης σημασίας για την σχεδίαση και ανάλυση αλγορίθμων που στοχεύουν στην επίλυση υπολογιστικών προβλημάτων. Αυτή η θεωρία ονομάζεται *Υπολογιστική Πολυπλοκότητα* και έγκειται τόσο στην κατηγοριοποίηση και αξιολόγηση της δυσκολίας ενός προβλήματος, όσο και στην ποσότητα των υπολογιστικών πόρων που χρειάζονται για την επίλυση του. Οι πόροι αυτοί σχετίζονται με τον χρόνο υπολογισμού (τον αριθμό των απαιτούμενων στοιχειωδών πράξεων) και τις απαιτήσεις της μνήμης (χώρος αποθήκευσης). Με άλλα λόγια, το κομμάτι του χρόνου αναφέρεται στην *χρονική πολυπλοκότητα* (time complexity), ενώ αυτό της μνήμης στην *χωρική πολυπλοκότητα* (space complexity) του αλγορίθμου. Μια από τις πιο βασικές έννοιες της θεωρίας Πολυπλοκότητας είναι αυτή της *κλάσης πολυπλοκότητας* (complexity class), η οποία περιγράφει μία ομάδα υπολογιστικών προβλημάτων, που έχουν σαν κοινό χαρακτηριστικό τους υπολογιστικούς πόρους που απαιτούνται για την επίλυση αυτών των προβλημάτων.

1.3.1 Κλάσεις P-NP

Δυο από τις πιο σημαντικές κλάσεις πολυπλοκότητας είναι οι **P** και η **NP**. Η κλάση **P**, από το «*polynomial*», εμπεριέχει όλα τα ήδη εκείνων των προβλημάτων που μπορούν να επιλυθούν από έναν ντετερμινιστικό πολυωνυμικό αλγόριθμο. Η κλάση **NP** από την άλλη, βγαίνει από το «*nondeterministic polynomial*» και είναι η τάξη των προβλημάτων που μπορούν να επιλυθούν από μη ντετερμινιστικούς πολυωνυμικούς αλγόριθμους. Τα περισσότερα υπολογιστικά προβλήματα που έχουν μελετηθεί ανήκουν στην κατηγορία **P**, λύνονται δηλαδή από αλγόριθμους πολυωνυμικού χρόνου. Ο ορισμός της κατηγορίας **P**, αναφέρεται κυρίως σε *προβλήματα απόφασης* (decision problems), δηλαδή εκείνα όπου η λύση τους θα είναι δυαδικής μορφής (Ναι/Όχι, 0/1, κτλ.), και ο λόγος είναι ότι έτσι εισάγεται μία απλότητα στην όλη επίλυση τους. Άλλη μια κατηγορία είναι τα *προβλήματα βελτιστοποίησης* (optimization problems), όπου πρέπει να βρεθεί μία συγκεκριμένη δομή (π.χ. ένα Hamiltonian κύκλωμα) που να μεγιστοποιεί ή να ελαχιστοποιεί μία συγκεκριμένη ποσότητα (π.χ. άθροισμα βαρών). Ως **NP-complete** ορίζονται τα προβλήματα τα οποία είναι στο ίδιο επίπεδο δυσκολίας όσο οποιαδήποτε άλλα προβλήματα που ανήκουν στη κλάση **NP** επειδή, με βάση τον ορισμό, οποιοδήποτε άλλο πρόβλημα στην κλάση αυτή μπορεί να λυθεί από πολυωνυμικό αλγόριθμο. Τα **NP-hard** προβλήματα ανήκουν στον ίδιο βαθμό δυσκολίας όπως και τα NP-complete προβλήματα, και έτσι δεν υπάρχει κάποιος γνωστός αλγόριθμος πολυωνυμικού χρόνου για την επίλυσή τους. Όταν τα προβλήματα προσεγγίζονται ως προβλήματα *απόφασης* τότε κατατάσσονται ως **NP-Complete**, ενώ αν προσεγγιστούν ως προβλήματα *βελτιστοποίησης*, κατατάσσονται ως **NP-Hard**.

Computational Complexity Theory



Εικόνα 2: Οι κλάσεις της υπολογιστικής Πολυπλοκότητας.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Θεωρητικό Υπόβαθρο

2.1 Κβαντική Υπολογιστική

Η Κβαντική Πληροφορία και Υπολογιστική είναι πεδία έρευνας που μελετούν τον τρόπο με τον οποίο τα κβαντικά συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να επεξεργαστούν την πληροφορία και να εκτελέσουν υπολογισμούς, και διέπονται από τους νόμους της Κβαντικής Μηχανικής.

2.1.1 Qubits

Το bit αποτελεί την θεμελιώδη μονάδα που διέπει την κλασική θεωρία πληροφορίας σχετικά με την μετάδοση και επεξεργασία της πληροφορίας. Σε αναλογία με την κλασική περίπτωση το βασικό στοιχείο της κβαντικής υπολογιστικής ονομάζεται *quantum bit* ή *qubit* για συντομία. Το qubit είναι ένα μαθηματικό αντικείμενο το οποίο περιγράφει ένα απλό κβαντικό σύστημα δύο καταστάσεων, όπως για παράδειγμα το spin ενός ηλεκτρονίου ή την πόλωση ενός φωτονίου [6]. Όσον αφορά την μαθηματική του περιγραφή, η κατάσταση ενός qubit ορίζεται ως ένα διάνυσμα που ανήκει σε ένα διοδιάστατο διανυσματικό χώρο μιγαδικών αριθμών και ονομάζεται $\mathbb{C}^2$ ή αλλιώς χώρος Hilbert και συμβολίζεται ως $\mathcal{H}$. Όπως ένα κλασικό bit αποτελείται από τις δύο πιθανές καταστάσεις 0 και 1, το ίδιο ισχύει και για το qubit. Στην κβαντομηχανική προκειμένου να διατηρηθεί η κομψότητα των μαθηματικών τύπων, η αναπαράσταση των κβαντικών καταστάσεων γίνεται με την βοήθεια του συμβολισμού *Dirac* ή *bra-ket*.

Ένα διάνυσμα *ket* συμβολίζεται με $|\psi\rangle$ και αναπαριστά μια κβαντική κατάσταση ψ που ανήκει στο χώρο Hilbert, δηλαδή ισχύει $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Ομοίως, ένα διάνυσμα *bra* συμβολίζεται ως $\langle\psi|$ και αναπαριστά τον συζυγή ανάστροφο (complex conjugate) του διανύσματος ket ως εξής

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (5)$$

Επομένως, οι καταστάσεις ενός qubit θα έχουν πλέον την μορφή $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Μια σημαντική διαφορά που ξεχωρίζει τα bits με τα qubits, είναι πως τα qubits έχουν την ικανότητα να βρίσκονται και σε μία κατάσταση πέρα από τις $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Αυτό καθίσταται εφικτό χάρη σε μια έννοια της κβαντομηχανικής που ονομάζεται *υπέρθθεση* (superposition) και ορίζει την γενική κατάσταση ενός qubit ως

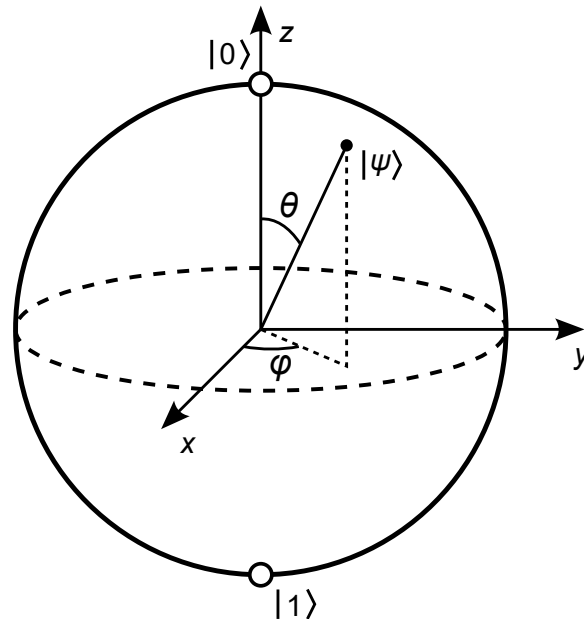
$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (6)$$

Οι αριθμοί α και β ανήκουν στους μιγαδικούς και ονομάζονται *πλάτη πιθανότητας*, περιγράφουν δηλαδή πως όταν πραγματοποιηθεί μέτρηση της κβαντικής κατάστασης $|\psi\rangle$ θα προκύψει είτε το αποτέλεσμα 0 με πιθανότητα $|\alpha|^2$, είτε το αποτέλεσμα 1 με πιθανότητα $|\beta|^2$. Για να καταστεί εφικτό αυτό θα πρέπει να ισχύει η Συνθήκη Κανονικοποίησης $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, δηλαδή $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Οι καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ ονομάζονται *υπολογιστικές καταστάσεις βάσεις* (computational basis states) και αποτελούν μια ορθοκανονική βάση του χώρου Hilbert.

Ένας βολικός τρόπος κατανόησης της γενικής κατάστασης ενός qubit είναι μέσω της γεωμετρικής ερμηνείας του. Θεωρώντας την σχέση $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί ως

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (7)$$

Οι αριθμοί θ και φ ανήκουν στους πραγματικούς αριθμούς και ορίζουν ένα σημείο σε μια τρισδιάστατη σφαίρα που ονομάζεται *σφαίρα Bloch* και αποτελεί ένα βοηθητικό μέσο για οπτικοποίηση μιας κβαντικής κατάστασης του ενός qubit.



Εικόνα 3: Αναπαράσταση σφαίρας Bloch ενός qubit. Μια καθαρή κατάσταση του ενός qubit μπορεί να αναπαρασταθεί ως ένα σημείο σε μια σφαίρα της οποίας οι πόλοι είναι οι ορθογώνιες καταστάσεις βάσης $|0\rangle$ και $|1\rangle$.

2.1.2 Κβαντικές Πύλες

Προκειμένου να πραγματοποιηθούν οι διάφορες αλλαγές στην κβαντική κατάσταση ενός qubits, οι κβαντικοί υπολογιστές χρησιμοποιούν ειδικούς τελεστές που παίζουν τον ρόλο πυλών. Ονομάζονται *κβαντικές πύλες* (quantum gates) και είναι υπεύθυνες για τον χειρισμό και την μεταφορά της κβαντικής πληροφορίας. Από μαθηματικής πλευράς, μια κβαντική πύλη αποτελεί έναν μοναδιαίο τελεστή του χώρου Hilbert και, για να θεωρείται έγκυρη σαν πύλη θα πρέπει να πληροί ένα και μοναδικό κριτήριο: αυτό του *Unitarity* ενός τελεστή, δηλαδή την σχέση $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I}$. Ένα σύνολο κβαντικών πυλών σχηματίζουν το κβαντικό κύκλωμα του υπολογιστή και μπορούν να είναι ενός ή πολλών qubit.

- **Κβαντική πύλη NOT**

Η κβαντική πύλη NOT ή X είναι μια απλή και βασική πύλη ενός qubit και επιτελεί σχεδόν την ίδια λειτουργία με την κλασική αντίστοιχη πύλη. Η διαφορά που έχει είναι πως, αντί να αλλάξει την κατάσταση του qubit, η πύλη επιδρά στα πλάτη πιθανότητας τους, δηλαδή τους αριθμούς α και β . Μαθηματικά ορίζεται ως εξής

$$X: \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle$$

Ενώ με μορφή πινάκων είναι

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

- **Κβαντική πύλη Hadamard**

Η συγκεκριμένη πύλη, που συχνά περιγράφεται ως η «τετραγωνική ρίζα της πύλης NOT», αποτελεί μια από τις πιο χρήσιμες κβαντικές πύλες. Ο λόγος είναι ότι αλληλοεπιδρά με τα qubits φέρνοντας την κατάσταση $|0\rangle$ σε μια ίσης υπέρθεσης κατάσταση $|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ και την κατάσταση $|1\rangle$ στην κατάσταση $|-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Ο μοναδιαίος τελεστής που αντιστοιχεί στην πύλη Hadamard σε μορφή πίνακα θα είναι

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (9)$$

- **Πύλες Pauli**

Οι πύλες αυτές είναι ιδιαίτερης σημασίας αναφορικά με την περιγραφή των κβαντικών συστημάτων διότι περιστρέφουν το καταστατικό διάνυσμα ενός qubit στην σφαίρα Bloch. Υπάρχουν τρία είδη πυλών Pauli, ένα για κάθε άξονα στην τρισδιάστατη σφαίρα. Με την βοήθεια πινάκων ορίζονται ως

$$\sigma_x = X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

Οι πύλες Pauli έχουν Ιδιοτιμές $\lambda \in \{\pm 1\}$ και αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις

$$\begin{aligned} Z|0\rangle &= +|0\rangle, & X|+\rangle &= +|+\rangle, & Y|+i\rangle &= +|+i\rangle \\ Z|1\rangle &= -|1\rangle, & X|-\rangle &= -|-\rangle, & Y|-i\rangle &= -| -i\rangle \end{aligned}$$

Με

$$|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}} \text{ και } |\pm i\rangle = \frac{|0\rangle \pm i|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

- **Πύλες Περιστροφής Pauli**

Στην Κβαντική Μηχανική Μάθηση, παρουσιάζεται μια ειδική περίπτωση των παραπάνω πυλών Pauli που ονομάζονται πύλες περιστροφής Pauli (Pauli rotation gates). Αυτό που κάνουν είναι στην ουσία η περιστροφή της κατάστασης του qubit γύρω από τον άξονα που ορίζει η πύλη (X, Y ή Z) στην σφαίρα Bloch, συναρτήσει μιας παραμέτρου θ που έχει τον ρόλο της γωνίας περιστροφής. Χρησιμοποιούνται εξ' ολοκλήρου για την κατασκευή παραμετροποιημένων κβαντικών κυκλωμάτων στους Μεταβλητούς Κβαντικούς Αλγόριθμους. Η μαθηματική τους περιγραφή σχετίζεται με το exponentiation της μεταβλητής θ και του τελεστή Pauli

$$R_x = e^{-iX\frac{\theta}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}\mathbb{I} - i\sin\frac{\theta}{2}X = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad (11)$$

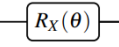
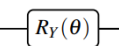
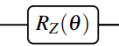
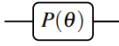
$$R_y = e^{-iY\frac{\theta}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}\mathbb{I} - i\sin\frac{\theta}{2}Y = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$R_z = e^{-iZ\frac{\theta}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}\mathbb{I} - i\sin\frac{\theta}{2}Z = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Όπου η μετάβαση από το εκθετικό στο τριγωνομετρικό κομμάτι επιτυγχάνεται εύκολα μέσω του ορισμού της εκθετικής συνάρτησης και της ιδιότητας $A^2 = \mathbb{I}$ των πινάκων Pauli

$$e^{-i\omega A} = \sum_{k \in \text{even}} \frac{(-i\omega A)^k}{k!} = \sum_{k \in \text{even}} \frac{\omega^k}{k!} \mathbb{I} - \sum_{k \in \text{odd}} \frac{\omega^k}{k!} A = \cos\omega \mathbb{I} - \sin\omega A$$

Ο λόγος που αυτές οι πύλες θεωρούνται αναπόσπαστο κομμάτι κάθε Μεταβλητού Κβαντικού Αλγόριθμου έγκειται στο γεγονός ότι παρουσιάζουν ένα τρόπο εισαγωγής των ελεύθερων παραμέτρων σε ένα κβαντικό υπολογισμό και επίσης είναι πιο εύκολο να υλοποιηθούν σε πραγματικό κβαντικό hardware.

Name	Symbol/Circuitual rep.	Matrix representation
Pauli-X		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli rotation-X		$\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$
Pauli rotation-Y		$\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$
Pauli rotation-Z		$\begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix}$
Phase gate		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$
T gate		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$
Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$

Εικόνα 4: Σύνοψη των σημαντικότερων πυλών του ενός qubit. Στην πρώτη στήλη φαίνονται τα ονόματα των πυλών, στην δεύτερη η κυκλωματική τους αναπαράσταση και στην τρίτη η αντίστοιχη μορφή τους με πίνακα.

2.1.3 Κβαντική Διεμπλοκή

Το φαινόμενο της *Κβαντικής Διεμπλοκής* αποτελεί ίσως ένα από τα πιο αινιγματικά σε ολόκληρη την Κβαντική Μηχανική με τις ρίζες του να φτάνουν περίπου στα μέσα του 20^{ου} αιώνα. Εκείνη η περίοδος αποτέλεσε κομβικό σημείο για την ίδια την Κβαντική Θεωρία, διότι θεωρήθηκε πως δεν αποτελούσε μια ολοκληρωμένη θεωρία της πραγματικότητας, καθώς περιείχε παράδοξα και τις λεγόμενες «κρυμμένες μεταβλητές» [7]. Σε μια εργασία τους το 1935 οι Einstein, Podolsky και Rosen εισήγαγαν μια νέα έννοια που πήρε το όνομα «παράδοξο EPR» από τα αρχικά των επιθέτων τους και είχε ως σκοπό να αντικρούσει την Ερμηνεία της Κοπεγχάγης. Ουσιαστικά, περιέγραψαν μέσω ενός νοητικού πειράματος πως, οι μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων που πραγματοποιούνταν σε δύο διεμπλοκούμενα σωματίδια εμπεριείχαν σε μεγάλο βαθμό μια είδους μη κλασική συσχέτιση (correlation). Πιο συγκεκριμένα, αν γινόταν μια μέτρηση στο spin του ενός σωματιδίου, το αποτέλεσμα της μέτρησης για το spin του δευτέρου σωματιδίου θα μπορούσε να προβλεφθεί σχεδόν ακαριαία. Αυτού του είδους η συσχέτιση ήταν κάτι που ενόχλησε αρκετά τον Einstein, μιας και υποδηλώνε πως η πληροφορία θα μεταδιδόταν ταχύτερα από το φως, παραβιάζοντας έτσι την Ειδική Θεωρία της Σχετικότητας και την έννοια της *Τοπικότητας* (locality) [8]. Κάποια χρόνια αργότερα το 1952, ο φυσικός John Bell απέδειξε με μία πρωτοποριακή εργασία την μην ύπαρξη κρυμμένων μεταβλητών, εισάγοντας την χρήση κάποιων ανισώσεων που ονομάστηκαν ανισότητες Bell και καθιερώνοντας την Κβαντική Μηχανική ως μια πλήρη φυσική θεωρία. Τα παραπάνω γεγονότα αποτέλεσαν τα θεμέλια της Κβαντικής Διεμπλοκής και την καθιέρωσαν ως ένα κύριο αντικείμενο μελέτης στην Κβαντική Θεωρία.

Ορισμός: Θεωρώντας δύο κβαντικά συστήματα A και B, τα οποία ανήκουν στους χώρους Hilbert $\mathcal{H}_A$ και $\mathcal{H}_B$ αντίστοιχα, το κοινό σύστημα ορίζεται με την χρήση του τανυστικού γινομένου ως εξής

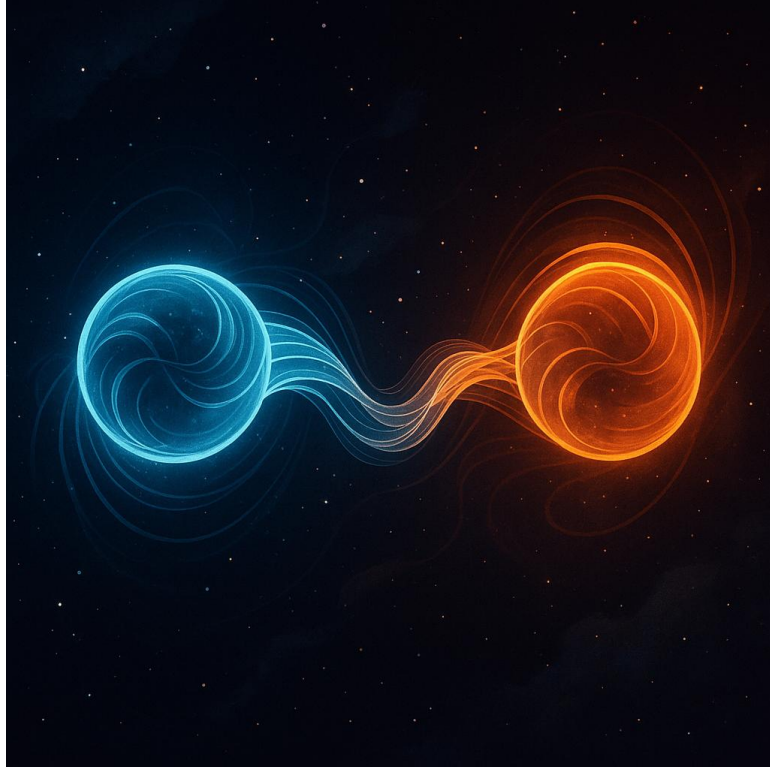
$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \quad (14)$$

Έχοντας διαστάσεις d_A και d_B . Μια καθαρή κβαντική κατάσταση $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$ βρίσκεται σε *διεμπλοκή*, αν δεν μπορεί να γραφτεί ως τανυστικό γινόμενο των βασικών του καταστάσεων $|\psi\rangle_A$ και $|\psi\rangle_B$, δηλαδή ισχύει η σχέση

$$|\psi\rangle \neq |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \quad (15)$$

Όπου $|\psi\rangle_A \in \mathcal{H}_A$ και $|\psi\rangle_B \in \mathcal{H}_B$.

Η Κβαντική Διεμπλοκή χρησιμοποιείται ως εργαλείο στην κβαντική υπολογιστική για την κατασκευή κβαντικών κυκλωμάτων και η συνεχής βελτίωση στην κατανόηση της βοηθά στην ανάπτυξη πιο ισχυρών κβαντικών αλγορίθμων.



Εικόνα 5: Καλλιτεχνική ερμηνεία της κβαντικής διεμπλοκής. Δύο σωματίδια, μοιράζονται μια σύνδεση με την μορφή γέφυρας, δείχνοντας την στιγμιαία μη τοπική συσχέτιση τους παρά τον όποιο χωρικό διαχωρισμό.

2.1.4 Μέτρηση και Αναμενόμενη Τιμή

Η κβαντική πληροφορία βρίσκεται αποθηκευμένη στις κβαντικές καταστάσεις και η επεξεργασία της προέρχεται από τον χειρισμό των καταστάσεων αυτών. Μία από τις διαδικασίες που χρησιμοποιούνται για το σκοπό αυτό ονομάζεται *Μέτρηση* (measurement), και παίζει ένα σημαντικό ρόλο στην μετάβαση από την κβαντική στην κλασική ρουτίνα. Η μέτρηση αποτελεί μια τεχνική εξαγωγής κλασικής πληροφορίας από κβαντικές καταστάσεις. Αυτό το στάδιο βρίσκεται στο τέλος ενός κβαντικού υπολογισμού, όταν χρειάζεται να γίνει ανάγνωση του τελικού αποτελέσματος. Ο μαθηματικός φορμαλισμός της διαδικασίας αυτής, βασίζεται στην πιθανοκρατική ερμηνεία της Κβαντομηχανικής και τον *κανόνα του Born* που αναφέρεται στον καθορισμό των πιθανοτήτων από αποτελέσματα μιας μέτρησης [9].

Δοσμένου ενός κβαντικού συστήματος με κβαντική κατάσταση $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$, η πιθανότητα που θα έχει να είναι στην κατάσταση $|k\rangle$ όταν μετρηθεί στην υπολογιστική του βάση, δίνεται από την σχέση

$$p_k = |\langle k|\psi\rangle|^2 = |c_k|^2 \quad (16)$$

Πέρα από τις μετρήσεις στην υπολογιστική βάση, μια μέτρηση μπορεί να πραγματοποιηθεί προκειμένου να εξαχθεί μια φυσική ιδιότητα ενός κβαντικού συστήματος όπως για παράδειγμα η ενέργεια ή η ορμή. Το σύνολο των φυσικών ποσοτήτων O που μπορούν να πάρουν μόνο πραγματικές τιμές ονομάζονται *παρατηρήσιμα μεγέθη*

(observables) και εκφράζονται μαθηματικά με την χρήση ερμητιανών τελεστών ($O = O^\dagger$). Ένα καλό παράδειγμα τέτοιων μεταβλητών είναι οι πίνακες Pauli X,Y,Z.

Ως *αναμενόμενη τιμή* (expectation value) ενός μεγέθους O σε ένα κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από την καθαρή κατάσταση $|\psi\rangle$ ορίζεται η σχέση

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle \quad (17)$$

Οι έννοιες της μέτρησης και της αναμενόμενης τιμής παίζουν καθοριστικό ρόλο στο post-processing των Μεταβλητών Κβαντικών Αλγορίθμων, δηλαδή στην μετάβαση που πραγματοποιείται από τους κβαντικούς υπολογισμούς στο κλασικό κομμάτι που εμπεριέχει τα μοντέλα μηχανικής μάθησης.

2.2 Αλγόριθμος Κβαντικής Προσεγγιστικής Βελτιστοποίησης

2.2.1 Αδιαβατικός Κβαντικός Αλγόριθμος

Το *Αδιαβατικό Θεώρημα* αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο στην αντιμετώπιση προβλημάτων βελτιστοποίησης και προηγείται της θεωρητικής κατανόησης του QAOA. Το συγκεκριμένο θεώρημα περιγράφει πως δοσμένης μιας χρονοεξαρτημένης Hamiltonian H και της βασικής της κατάστασης, αν η χρονική εξέλιξη αυτής της Hamiltonian πραγματοποιηθεί πολύ αργά (αδιαβατικά), η τελική βασική κατάσταση θα είναι αυτή της τελικής Hamiltonian. Ο *Κβαντικός Αδιαβατικός Αλγόριθμος* ή *QAA* μπορεί να εξομοιωθεί σε ένα κβαντικό υπολογιστή, παίρνοντας τον τελεστή χρονικής εξέλιξης $U(t)$ και ασκώντας πάνω του την τεχνική του *Trotterization*. Ουσιαστικά, αναλύει το $U(t)$ σε μια ακολουθία μικρών βημάτων κάνοντας χρήση του *αναπτύγματος Trotter-Suzuki*:

$$U(t) \approx \prod_{k=0}^{r-1} \exp[-iH(k\Delta\tau)\Delta\tau] = \prod_{k=0}^{r-1} \exp[-if(k\Delta\tau)H_c\Delta\tau] \exp[-ig(k\Delta\tau)H_M\Delta\tau] \quad (18)$$

Όπου $\Delta\tau = t/r$, H_M : η αρχική Hamiltonian με την αρχική βασική κατάσταση και H_c : η τελική Hamiltonian της οποίας η βασική κατάσταση εμπεριέχει κωδικοποιημένη την λύση του προβλήματος βελτιστοποίησης. Όσο το k (βήμα) θα αυξάνεται, το $f(k\Delta\tau)$ θα αυξάνεται και ταυτόχρονα το $g(k\Delta\tau)$ θα μειώνεται. Επομένως, τα χρονικά βήματα της H_c και της H_M θα μειώνονται και θα αυξάνονται αντίστοιχα με γραμμικό τρόπο [10].

2.2.2 Ο Αλγόριθμος QAOA

Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος ανήκει στην οικογένεια των *Μεταβλητών Κβαντικών Αλγορίθμων* και χρησιμοποιείται στην επίλυση κλασικών προβλημάτων συνδυαστικής βελτιστοποίησης. Η λειτουργία του θεωρείται ως μια Trotterized εκδοχή του Αδιαβατικού Κβαντικού Αλγορίθμου και αποτελείται από ένα κβαντικό

και ένα κλασικό μέρος. Η δομή του QAOA περιλαμβάνει επαναλαμβανόμενα *cost* και *mix* επίπεδα, τα οποία ονομάζονται βήματα (steps) και αντιπροσωπεύουν το μεταβλητό κβαντικό κύκλωμα. Τα cost layers συμβολίζονται ως $U_c(\gamma_k)$ και τα mixer layers ως $U_M(\beta_k)$ με το k να υποδηλώνει το k -οστό επίπεδο [11].

Η φιλοσοφία του QAOA είναι να κωδικοποιήσει την Objective συνάρτηση ενός προβλήματος βελτιστοποίησης στην cost Hamiltonian H_c και να αναζητήσει για μια βέλτιστη συμβολοσειρά που θα αποτελέσει την λύση του προβλήματος.

Τα βήματα υλοποίησης του QAOA είναι τα εξής:

- I. Ορισμός της *Cost Hamiltonian* H_c οποία θα εμπεριέχει την λύση του προβλήματος.
- II. Ορισμός της *Mixer Hamiltonian* H_M .
- III. Κατασκευή των μεταβλητών κυκλωμάτων $e^{-i\gamma H_c}$ και $e^{-i\beta H_M}$.
- IV. Επιλογή μιας παραμέτρου $n \geq 1$ και κατασκευή του μεταβλητού κυκλώματος

$$U(\gamma, \beta) = e^{-i\beta_n H_M} e^{-i\gamma_n H_c} \dots e^{-i\beta_1 H_M} e^{-i\gamma_1 H_c} \quad (19)$$

Το οποίο αποτελεί μια επαναλαμβανόμενη εφαρμογή των επιπέδων cost και mixer.

- V. Αρχικοποίηση της κατάστασης $|s\rangle = |+\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z \in \{0,1\}^n} |z\rangle$ η οποία ορίζεται ως μια ομοιόμορφη υπέρθεση στην υπολογιστική κατάσταση βάσης των n qubits.
- VI. Η τελική κατάσταση του κβαντικού κυκλώματος θα έχει την μορφή

$$|\psi_k(\gamma, \beta)\rangle = e^{-i\beta_k H_M} e^{-i\gamma_k H_c} \dots e^{-i\beta_1 H_M} e^{-i\gamma_1 H_c} |s\rangle$$

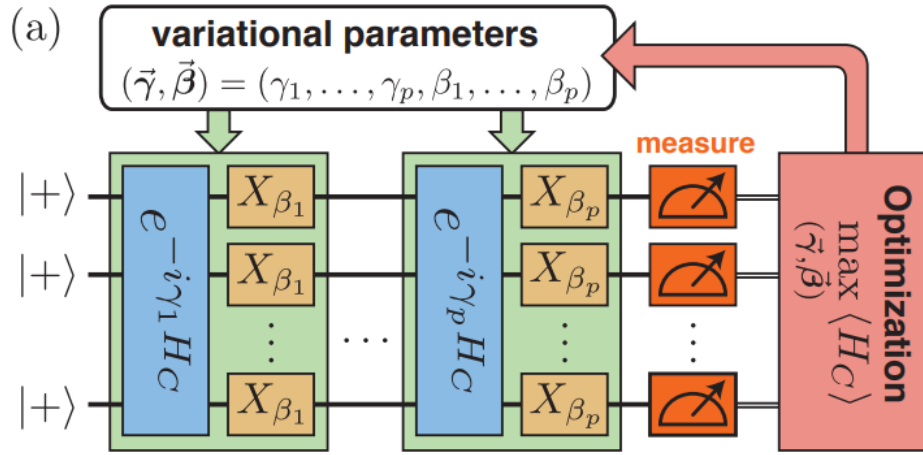
- VII. Στο κλασικό κομμάτι πραγματοποιούνται τεχνικές βελτιστοποίησης με σκοπό να βρεθούν οι βέλτιστες παράμετροι γ^* και β^* για τις οποίες η αναμενόμενη τιμή

$$F_k(\gamma, \beta) = \langle \psi_k(\gamma, \beta) | H_c | \psi_k(\gamma, \beta) \rangle$$

είναι **μεγιστοποιημένη**. Επομένως η τελική ισότητα θα έχει την μορφή

$$(\gamma^*, \beta^*) = \arg \max_{\gamma, \beta} F_k(\gamma, \beta)$$

- VIII. Όταν γίνει η βελτιστοποίηση του κυκλώματος, οι μετρήσεις της τελικής κατάστασης $|\psi_k(\gamma^*, \beta^*)\rangle$ αναπαριστούν τις προσεγγιστικές λύσεις στο πρόβλημα βελτιστοποίησης.



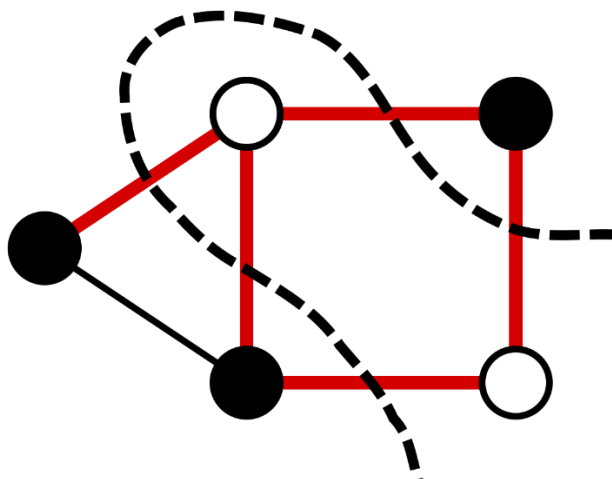
Εικόνα 6: Σχηματική αναπαράσταση του QAOA. Τα πράσινα block αναπαριστούν τα κβαντικά κυκλώματα όπου πραγματοποιούνται οι υπολογισμοί. Με πορτοκαλί χρώμα είναι το block της μέτρησης με σκοπό την εξαγωγή πιθανοτήτων και το τελευταίο block δεξιά αναπαριστά το κλασικό κομμάτι όπου γίνεται η κλασική βελτιστοποίηση των μεταβλητών παραμέτρων γ και β .

2.2.3 Μελέτη προβλήματος εφαρμογής: Max-Cut

Το πρόβλημα της **Μέγιστης Τομής** ή αλλιώς **Max-Cut** αποτελεί ένα από τα πιο διάσημα προβλήματα βελτιστοποίησης που μελετιούνται στη Θεωρία Γράφων. Το συγκεκριμένο πρόβλημα αναφέρει ότι δοσμένου ενός γράφου της μορφής $G = (V, E)$, όπου V το σύνολο των κορυφών, E το σύνολο των ακμών του και w_{ij} το βάρος της ακμής (i, j) , πρέπει να βρεθεί μια τομή x τέτοια ώστε οι κορυφές του γράφου να χωρίζονται σε δύο συμπληρωματικά υποσύνολα S_1, S_2 και το άθροισμα των βαρών των ακμών που θα διαπερνιούνται από την τομή να είναι **βέλτιστο**. Το *Objective* του προβλήματος Max-Cut είναι να διαμερίσει τους κόμβους x_i του Γράφου G όπου $i = 1, \dots, |V|$, σε δύο σύνολα με ετικέτες “0” και “1”, τέτοια ώστε το άθροισμα των ακμών με βάρος w σε διαφορετικές διαμερίσεις που ορίζεται ως

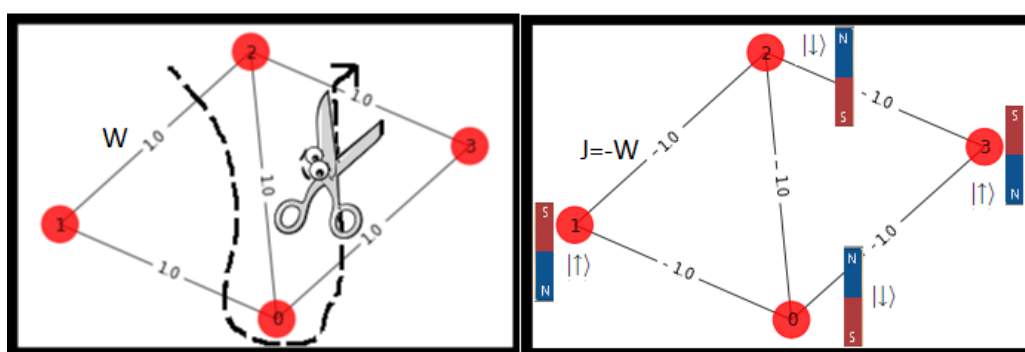
$$C(x) = \sum_{i,j=1}^{|V|} w_{ij} x_i (1 - x_j) \quad (20)$$

να είναι το μέγιστο. Στην σχέση (16) ισχύει $w_{ij} > 0$, $w_{ij} = w_{ji}$, $\forall (i, j) \in E$ και $x_i \in \{0, 1\}$. Με χρήση αυθαίρετων βαρών το πρόβλημα ονομάζεται *weighted-Max-Cut*, ενώ αν όλες οι τιμές των βαρών ισούνται με την μονάδα, δηλαδή $w_{ij} = 1$, παρουσιάζεται μια ειδική περίπτωση του προβλήματος που ονομάζεται *Plain Max-Cut*.



Εικόνα 7: Χαρακτηριστικό παράδειγμα Μέγιστης Τομής (διακεκομμένη γραμμή) σε ένα Γράφο με 5 κορυφές και 6 ακμές.

Το πρόβλημα της Μέγιστης Τομής, λόγω της φύσης του, παρουσιάζει αρκετές εφαρμογές σε πολλούς τομείς. Στον τομέα της *Κλασικής Μηχανικής Μάθησης* μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην καλύτερη *Ομαδοποίηση των γραφημάτων* (Graph Clustering). Η αντιμετώπιση των κορυφών ως features και των ακμών ως αποστάσεις, δίνει στο Max-Cut την επιλογή για εκτέλεση δυαδικής ταξινόμησης. Ο λόγος είναι ότι, σε αντίθεση με τους κοινούς αλγόριθμους ταξινόμησης, δεν χρειάζεται feature space, παρά μόνο τις αποστάσεις μεταξύ των κορυφών. Επιπλέον, η εμβέλεια της εφαρμογής του εκτείνεται και μέχρι τον κλάδο της Θεωρητικής Φυσικής και συγκεκριμένα στην Στατιστική Φυσική των διαταραγμένων συστημάτων. Η εύρεση της μέγιστης τομής παρομοιάζεται με την ελαχιστοποίηση της ενέργειας για μια Χαμιλτονιανή συνάρτηση, η οποία περιγράφει ένα μοντέλο spin glass (κυρίως το μοντέλο Ising). Αυτού του είδους τα μοντέλα συναντιούνται στη φυσική της Συμπυκνωμένης ύλης και περιγράφουν τις επιδράσεις του Σιδηρομαγνητισμού.



Εικόνα 8: Σύνδεση του προβλήματος Maximum-Cut με ένα μοντέλο Spin Glass. Κάθε κορυφή στην δεξιά εικόνα αναπαρίσταται από έναν όρο ο οποίος περιγράφει αν το spin θα είναι πάνω ή κάτω, δίνοντας έτσι στον Γράφο την μορφή ενός προβλήματος δυαδικής ταξινόμησης.

2.3 Αλγόριθμος Goemans-Williamson

2.3.1 Προσεγγιστικοί Αλγόριθμοι

Ένας **προσεγγιστικός** (approximation) ή **ευρετικός** (heuristic) αλγόριθμος, θεωρείται μιας μέθοδος χειρισμού του NP-Completeness ενός προβλήματος βελτιστοποίησης. Η τεχνική αυτή δεν είναι ικανή να διασφαλίσει την καλύτερη λύση σε ένα πρόβλημα, αλλά έχει σαν στόχο να πλησιάσει όσο το δυνατόν πιο κοντά γίνεται στη βέλτιστη λύση σε πολυωνυμικό χρόνο. Ο βασικός τρόπος καταγραφής της απόδοσης του γίνεται με την μέτρηση της **ακρίβειας** (accuracy) [12]. Ο μαθηματικός τύπος της ακρίβειας $r(s_a)$, όπου s_a μια ευρετική λύση, ορίζεται ως ο λόγος της ευρετικής λύσης προς την s^* που συμβολίζει μια οποιαδήποτε λύση του προβλήματος:

$$r(s_a) = \frac{f(s_a)}{f(s^*)} \quad (21)$$

Η εξίσωση αυτή ονομάζεται **λόγος ακρίβειας** (accuracy ratio) και χρειάζεται να είναι όσο περισσότερο κοντά στο 1. Δοσμένου ενός προβλήματος βελτιστοποίησης, ένας προσεγγιστικός αλγόριθμος ονομάζεται **α -προσεγγιστικός** (α -approximation algorithm) με $\alpha > 1$, αν ο λόγος ακρίβειας του, δεν είναι μεγαλύτερος από το α για οποιοδήποτε στιγμιότυπο του προβλήματος αυτού, δηλαδή ισχύει:

$$r(s_a) \leq \alpha$$

Η καλύτερη τιμή του α ονομάζεται **λόγος επίδοσης** ή *approximation ratio* του αλγορίθμου αυτού και αποτελεί σημαντικό εργαλείο εκτίμησης του πόσο αποδοτικός είναι ένας ευρετικός αλγόριθμος.

2.3.2 Semidefinite Programming

Ο Semidefinite προγραμματισμός ή SDP αφορά μια συγκεκριμένη κατηγορία προβλημάτων κυρτής (convex) βελτιστοποίησης, έχοντας αρκετές μαθηματικές ιδιότητες. Ένα SDP πρόβλημα αναφέρεται στην βελτιστοποίηση μιας γραμμικής συνάρτησης η οποία υπόκειται σε περιορισμούς ανισότητας πινάκων. Η τυπική πρωταρχική μορφή που έχει ένα τέτοιο πρόβλημα είναι

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && C \cdot X \\ & \text{subject to} && A_i \cdot X = b_i, i = 1, \dots, m \\ & && X \geq 0 \end{aligned} \quad (22)$$

Ο πίνακας $X \in S^n$ ορίζει μια μεταβλητή πάνω στην οποία πραγματοποιείται η βελτιστοποίηση. Η ανισότητα στην δεύτερη γραμμή υποδηλώνει ο πίνακας X θα πρέπει να είναι positive semidefinite, δηλαδή όλες οι Ιδιοτιμές του να είναι μεγαλύτερες ή ίσες με το μηδέν (και να ισχύει ουσιαστικά η γενική σχέση ότι $\forall k \in \mathbb{R}, k^t A k \geq 0$). Ο αριθμός των πινάκων X που ικανοποιούν τους περιορισμούς ονομάζονται **εφικτές** (feasible) λύσεις και αποτελούν ένα convex σετ [13].

Ένα επίσης σημαντικό χαρακτηριστικό των SDP προβλημάτων είναι η έννοια της *δυναδικότητας* (duality). Σύμφωνα με αυτή, σε κάθε πρόβλημα της μορφής (18), που καλείται *πρωταρχικό* πρόβλημα (primal), αντιστοιχεί ένα SDP πρόβλημα που ονομάζεται *δυναδικό* (dual) και ορίζεται ως

$$\begin{aligned} & \text{maximize } b^T y \\ & \text{subject to } \sum_{i=1}^m A_i y_i \leq C \end{aligned} \quad (23)$$

Όπου το $b = (b_1, \dots, b_m)$ και το διάνυσμα $y = (y_1, \dots, y_m)$ εμπεριέχει τις (δυναδικές) μεταβλητές απόφασης. Η ιδέα που συνδέει τα primal και dual προβλήματα ορίζει πως οι εφικτές λύσεις του ενός προβλήματος μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να περιορίσουν τις λύσεις του άλλου προβλήματος. Αν X και y είναι οι δύο λύσεις του πρωταρχικού και δυναδικού προβλήματος αντίστοιχα, τότε προκύπτει η ακόλουθη σχέση

$$C \cdot X - b^T y = (C - \sum_{i=1}^m A_i y_i) \cdot X \geq 0$$

Όπου η ανισότητα $(C - \sum_{i=1}^m A_i y_i) \cdot X \geq 0$ προκύπτει από το γεγονός ότι οι πίνακες X και y είναι positive semidefinite.

2.3.3 Περιγραφή του Αλγορίθμου GW

Ο *Goemans-Williamson* θεωρείται μια πολλά υποσχόμενη περίπτωση κλασικού προσεγγιστικού αλγορίθμου, οποίος στηρίζεται στην *χαλάρωση SDP* (SDP relaxation) και ήταν ο πρώτος προσεγγιστικός αλγόριθμος που συνδύασε τις έννοιες της *convex βελτιστοποίησης* και του *random hyperplane rounding*.

Βήματα

1. Δοσμένου ενός γράφου της μορφής $G = (V, E)$ με n κόμβους και βάρους ακμών w_{ij} , $(i, j) \in G(E)$ το πρόβλημα Max-Cut παίρνει την μορφή ενός προβλήματος QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) το οποίο θα μεγιστοποιήσει την *Objective συνάρτηση*:

$$\sum_{i,j < i} w_{ij} x_i (1 - x_j) \quad (24)$$

Όπου $x_i \in \{0,1\}$ και ουσιαστικά δείχνει σε ποια πλευρά της τομής (0 ή 1) ανήκει ο κόμβος i .

2. Πραγματοποιείται χαλάρωση στο QP αντικαθιστώντας τις δυαδικές μεταβλητές x_i με μοναδιαία διανύσματα της μορφής $y_i \in \mathbb{R}^n$, και το $x_i x_j$ με το $y_i^T y_j$ όπου το εκθετικό T υποδηλώνει τον *ανάστροφο* του πίνακα y_i . Αυτές οι αλλαγές έχουν σαν αποτέλεσμα ένα SDP πρόβλημα το οποίο μεγιστοποιεί την *Objective συνάρτηση* της μορφής:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i,j < i} w_{ij} (1 - y_i^T y_j) \\
& \text{subject to } \forall i \in \{0, \dots, n\} \\
& y_i^T y_j = 1
\end{aligned} \tag{25}$$

3. Σειρά έχει η επίλυση του SDP προβλήματος με την χρήση ενός polynomial time αλγορίθμου με σκοπό να βρει μια βέλτιστη λύση $\mathbf{Y}^*$.
4. Επιλογή ενός τυχαίου διανύσματος $r \in \mathbb{R}^n$ που θα έχει ληφθεί από μια Gaussian κατανομή και για κάθε i , ορίζεται μια συνάρτηση $\mathbf{h}_i = \mathbf{sgn}(r^T \mathbf{y}_i)$ η οποία θα δίνει την τιμή 1 αν το $x \geq 0$ και την τιμή 0 σε διαφορετική περίπτωση. Αυτή η διαδικασία δίνει μια *Τομή* του συνόλου $\mathbf{V}$ σε δύο υποσύνολα $V_+ = \{i | h_i = 1\}$ και $V_- = \{i | h_i = -1\}$.
5. Ο αλγόριθμος επιστρέφει σαν έξοδο την *Τομή* (partition) της μορφής (V_+, V_-) .

Ο αλγόριθμος Goemans-Williamson (GW) αποτελεί ένα **0.878-προσεγγιστικό αλγόριθμο**, το οποίο σημαίνει πως η τελική τιμή της τομής που θα βρει, θα έχει βάρος τουλάχιστον 87.8% τους βάρους της βέλτιστης τιμής.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Μεθοδολογία

3.1 Μοντέλα Τυχαίων Γράφων

3.1.1 Γράφος Erdős–Rényi

Το γράφημα τύπου *Erdős–Rényi* (ER) θεωρείται ως ένα από τα απλούστερα είδη τυχαίων γράφων που χρησιμοποιούνται σήμερα και πήρε το όνομα του από τους Paul Erdős και Alfred Rényi. Το μοντέλο αυτό περιγράφει ένα γράφημα του οποίου η κατασκευή είναι ένα σύνολο κόμβων με ακμές που προκύπτουν από μια πιθανότητα δημιουργίας τους. Υπάρχουν δύο διαφορετικές εκδοχές του ER Γράφου και είναι οι εξής:

1. Μοντέλο $G(n, p)$:

Το μοντέλο αυτό, το οποίο ονομάζεται και Διωνυμικός Τυχαίος Γράφος, αποτελείται από n κορυφές και η ύπαρξη κάθε πιθανής ακμής μεταξύ δύο κορυφών ορίζεται από μια πιθανότητα p . Επίσης, ο συνολικός αριθμός όλων των πιθανών ακμών στον Γράφο είναι $\binom{n}{2}$.

Μαθηματικές Ιδιότητες

- i. Αναμενόμενος αριθμός ακμών: $E[m] = p\binom{n}{2}$
- ii. Ο βαθμός k οποιουδήποτε κόμβου ακολουθεί την *Διωνυμική κατανομή* και ορίζεται ως

$$P(\deg(u) = k) = \binom{n-1}{k} p^k (1-p)^{n-1-k} \quad (24)$$

Για $n \rightarrow \infty$ και σταθερή πιθανότητα, η κατανομή αυτή προσεγγίζει μια *κατανομή Poisson*:

$$P(\deg(u) = k) \rightarrow \frac{(np)^k e^{-np}}{k!} \quad (25)$$

- iii. Αν $p < \frac{(1-\varepsilon) \ln n}{n}$, τότε ο Γράφος $G(n, p)$ θα εμπεριέχει σε μεγάλο βαθμό απομονωμένες κορυφές και θα είναι αποσυνδεδεμένος.
- iv. Αν $p > \frac{(1+\varepsilon) \ln n}{n}$, ο Γράφος $G(n, p)$ θα είναι σίγουρα συνδεδεμένος [14].

Επομένως ο όρος $\ln n / n$ παίζει σημαντικό ρόλο στην (iii) και (iv) ιδιότητα, διότι αποτελεί ένα απότομο όριο για την *συνδεσιμότητα* (connectivity) του $G(n, p)$.

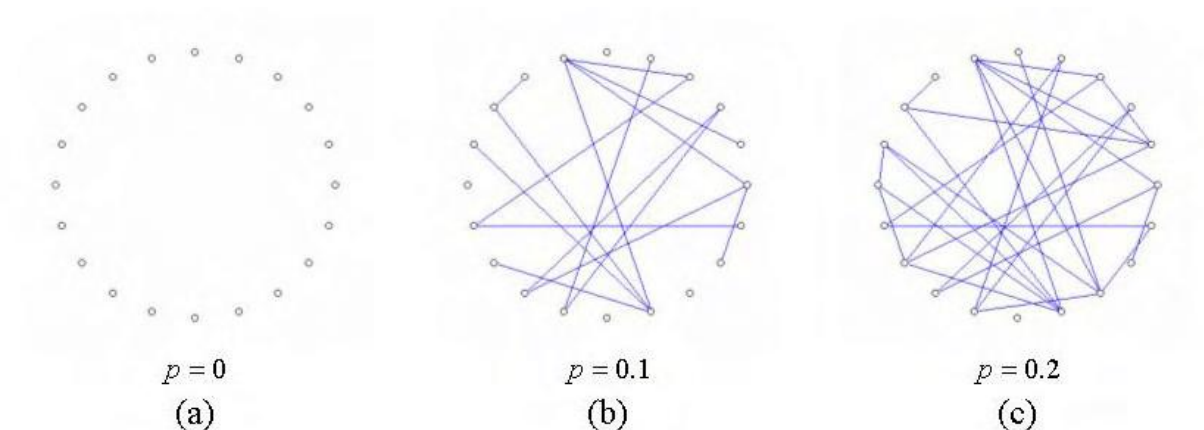
2. Μοντέλο $G(n, M)$

Το μοντέλο αυτό, το οποίο ονομάζεται και Ομοιόμορφος Τυχαίος Γράφος, περιλαμβάνει την n κόμβους, ακριβώς M ακμές στην δομή του, ενώ οι ακμές επιλέγονται με τυχαίο ομοιόμορφο τρόπο από όλες τις πιθανές $\binom{n}{2}$ ακμές.

Μαθηματικές Ιδιότητες

- i. Εφόσον ο αριθμός των ακμών είναι σταθερός, δεν υπάρχει ανεξαρτησία μεταξύ τους.
- ii. Στην περίπτωση μεγάλου n ($n \rightarrow \infty$) και $M \approx p \binom{n}{2}$, ο βαθμός του ακολουθεί την *Διωνυμική κατανομή* ή την *κατανομή Poisson*.
- iii. Όταν $M \approx p \binom{n}{2}$, το μοντέλο $G(n, M)$ μοιράζεται παρόμοια χαρακτηριστικά συνδεσιμότητας με του μοντέλου $G(n, p)$.

Οι **εφαρμογές** του μοντέλου *Erdős-Rényi* περιλαμβάνουν την χρήση του στον τομέα των Δικτύων με σκοπό να συγκριθεί ως δοκιμαστικό μοντέλο (null model) με πραγματικών διαστάσεων τοπολογίες Δικτύων. Το σημαντικό όμως χαρακτηριστικό αυτών των γραφημάτων είναι ότι αποτελούν χρήσιμα εργαλεία για θεωρητική μελέτη των ιδιοτήτων των γράφων όπως είναι η συνδεσιμότητα και το percolation.

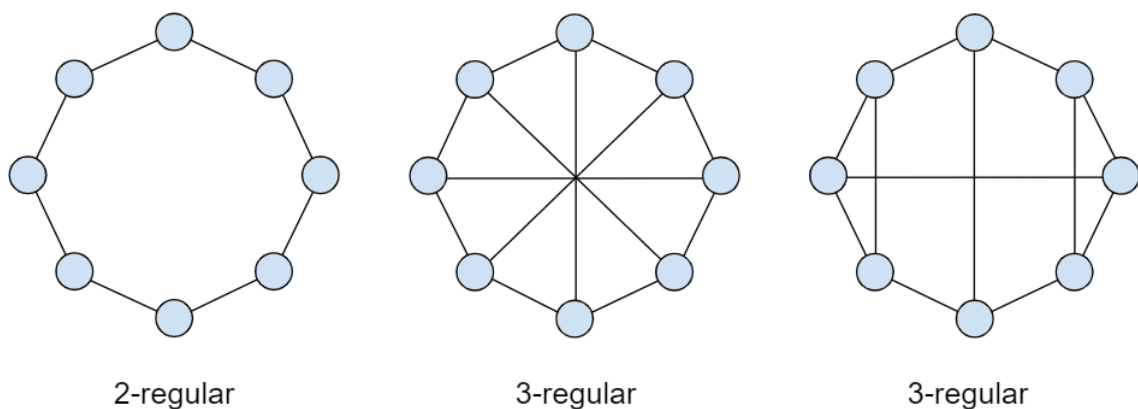


Εικόνα 9: Παραδείγματα *Erdős-Rényi* γραφημάτων για διαφορετικές τιμές του p .

3.1.2 Γράφος Random Regular

Ο Γράφος *Random Regular* αποτελεί ένα είδος τυχαίου γραφήματος στον οποίο ο κάθε κόμβος έχει τον ίδιο βαθμό (ίδιο αριθμό ακμών). Σε αντίθεση με το μοντέλο ER, οι ακμές του random regular δεν είναι ανεξάρτητες, γεγονός που του δίνει πιο καλή δομή, χωρίς να υπολογίζει τόσο τον παράγοντα της τυχειότητας.

Ο Γράφος αυτός ορίζεται ως $G(n, d)$ όπου το n αντιστοιχεί στον αριθμό των κορυφών, και το d είναι ο βαθμός που θα έχει η κάθε κορυφή. Η μεταβλητή που αναφέρεται στον βαθμό συνήθως περιλαμβάνεται και στο όνομα της εκάστοτε εκδοχής του random regular γράφου, δηλαδή αν ένας τέτοιος γράφος παράδειγμα 8 κορυφές και ο **βαθμός** κάθε κορυφής είναι **5**, η περίπτωση αυτή θα λέγεται Random 5-Regular graph [15].



Εικόνα 10: Περιπτώσεις regular γράφων για διαφορετικές τιμές του βαθμού.

Τρόποι Κατασκευής

(α) Μέθοδος Ζεύξης (Μοντέλο Configuration)

Η μέθοδος αυτή περιγράφει την εκχώρηση d -κόμβων (μισές ακμές) σε κάθε κόμβο και την τυχαία αντιστοίχισή τους για σχηματισμό ακμών, αποφεύγοντας με αυτό τον τρόπο τα self-loops και τα διπλότυπα (duplicates). Αν αυτή η διαδικασία αποτύχει (συνολικός βαθμός $\neq$ περιττός αριθμός), γίνεται επανεκκίνηση.

(β) MCMC Switching

Στην μέθοδο αυτή, πραγματοποιείται εκκίνηση με ένα έγκυρο d -regular Γράφο και στην συνέχεια γίνεται σύνδεση των ακμών με τυχαίο τρόπο, προσέχοντας όμως να διατηρείται η ακολουθία των βαθμών.

Μαθηματικές Ιδιότητες

- i. Η κατανομή του βαθμού γίνεται με ντετερμινιστικό τρόπο, δηλαδή ο κάθε κόμβος έχει βαθμό ακριβώς d .
- ii. Αναφορικά με την *συνδεσιμότητα*, ένας d -regular Γράφος:

Για $d \geq 3$ είναι σχεδόν σίγουρα συνδεδεμένος.
Για $d = 2$ το γράφημα αποτελεί μια συλλογή από κύκλους.
- iii. Ο Συντελεστής Ομαδοποίησης είναι χαμηλότερος από ότι σε πραγματικής κλίμακας Δίκτυα αλλά υψηλότερος από ότι σε ένα μοντέλο ER.
- iv. Οι Ιδιοτιμές του πίνακα γειτνίασης ακολουθούν τον *νόμο του ημικυκλίου Wigner* όταν ο αριθμός των κόμβων (n) είναι μεγάλος αριθμός.

Οι random regular Γράφοι παρουσιάζουν ευρύ φάσμα *εφαρμογών*, καθώς αποτελούν χρήσιμα εργαλεία για μοντελοποίηση Δικτύων Διασύνδεσης (πχ Parallel Computing), για μελέτη των *Επεκτάσιμων Γραφημάτων* (Expander Graphs) στην Θεωρητική Επιστήμη των Υπολογιστών αλλά και για benchmarking σε μελέτες του *robustness* των Δικτύων.

3.1.3 Γράφος Barabási–Albert

Το μοντέλο *Barabási–Albert* (BA) ορίζει ένα τυχαίο και scale-free Γράφο, ο οποίος βασίζεται στην χρήση ενός μηχανισμού προσκόλλησης στην προτίμηση (preferential attachment).

Οι δύο βασικές έννοιες του BA Γράφου είναι αυτές του *Growth* και του *Preferential Attachment*. Η έννοια του growth ορίζει πως ο αριθμός των κόμβων ενός δικτύου θα αυξάνεται με τον χρόνο, ενώ αυτή του preferential attachment σημαίνει πως όσο πιο συνδεδεμένος είναι ένας κόμβος, τόσο πιο πιθανό είναι να αποκτήσει νέες συνδέσεις (links) [16].

Τα βήματα που αφορούν την δημιουργία ενός τέτοιου γραφήματος είναι τα εξής:

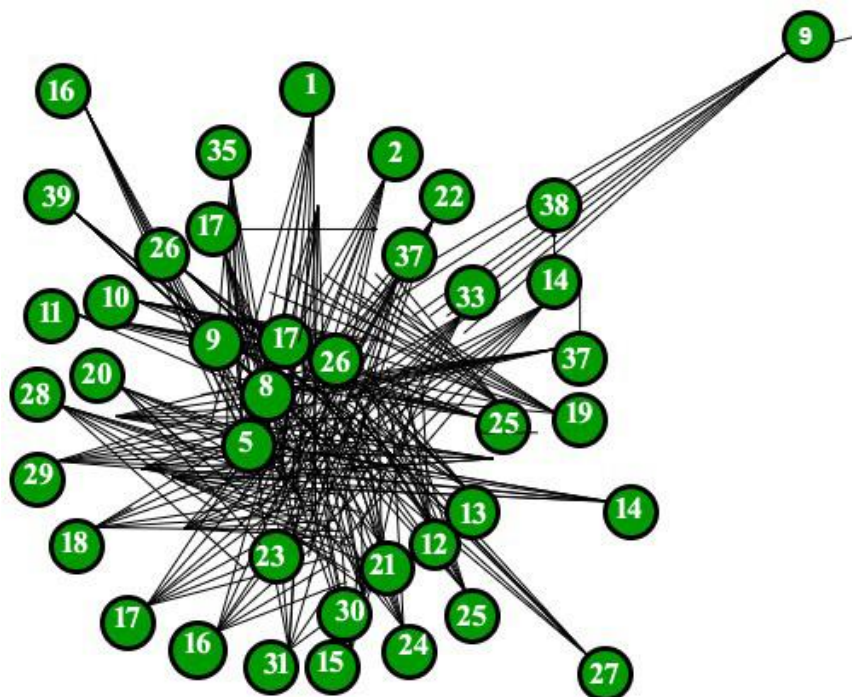
1. Εκκίνηση με ένα συνδεδεμένο γράφημα μικρού μεγέθους, για παράδειγμα μια κλίκα με m_0 κόμβους.
2. Για κάθε νέο κόμβο, θα πραγματοποιείται προσθήκη m ακμών συνδέοντας τους υπάρχοντες κόμβους με πιθανότητα

$$P_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j} \quad , \quad k_i = \deg(i)$$

Μαθηματικές Ιδιότητες

- i. Η κατανομή του βαθμού ακολουθεί την μαθηματική σχέση $P(k) \sim k^{-\gamma}$ όπου $\gamma \approx 3$.
- ii. Ως **hubs** ορίζονται οι κεντρικοί κόμβοι με υψηλή συνδεσιμότητα.

- iii. Ο Συντελεστής Ομαδοποίησης είναι υψηλότερος από το ER μοντέλο αλλά χαμηλότερος από ένα κανονικής κλίμακας δίκτυο.



Εικόνα 11: Παράδειγμα γράφου Barabasi-Albert με 40 κόμβους και η τιμή για το preferential attachment είναι 15.

Το μοντέλο Barabasi-Albert θεωρείται αρκετά σημαντικό καθώς μέσα στις εφαρμογές του περιλαμβάνεται η μοντελοποίηση τοπολογιών όπως είναι του Ίντερνετ, αλλά και των κοινωνικών και βιολογικών δικτύων. Επίσης, αυτοί οι Γράφοι χρησιμοποιούνται και στην μελέτη των επιδημιών, συμβάλλοντας στη ανάπτυξη χαρτών εξάπλωσης τους αλλά και στον τρόπο που γίνεται η διάχυση πληροφοριών.

3.1.4 Λόγος χρήσης μοντέλων Τυχαίων Γράφων

Οι τυχαίοι Γράφοι χρησιμοποιούνται συχνά στους Μεταβλητούς Κβαντικούς Αλγορίθμους που πραγματεύονται προβλήματα συνδυαστικής βελτιστοποίησης για λόγους συγκριτικής αξιολόγησης μεταξύ κβαντικών-κλασικών αλγορίθμων, θεωρητικής ανάλυσης των ιδιοτήτων τους αλλά και μελέτη των πρακτικών εφαρμογών τους. Τα μοντέλα τυχαίων γράφων για τον QAOA χρησιμεύουν ως δοκιμαστικά πεδία για το λεγόμενο κβαντικό πλεονέκτημα, ως εργαλεία για τον συντονισμό των παραμέτρων (ή την καλύτερη αρχικοποίηση τους) και ουσιαστικά λειτουργούν σαν σύνδεση θεωρίας και πειράματος [17].

3.2 Max-Cut με τον Goemans-Williamson

Ο αλγόριθμος Goemans-Williamson υλοποιείται με την χρήση του εργαλείου CVXPY, το οποίο αποτελεί μια γλώσσα μοντελοποίησης ανοιχτού κώδικα ενσωματωμένη στην Python και χρησιμοποιείται για προβλήματα κυρτής βελτιστοποίησης (convex optimization).

1. Αρχικά, το πρώτο πράγμα είναι γίνει το `import` των απαραίτητων βιβλιοθηκών ούτως ώστε να χρησιμοποιηθούν αργότερα στον κώδικα.

```
import cvxpy as cp
import numpy as np
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt
```

Η κάθε βιβλιοθήκη σχετίζεται με μια πτυχή του συγκεκριμένου κώδικα, καθώς θα αφορά είτε την δημιουργία του γράφου (*networkx*) σχηματισμό του αλγορίθμου (*cvxpy*, *numpy*), είτε την οπτικοποίηση των τελικών αποτελεσμάτων (*matplotlib*).

2. Στην συνέχεια παρουσιάζεται ένα μικρό τμήμα που αφορά την ομοιόμορφη εκχώρηση τιμών στις ακμές του γράφου, δηλαδή το βάρος της κάθε ακμής. Εφόσον εδώ εξετάζεται η περίπτωση ενός *Plain Max-Cut*, το βάρος κάθε ακμής θα έχει τιμή ίση με 1.

```
def get_edge_weight(G, i, j):
    edge_data = G[i][j]
    if isinstance(edge_data, dict):
        return edge_data.get('weight', 1)
    return edge_data
```


3. Σειρά έχει τώρα ο ορισμός του κύριου αλγόριθμου, που θα επιλύει το πρόβλημα Max-Cut.

```
def goemans_williamson_maxcut(G, num_rounds=100):

    n = G.number_of_nodes()
    nodes = list(G.nodes())

    X = cp.Variable((n, n), symmetric=True)

    objective_expr = 0
    for i, j in G.edges():
        weight = get_edge_weight(G, i, j)
        # Map node labels to indices
        i_index = nodes.index(i)
        j_index = nodes.index(j)
        objective_expr += 0.5 * weight * (1 - X[i_index, j_index])

    constraints = [cp.diag(X) == 1, X >> 0]
    problem = cp.Problem(cp.Maximize(objective_expr), constraints)

    problem.solve(solver=cp.SCS)

    # Optimal matrix value
    X_val = X.value
    X_val = (X_val + X_val.T) / 2

    # Eigenvalue decomposition of X_val
    eigenvalues, eigenvectors = np.linalg.eigh(X_val)
    sqrt_eigenvalues = np.sqrt(np.maximum(eigenvalues, 0))
    V = eigenvectors @ np.diag(sqrt_eigenvalues)

    best_cut_value = -np.inf
    best_cut = None
```

- Ο αλγόριθμος θα δέχεται σαν ορίσματα ένα Γράφο ο οποίος θα δημιουργείται από την βιβλιοθήκη *Networkx*, και τον αριθμό των τυχαίων στρογγυλοποιήσεων του υπερεπίπεδου, που θα οριστεί στις 100.
- Ορίζεται η SDP μεταβλητή $\mathbf{X}$, η οποία θα είναι ένας θετικά ημιορισμένος πίνακας που θα βοηθήσει στην διαδικασία του SDP relaxation. Το $\mathbf{X}$ ορίζεται ως ένας πίνακας διαστάσεων $n \times n$ και επίσης, προστίθεται ένας περιορισμός που αφορά την συμμετρικότητα του πίνακα αυτού.
- Η διαδικασία που ακολουθεί μετά είναι η δημιουργία της Objective συνάρτησης με την βοήθεια του παραπάνω πίνακα και της SDP χαλάρωσης. Ουσιαστικά μέσα στον βρόγχο:

Το βάρος για το Max-Cut αποτελεί κομμάτι της Objective συνάρτησης

$$\sum_{(i,j) \in E} w_{ij} \frac{1 - u_i u_j}{2}$$

Κατά την διαδικασία της SDP χαλάρωσης, γίνεται αντικατάσταση των όρων $u_i u_j$ με τον θετικό και ημιορισίμο πίνακα X_{ij} . Επομένως αυτή η αλλαγή δίνει ένα SDP πρόγραμμα το οποίο θα μεγιστοποιεί πλέον την Objective συνάρτηση

$$\sum_{(i,j) \in E} w_{ij} \frac{1 - X_{ij}}{2}$$

- Περιορισμοί: ο περιορισμός $\text{diag}(\mathbf{X}) == \mathbf{1}$ ορίζει πως κάθε διαγώνια εισαγωγή στοιχείου θα πρέπει να ισούται με το 1. Αυτό είναι σημαντικό, διότι στην κλασική περίπτωση του Max-Cut, με χρήση συνδυαστικών τεχνικών η μεταβλητή δυαδικής μορφής $u_i \in \{\pm 1\}$, $u_i^2 = 1$. Στην προσέγγιση του Max-Cut με χρήση SDP χαλάρωσης, η μεταβλητή X ορίζεται ως ο πίνακας $u^T u$ με τάξη (rank) 1. Επομένως, πρέπει να ισχύει η σχέση $X_{ij} = u_i^2 = 1$. Ο δεύτερος περιορισμός $\mathbf{X} \succcurlyeq \mathbf{0}$ επιβεβαιώνει απλά ότι ο πίνακας X είναι *θετικός ημιορισίμος* (positive semidefinite).
- Στην συνέχεια γίνεται η κλήση του SCS (Splitting Conic Solver), ενός εργαλείου που θα βοηθήσει στην επίλυση του προβλήματος SDP, με τις επόμενες δύο γραμμές να αποτελούν μέρος αυτής της διαδικασίας, εξασφαλίζοντας αριθμητική συμμετρία.
- Πραγματοποιείται decomposition της λύσης ούτως ώστε να ληφθούν αποτελέσματα τα οποία θα ικανοποιούν την σχέση $X = V^T V$.

4. Το πρόγραμμα συνεχίζει με την διαδικασία Random Hyperplane Rounding το οποίο αφορά την γεωμετρική ερμηνεία όπου τα διανύσματα αντιστοιχίζονται σε καταταμήσεις με βάση ένα τυχαίο υπερεπίπεδο.

```
# Random hyperplane rounding
for _ in range(num_rounds):

    r = np.random.randn(V.shape[1])
    r /= np.linalg.norm(r)

    cut = {}
    for i, node in enumerate(nodes):
        cut[node] = 1 if V[i, :].dot(r) >= 0 else -1

    # Evaluate the cut value
    cut_value = 0
    for i, j in G.edges():
        weight = get_edge_weight(G, i, j)
        if cut[i] != cut[j]:
            cut_value += weight

    if cut_value > best_cut_value:
        best_cut_value = cut_value
        best_cut = cut.copy()

return best_cut, best_cut_value
```

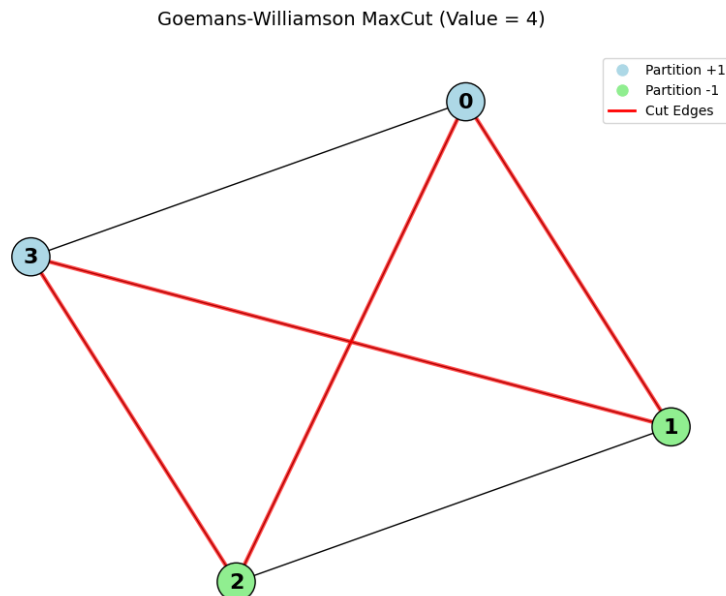
Τα βήματα που ακολουθούνται εδώ είναι:

- Παραγωγή ενός τυχαίου μοναδιαίου διανύσματος r .
- Κάθε κόμβος κατηγοριοποιείται στο σύνολο -1 ή $+1$ με αυτό να εξαρτάται εξ'ολοκλήρου σε ποια πλευρά του hyperplane βρίσκεται το διάνυσμα που τον αντιπροσωπεύει.
- Γίνεται υπολογισμός της Τομής.
- Μετά την πραγματοποίηση πολλών επαναλήψεων (rounds) λαμβάνεται η καλύτερη τομή πάνω στον Γράφο.

5. Στο επόμενο μέρος εκτελείται ο αλγόριθμος GW πάνω στον ίδιο τύπο Γράφου που εξετάστηκε και ο κβαντικός αλγόριθμος QAOA και με τις ίδιες ακριβώς παραμέτρους.

```
if __name__ == "__main__":  
    # Create an erdos-renyi graph with weighted edges  
    nodes = 4  
    prob = 0.6  
    seed = 1967  
    G = nx.erdos_renyi_graph(nodes, prob, seed=seed)  
  
    best_cut, best_cut_value = goemans_williamson_maxcut(G, num_rounds=100)  
    print("Best cut found (node assignment):", best_cut)  
    print("Cut value (sum of weights of cut edges):", best_cut_value)
```

Ο αλγόριθμος GW λύνει το πρόβλημα Max-Cut για τον αβαρή *Erdos-Renyi* Γράφο βρίσκοντας:



Best cut found (node assignment): {0: 1, 1: 1, 2: -1, 3: -1}

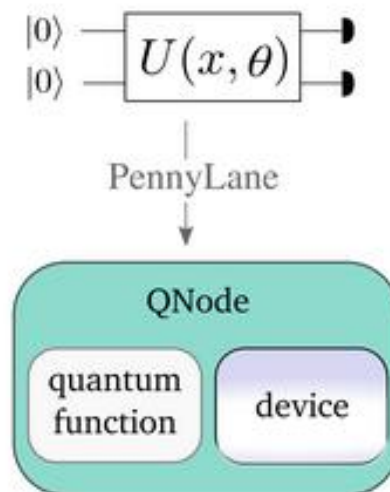
Cut value (sum of weights of cut edges): 4

Ερμηνεία:

- Κατατάσσει τους κόμβους 0 και 3 στην διαμέριση **+1 (γαλάζιο)**
- Κατατάσσει τους κόμβους 1 και 2 στην διαμέριση **-1 (πράσινο)**
- Πετυχαίνει για την Τομή την τελική τιμή **4** (η τιμή για κάθε ακμή ισούται με 1, επομένως το 4 είναι το άθροισμα των ακμών από τις οποίες περνάει η Τομή)

3.3 Max-Cut με τον QAOA

Η υλοποίηση του QAOA, θα γίνει μέσω της βιβλιοθήκης *PennyLane*, ενός εργαλείου που χρησιμοποιείται στην ανάπτυξη υβριδικών κβαντικών-κλασικών αλγορίθμων. Στην βιβλιοθήκη αυτή, οι αναπαράσταση των κβαντικών πράξεων γίνεται από ένα ειδικό αντικείμενο που αποκαλείται *Quantum Node* ή *QNode*. Μέσα στο αντικείμενο αυτό βρίσκονται οι κβαντικοί υπολογισμοί (που γίνονται από το κβαντικό κύκλωμα) και ένα *device* το οποίο παίζει τον ρόλο του προσομοιωτή. Ο ρόλος του QNode είναι να πάρει το κβαντικό κύκλωμα και να το δέσει με την συσκευή (device) που θα το προσομοιώσει.



Εικόνα 12: Διαγραμματική αναπαράσταση ενός QNode.

Σχετικά με το κβαντικό κομμάτι του QAOA, χρησιμοποιήθηκαν σαν δεδομένα οι δομές από 3 διαφορετικά είδη γράφων με το κάθε είδος να έχει 3 εκδοχές του εκάστοτε γραφήματος, ούτως ώστε να μελετηθεί η απόδοση του με διαφορετικό αριθμό qubits.

Όσον αφορά το κλασικό κομμάτι της βελτιστοποίησης, ο optimizer που την πραγματοποιεί και στις 9 περιπτώσεις είναι ο *Adagrad*, διότι θεωρείται μια ιδανική επιλογή για ρύθμιση των παραμέτρων του μεταβλητού κβαντικού κυκλώματος, βοηθώντας έτσι τον αλγόριθμο να βρει προσεγγιστικές λύσεις για το πρόβλημα Max-Cut.

1. Ο QAOA ξεκινάει με την φόρτωση των απαραίτητων βιβλιοθηκών που θα χρησιμοποιηθούν

```
import pennylane as qml
import networkx as nx
from pennylane import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

Ουσιαστικά, η **πρώτη** είναι η κύρια βιβλιοθήκη από όπου θα αντληθούν οι πληροφορίες για την δομή ολόκληρου του αλγορίθμου. Η **δεύτερη** αφορά την αρχική κατασκευή του γραφήματος και η **τρίτη** σχετίζεται με τις πράξεις που θα γίνουν κυρίως στο κλασικό κομμάτι. Η **τέταρτη** και τελευταία βιβλιοθήκη είναι

μόνο για την οπτικοποίηση του κβαντικού κυκλώματος και τα τελικά αποτελέσματα για το πρόβλημα.

2. Στην συνέχεια, ορίζεται η δομή του γραφήματος για την οποία θα εφαρμοστεί το πρόβλημα Max-Cut

```
nodes = n_wires = 4 #qubits
probability = 0.6
seed = 1967

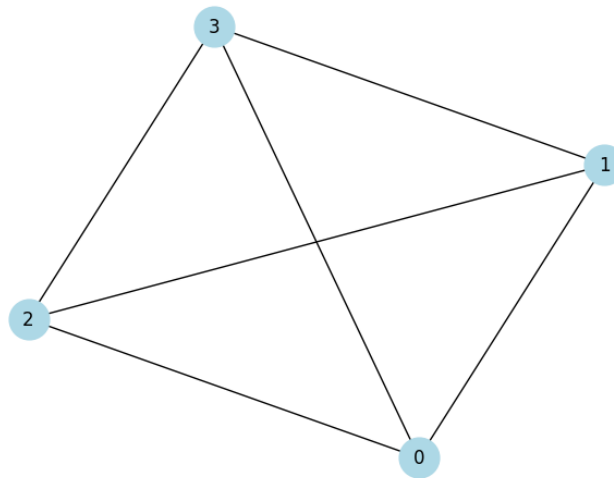
erdos_graph = nx.erdos_renyi_graph(nodes, probability, seed=seed)

erdos_edges = list(erdos_graph.edges())
print(erdos_edges)

nx.draw(erdos_graph, with_labels=True, node_color='lightblue', edge_color='black', node_size=700)
plt.show()
```

- i. Ο αριθμός των *κόμβων* θα ισούται με τον αριθμό των *qubits* που θα χρησιμοποιηθούν. Εδώ ο αριθμός αυτός θα είναι ίσος με 4.
- ii. Επειδή το γράφημα εδώ θα είναι τύπου *Erdos-Renyi*, η πιθανότητα δημιουργίας ακμών **p** θα οριστεί στο 0.6 (60%)

Το γράφημα που θα παραχθεί θα είναι στο τέλος είναι



Ο λόγος επιλογής της συγκεκριμένης εκδοχής γραφήματος είναι γιατί αποτελεί το πιο απλό παράδειγμα από τα 9 ώστε να περιγράψει καλύτερα την λειτουργία του QAOA. Επιπλέον, λόγω του μικρού βαθμού πολυπλοκότητας και των λίγων qubits, θα είναι πιο εύκολη η αναπαράσταση του κβαντικού του κυκλώματος παρακάτω αλλά και των αποτελεσμάτων στο τέλος.

3. Επόμενο μέρος είναι ο ορισμός των **Cost** $U_c(\gamma_k)$ και **Mixer** $U_M(\beta_k)$ επιπέδων που μαζί θα αποτελούν ένα επίπεδο στο κβαντικό κύκλωμα του QAOA. Για ένα Γράφο $G(V, E)$ και το πρόβλημα Max-Cut, η μορφή των Cost και Mixer Hamiltonian H_C και H_M θα ορίζονται ως

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (1 - \sigma_z^i \sigma_z^j) \quad H_M = \sum_{j \in V} \sigma_x^j$$

Η μορφή που θα έχει το Mixer επίπεδο $U_M(\beta_k)$ θα είναι

$$U_B(\beta_k) = e^{-i\beta_k H_M} = \prod_{i=1}^n RX_i(2\beta_k) \quad (26)$$

Αντίστοιχα, το Cost επίπεδο $U_c(\gamma_k)$ θα έχει την μορφή

$$U_C(\gamma_k) = e^{-i\gamma_k H_C} = \prod_{i=1, j < i}^n R_{Z_i Z_j}(-2w_{ij}\gamma_k) \quad (27)$$

Η σχέσεις (26) και (27) σχηματίζουν τους δύο τελεστές που θα εφαρμόζονται επαναληπτικά στο κβαντικό κύκλωμα και μαζί αποτελούν ένα επίπεδο του QAOA. Οι τελεστές αυτοί είναι συναρτήσεις των πυλών Pauli και των μεταβλητών παραμέτρων γ , β .

```
# unitary operator U_B with parameter beta
def U_B(beta):
    for wire in range(n_wires):
        qml.RX(2 * beta, wires=wire)

# unitary operator U_C with parameter gamma
def U_C(gamma):
    for edge in erdos_edges:
        qml.CNOT(wires=edge)
        qml.RZ(gamma, wires=edge[1])
        qml.CNOT(wires=edge)
```

Στην εικόνα φαίνεται ο κώδικας ο οποίος δημιουργεί τα δύο κυκλώματα. Αυτό το μέρος αποτελεί επίσης και το πρώτο μέρος του QNode που θα οριστεί μετά.

```
def bitstring_to_int(bit_string_sample):
    return int(2 ** np.arange(len(bit_string_sample)) @ bit_string_sample[::-1])
```

Αυτή η συνάρτηση θα κάνει μετατροπή ενός δυαδικού sample [1,0,0,1] (πχ qubits [q0,q1,q2,q3]) στην δεκαδική του μορφή.

4. Το επόμενο βήμα στο πρόγραμμα είναι ο ορισμός της *συσσκευής* (device) που θα χρησιμοποιηθεί για να τρέξει το κβαντικό κύκλωμα, και ο ορισμός του Quantum Node.

```
dev = qml.device("qulacs.simulator", wires=n_wires, shots=20)

@qml.qnode(dev)
def circuit(gammas, betas, return_samples=False):
    # apply Hadamards to get the n qubit |+> state
    for wire in range(n_wires):
        qml.Hadamard(wires=wire)

    # p instances of unitary operators
    # p = (gammas, betas) determine the number of layers a.k.a.
    # the repeated applications of U_C and U_B circuits (circuit depth)
    for gamma, beta in zip(gammas, betas):
        U_C(gamma)
        U_B(beta)

    if return_samples:
        # sample bitstrings to obtain cuts
        return qml.sample()

    # during the optimization --> evaluate the objective using expval
    C = qml.sum(*(qml.PauliZ(w1) @ qml.PauliZ(w2) for w1, w2 in erdos_edges))
    return qml.expval(C)

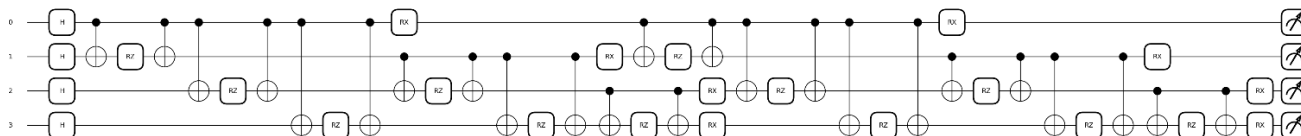
print(qml.draw_mpl(circuit)([0.3, 0.4], [0.5, 0.6], [0.3, 0.6]))

def objective(params):
    # Minimize the negative of the objective function C by postprocessing the QNode output
    return -0.5 * (len(erdos_edges) - circuit(*params))
```

- Η συσκευή η οποία επιλέγεται για την προσομοίωση είναι η **Qulacs**, η οποία παρέχει πρόσβαση σε προσομοιώσεις διανυσμάτων κατάστασης. Μετά, ορίζεται ο QNode ο οποίος εμπεριέχει μέσα την συσκευή που ορίστηκε παραπάνω και ουσιαστικά, θα ενώσει το device και το quantum circuit.
- Το *κβαντικό κύκλωμα* ξεκινάει με αρχικοποίηση μιας κατάστασης $|+\rangle$ βάζοντας την σε μια ομοιόμορφη υπέρθεση όλων των n καταστάσεων βάσης με χρήση της κβαντικής πύλης Hadamard.
- Ο QNode ρυθμίζεται ώστε να δέχεται ως εισόδους τις παραμέτρους **gammas** και **betas**, οι οποίες καθορίζουν τον αριθμό των επιπέδων (επαναλαμβανόμενες εφαρμογές των τελεστών $U_B U_C$) του κυκλώματος μέσω του μήκους τους.
- Μέσα στον QNode γίνεται και η προσθήκη ενός keyword argument με το όνομα **return_samples**. Η default τιμή του είναι το **False** και σημαίνει πως στο τέλος θα επιστραφεί η αναμενόμενη τιμή της *Cost Hamiltonian*. Εφόσον όμως γίνει η βελτιστοποίηση, ο ίδιος κβαντικός κόμβος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη

δειγματοληψία μιας προσεγγιστικής λύσης σε μορφή bitstring, θέτοντας *return samples = "True"*.

- Το τελικό κβαντικό κύκλωμα που θα προκύψει θα έχει την παρακάτω μορφή



Όπου φαίνεται η εφαρμογή των κβαντικών πυλών που περιεγράφηκαν παραπάνω καθώς και η επαναληπτική εφαρμογή των τελεστών $U_B U_C$.

- Η τελευταία συνάρτηση **objective** θα χρησιμοποιηθεί για την μεγιστοποίηση της Συνάρτησης κόστους $C(\gamma, \beta)$. Μόνο που για να γίνει αυτό, θα πρέπει να ελαχιστοποιηθεί το αρνητικό αυτής της συνάρτησης.
5. Το τελευταίο κομμάτι του προγράμματος είναι η μετάβαση στην κλασική ρουτίνα και η βελτιστοποίηση της Συνάρτησης κόστους με χρήση κλασικών τεχνικών. Συγκεκριμένα, γίνεται χρήση του optimizer **Adagrad**, ο οποίος είναι ένας αλγόριθμος που προσαρμόζει το ρυθμό μάθησης για κάθε παράμετρο ξεχωριστά, με βάση τις προηγούμενες κλίσεις του.

```
def qaoa_maxcut(n_layers=1):
    print(f"\nnp={n_layers:d}")

    # initialize the parameters near zero
    init_params = 0.01 * np.random.rand(2, n_layers, requires_grad=True)

    # initialize optimizer: Adagrad works well empirically
    opt = qml.AdagradOptimizer(stepsize=0.5)

    # optimize parameters in objective
    params = init_params.copy()
    steps = 40
    for i in range(steps):

        params = opt.step(objective, params)

        if (i + 1) % 5 == 0:
            print(f"Objective after step {i+1:3d}: {-objective(params): .7f}")

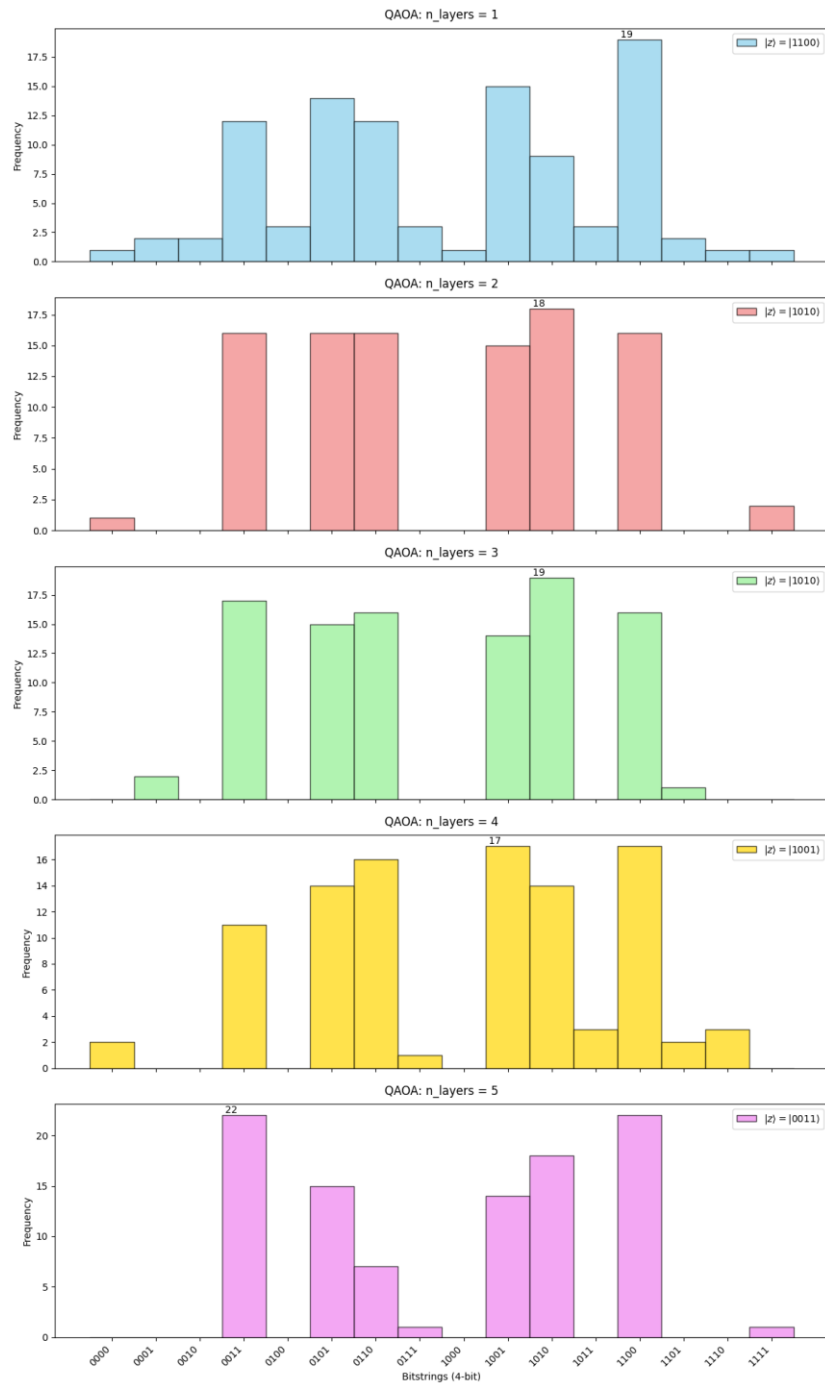
    # sample 100 bitstrings by setting return_samples=True and the QNode shot count to 100
    bitstrings = circuit(*params, return_samples=True, shots=100)
    # convert the samples bitstrings to integers
    sampled_ints = [bitstring_to_int(string) for string in bitstrings]

    # print optimal parameters and most frequently sampled bitstring
    counts = np.bincount(np.array(sampled_ints))
    most_freq_bit_string = np.argmax(counts)

    print(f"Optimized parameter vectors:\ngamma: {params[0]}\nbeta: {params[1]}")
    print(f"Most frequently sampled bit string is: {most_freq_bit_string:04b}")

    return -objective(params), sampled_ints
```

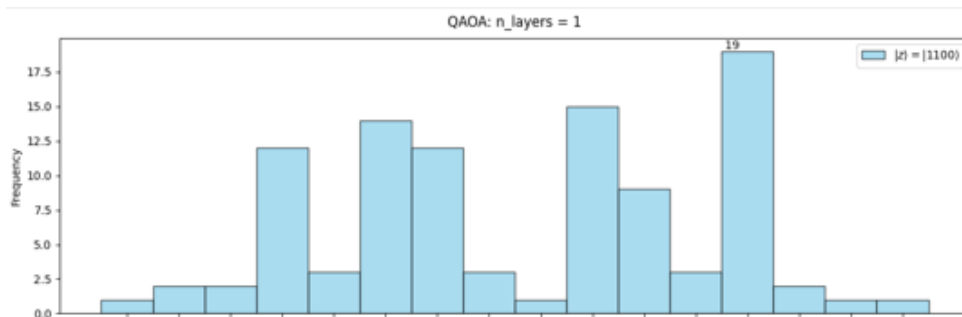
- Γίνεται ορισμός της μεταβλητής p που θα καθορίσει ακριβώς το βάθος του κβαντικού κυκλώματος, δηλαδή τον αριθμό των επαναλαμβανόμενων τελεστών $U_B U_C$).
- Η αρχικοποίηση των παραμέτρων γίνεται με τυχαίο τρόπο, ενώ ορίζονται επίσης και κάποιες παράμετροι για την βελτιστοποίηση όπως είναι ο ρυθμός μάθησης (η) και ο αριθμός των επαναλήψεων.
- Η βελτιστοποίηση γίνεται στην Objective συνάρτηση και στις παραμέτρους (γ, β) (`params[0], params[1]`) και στο τέλος λαμβάνονται επαναληπτικά, τα δείγματα (`samples`) από το κύκλωμα με σκοπό να προκύψει μια κατανομή των bitstrings. Οι καλύτερες κατανομές θα είναι αυτές που έχουν την πιο συχνά bitstrings. Η έξοδος του προγράμματος είναι η βέλτιστη Τομή καθώς και μια λίστα των βέλτιστων δειγμάτων για κάθε επίπεδο με την μορφή ιστογράμματος.
- **Μορφή της Τομής (cut value) z :** Θα συμβολίζεται με ένα bitstring αποτελούμενο από 0 και 1, όπου αν το $z_i = 0$ ο κόμβος i θα ανήκει στο σύνολο A ενώ αν $z_i = 1$ ο κόμβος i θα ανήκει στο σύνολο B . Για παράδειγμα, αν η μορφή της τομής είναι $z = |0101\rangle = |z_0 z_1 z_2 z_3\rangle$ αυτό σημαίνει πως οι κόμβοι $z_0, z_2 \in A$ και οι κόμβοι $z_1, z_3 \in B$.



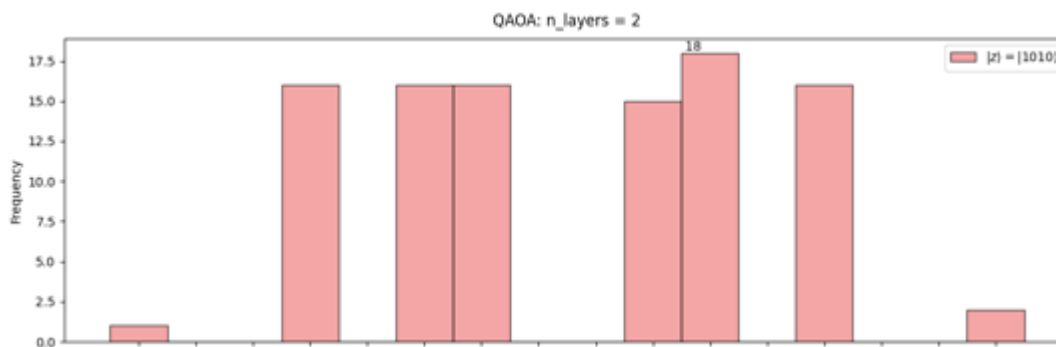
Εικόνα 13: Αποτελέσματα του QAOA σε μορφή ιστογράμματος για το πρόβλημα Max-Cut στον Γράφο Erdos-Renyi με 4 κόμβους. Κάθε χρώμα αναπαριστά ένα διαφορετικό επίπεδο και στον άξονα x είναι τα bitstrings σε δυαδική μορφή. Στον άξονα y δείχνονται οι τομές με την μεγαλύτερη συχνότητα, δηλαδή οι βέλτιστες τιμές σε κάθε επίπεδο, ενώ πάνω δεξιά είναι η βέλτιστη τομή z στην δυαδική της μορφή.

3.3.1 Ερμηνεία των Αποτελεσμάτων

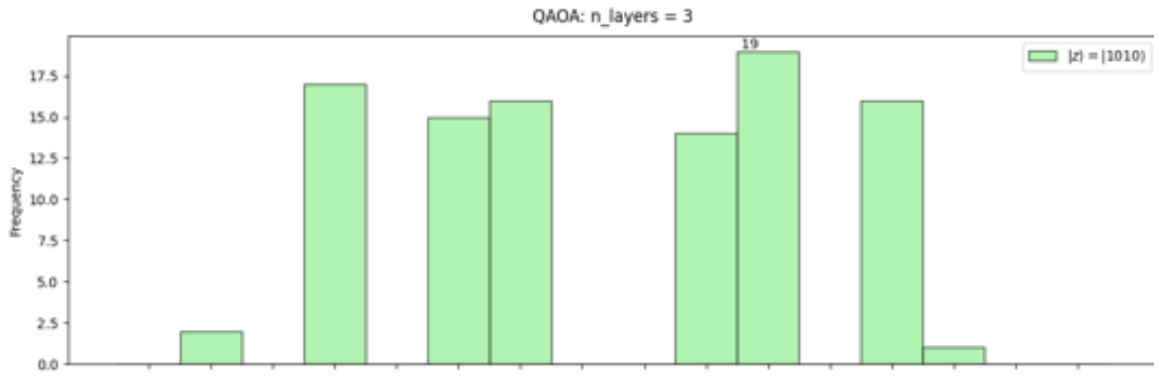
Τα αποτελέσματα του QAOA για τον Erdos-Renyi graph περιγράφονται ως εξής:



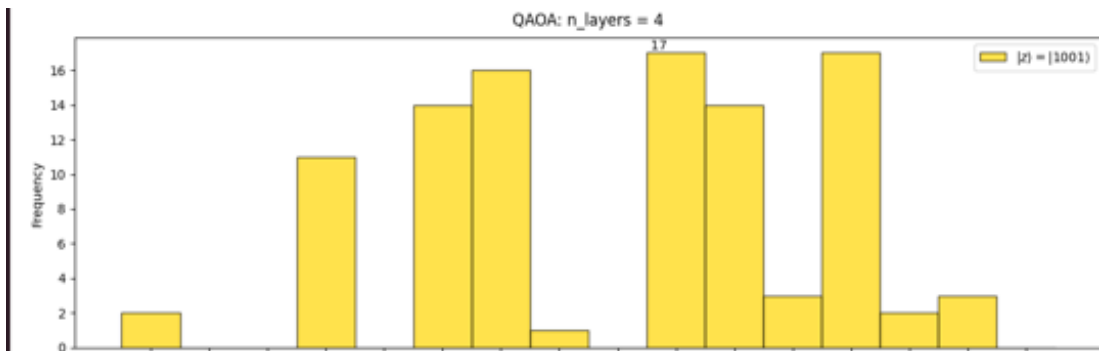
- Για $p=1$, η τιμή της Objective συνάρτησης ξεκινάει από 3.1 και μέχρι το τέλος της επανάληψης διακυμαίνεται κοντά στο 3.8. Η τελική τιμή της Objective είναι **3.85**.
- Η τιμή / λύση του πιο συχνού *bitstring* είναι 1100, η οποία βρίσκεται με συχνότητα 19. Αντίστοιχα στον GW, με ανάθεση κόμβων στο $\{\pm 1\}$ θα ήταν $\{0:1, 1:1, 2:-1, 3:-1\}$.
- Δεδομένου ότι ο αλγόριθμος GW βρίσκει το 100% της τομής για αυτό τον Γράφο με την τιμή 4, ο αλγόριθμος QAOA πετυχαίνει *approximation ratio* $\alpha_{p=1} = \frac{3.85}{4} = \mathbf{0.9625}$, δηλαδή σχεδόν το 96% της πραγματικής τομής.



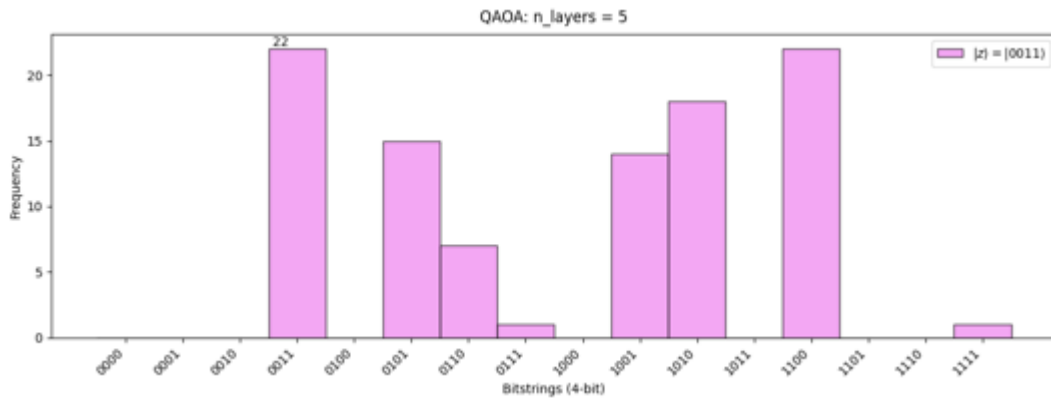
- Για $p=2$, η τιμή της Objective συνάρτησης διακυμαίνεται μεταξύ 3.75-4.0, υποδεικνύοντας καλύτερη σταθερότητα από ό,τι στο πρώτο επίπεδο ($p=1$). Η τελική τιμή της Objective είναι **4.0**.
- Η νέα τιμή του πιο συχνού *bitstring* είναι 1010, η οποία βρίσκεται με συχνότητα 18. Αντίστοιχα στον GW, με ανάθεση κόμβων στο $\{\pm 1\}$ θα ήταν $\{0:1, 1:-1, 2:1, 3:-1\}$.
- Δεδομένου ότι ο αλγόριθμος GW βρίσκει το 100% της τομής για αυτό τον Γράφο με την τιμή 4, ο αλγόριθμος QAOA πετυχαίνει *approximation ratio* $\alpha_{p=2} = \mathbf{1.00}$, δηλαδή την βέλτιστη τιμή της πραγματικής τομής.



- Για $p=3$, η τιμή της Objective συνάρτησης ξεκινάει από 2.90 και μέχρι το τέλος της επανάληψης διακυμαίνεται κοντά στο 3.90. Αυτή η συμπεριφορά υποδηλώνει ότι τα κυκλώματα μεγαλύτερου βάθους p απαιτούν πιο μελετημένη αρχικοποίηση. Η τελική τιμή της Objective είναι **4.0**.
- Η νέα τιμή του πιο συχνού *bitstring* είναι 1010, η οποία βρίσκεται με συχνότητα 19. Αντίστοιχα στον GW, με ανάθεση κόμβων στο $\{\pm 1\}$ θα ήταν $\{0:1, 1:-1, 2:1, 3:-1\}$.
- Δεδομένου ότι ο αλγόριθμος GW βρίσκει το 100% της τομής για αυτό τον Γράφο με την τιμή 4, ο αλγόριθμος QAOA πετυχαίνει *approximation ratio* $\alpha_{p=3} = 1.00$, δηλαδή για άλλη μια φορά βρίσκει την βέλτιστη τιμή της πραγματικής τομής.



- Για $p=4$, η τιμή της Objective συνάρτησης ξεκινάει από 2.60 και μέχρι το τέλος της επανάληψης διακυμαίνεται κοντά στο 3.95. Η τελική τιμή της Objective είναι **4.0**.
- Η νέα τιμή του πιο συχνού *bitstring* είναι 1001, η οποία βρίσκεται με συχνότητα 17. Αντίστοιχα στον GW, με ανάθεση κόμβων στο $\{\pm 1\}$ θα ήταν $\{0:1, 1:-1, 2:-1, 3:1\}$.
- Δεδομένου ότι ο αλγόριθμος GW βρίσκει το 100% της τομής για αυτό τον Γράφο με την τιμή 4, ο αλγόριθμος QAOA πετυχαίνει *approximation ratio* $\alpha_{p=4} = 1.00$, που για ακόμη μια φορά αντιστοιχεί στην βέλτιστη τιμή της πραγματικής τομής.



- Για $p=5$, η τιμή της Objective συνάρτησης ξεκινάει από το σχετικά χαμηλό 0.15 και μέχρι το τέλος της επανάληψης βιώνει έντονες διακυμάνσεις. Η τελική τιμή της Objective είναι **4.0**, όπως και στα επίπεδα $p=2,3,4$. Αυτό αποδεικνύει την ικανότητα που έχει QAOA να ανακάμπτει με επαρκή επίπεδα από μη αποδοτικές αρχικές καταστάσεις.
- Η νέα τιμή του πιο συχνού *bitstring* είναι 0011, η οποία βρίσκεται με συχνότητα 22. Αντίστοιχα στον GW, με ανάθεση κόμβων στο $\{\pm 1\}$ θα ήταν $\{0:-1, 1:-1, 2:1, 3:1\}$.
- Δεδομένου ότι ο αλγόριθμος GW βρίσκει το 100% της τομής για αυτό τον Γράφο με την τιμή 4, ο αλγόριθμος QAOA πετυχαίνει *approximation ratio* $\alpha_{p=5} = \mathbf{1.00}$, που αντιπροσωπεύει την βέλτιστη τιμή της πραγματικής τομής, όπως και στα προηγούμενα 3 επίπεδα.

Οι μεταβολές για τις *variational* παραμέτρους γ, β για κάθε επίπεδο αποτυπώνονται στους παρακάτω πίνακες ως εξής:

p_layers	gamma (γ)	beta (β)
1	-0.57399469	0.28101289

↓

p_layers	gamma (γ)	beta (β)
1	-0.84586533	-0.63992426
2	0.14815316	0.89979186

↓

p_layers	gamma (γ)	beta (β)
1	0.99522895	-1.40162745
2	-1.60458876	-0.25694132
3	0.25614636	0.55941763

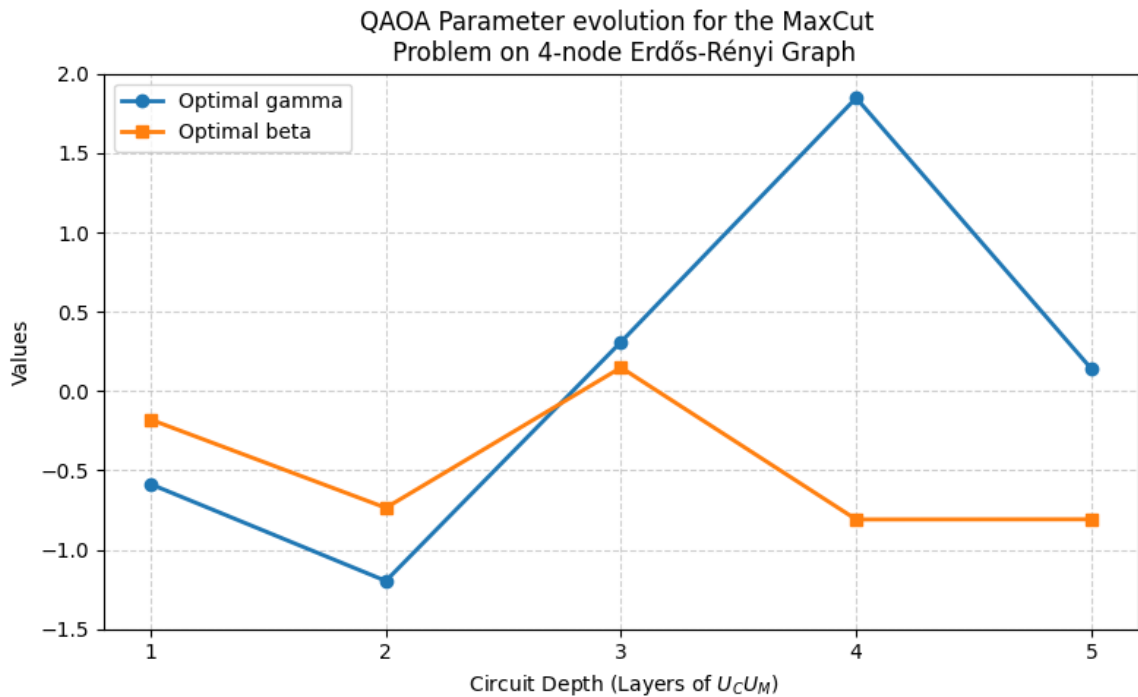
↓

p_layers	gamma (γ)	beta (β)
1	-0.53033764	0.45263139
2	-0.80201359	-1.38761158
3	0.57607423	-0.04627681
4	0.73396868	-0.08103053

↓

p_layers	gamma (γ)	beta (β)
1	-0.58690627	-0.17988391
2	-1.19663321	-0.73586504
3	0.30961425	0.14821994
4	1.84759294	-0.80929074
5	0.1406851	-0.8083926

Ο τελευταίος πίνακας αντιπροσωπεύει το τελικό σέτ των **βέλτιστων παραμέτρων γ και β** , ο οποίος έχει προκύψει στο τελευταίο επίπεδο του QAOA ($p=5$). Μια οπτική αναπαράσταση αυτού του πίνακα φαίνεται παρακάτω:



Εικόνα 14: Εξέλιξη των παραμέτρων του QAOA, καθώς το βάθος (τιμές p) του κβαντικού κυκλώματος αυξάνεται.

- Η μεταβλητή παράμετρος γ αντιπροσωπεύει την έμφαση που δίνεται στην **Cost Hamiltonian** του προβλήματος Max-Cut. Οι τιμές της βιώνουν διακύμανση αλλά γενικά το μέγεθος (magnitude) μειώνεται όσο αυξάνεται το βάθος του

κυκλώματος. Αυτό υποδεικνύει ότι τα βαθύτερα κυκλώματα απαιτούν λιγότερη έμφαση στην *Cost Hamiltonian* ανά επίπεδο p .

- Η μεταβλητή παράμετρος β αντιπροσωπεύει τη έμφαση που δίνεται στη **Mixer Hamiltonian** του προβλήματος. Οι τιμές της αυξομειώνονται αλλά παραμένουν σχετικά σταθερές, υποδεικνύοντας έναν σταθερό ρόλο της *Mixer Hamiltonian* σε όλα τα επίπεδα.
- Σε γενικές γραμμές, οι παράμετροι δεν ακολουθούν μια απλή διαδρομή, γεγονός που σημαίνει ότι ο QAOA για μικρά γραφήματα απαιτεί περισσότερο fine-tuning σε κάθε επίπεδο του κυκλώματος.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Σύγκριση QAOA – GW

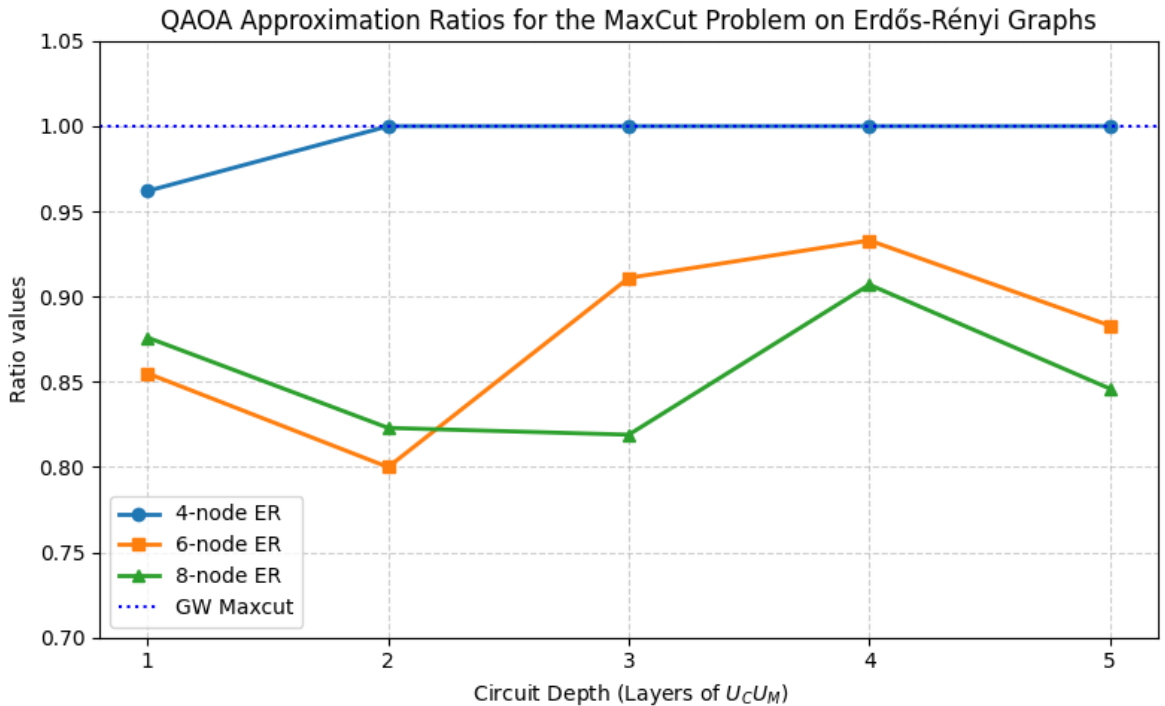
Η καταγραφή της απόδοσης του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut γίνεται με την χρήση της μετρικής που ονομάζεται **Λόγος Απόδοσης** ή **Approximation Ratio (AR)**. Αυτός ο τύπος προσφέρει μια λύση στην σύγκριση των «κβαντικών» αποτελεσμάτων με τα κλασικά αποτελέσματα που προήλθαν από τον αλγόριθμο Goemans-Williamson. Η σχέση με την οποία υπολογίζονται αυτοί οι λόγοι απόδοσης είναι μια παραλλαγή του κανονικού τύπου και ορίζεται ως:

$$\alpha_{QAOA} = \frac{\langle C \rangle_p}{C_{GW}}$$

Όπου $\langle C \rangle_p$ είναι η αναμενόμενη τιμή της τομής του QAOA για κάθε επίπεδο p , και ο όρος C_{GW} αφορά την βέλτιστη τιμή που πετυχαίνει ο κλασικός αλγόριθμος GW. Λόγω της απλής δομής των 3 περιπτώσεων γραφημάτων ο Goemans-Williamson καταφέρνει να βρει ακριβώς την βέλτιστη τιμή για κάθε μια από αυτές, έχοντας σαν αποτέλεσμα ο λόγος απόδοσης του εδώ να είναι στο 100%. Παρόλα αυτά, τα αποτελέσματα του χρησιμοποιούνται σαν μέτρο σύγκρισης και ουσιαστικά ενώνονται με το Θεωρητικό λόγο προσέγγισης που είναι 87.8% (0.878) της βέλτιστης τιμής.

Έτσι, λαμβάνοντας υπόψιν ότι πλέον το Θεωρητικό κομμάτι και ο Λόγος Ακρίβειας αποτελούν το ίδιο πράγμα, θα γίνει η ανάλυση των λόγων επίδοσης του QAOA για κάθε μια από τις τρεις περιπτώσεις των γραφημάτων.

4.1 Λόγος Επίδοσης για Γράφους Erdős–Rényi



Στην πρώτη περίπτωση εφαρμογής, ο QAOA επίλυσε το Max-Cut για 3 απλές εκδοχές γραφημάτων τύπου *Erdős-Rényi* παρουσιάζοντας καλά αποτελέσματα όσον αφορά την σύγκριση κλασικών και κβαντικών αλγορίθμων για απλά προβλήματα. Πιο αναλυτικά:

- Στο $p=1$, ο λόγος επίδοσης και των τριών εκδοχών γραφημάτων λαμβάνει σχετικά χαμηλές τιμές (συγκριτικά με τα κλασικά αποτελέσματα) μεταξύ **0.85-0.95**, δηλαδή στο 85-95% της **βέλτιστης τιμής**.
- Στο $p=2$, παρουσιάζεται η πρώτη διαφορά στο AR, καθώς στο απλό μοντέλο των 4 κόμβων η τιμή του φτάνει την βέλτιστη (100%) ισοφαρίζοντας τον λόγο απόδοσης του κλασικού αλγορίθμου Goemans-Williamson. Αντίθετα οι εκδοχές των 6 και 8 κόμβων βιώνουν μια μείωση, προσεγγίζοντας το 82% της βέλτιστης τιμής.
- Στο $3 \leq p \leq 5$, η απλούστερη εκδοχή παραμένει σταθερά στην βέλτιστη τιμή, ενώ για τις υπόλοιπες 2 η τιμή του λόγου επίδοσης παρουσιάζει μια διακύμανση, προδίδοντας τον κορεσμό και τους περιορισμούς του QAOA.

Η παραπάνω συμπεριφορά φαίνεται να συμφωνεί με τα θεωρητικά ευρήματα καθώς:

- Για μεγάλες τιμές του p ($p \rightarrow \infty$), ο QAOA προσεγγίζει την ακριβή λύση, υποδεικνύοντας παράλληλα πως τα βαθύτερα κυκλώματα οδηγούν σε πιο βελτιωμένα αποτελέσματα (υπό συνθήκες) [18].
- Παρόλο που τα γραφήματα αυτού του τύπου απαρτίζονται από ποικιλία στην συνδεσιμότητα τους, ο QAOA καταφέρνει να λύσει ως ένα βαθμό το πρόβλημα.
- Όσο αυξάνεται η τιμή του βάθους p σε ένα κβαντικό κύκλωμα, τα φαινόμενα του θορύβου είναι πιο αισθητά επηρεάζοντας σε σημαντικό βαθμό την απόδοση του κβαντικού αλγορίθμου.

Παρακάτω φαίνονται οι αναλυτικοί πίνακες για κάθε εκδοχή το Γραφήματος Erdos-Renyi:

1. $n = 4$, GW Best Cut value: 4 (100%)

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	3.85	0.962 (96.2%)
2	4.00	1.000 (100%)
3	4.00	1.000 (100%)
4	4.00	1.000 (100%)
5	4.00	1.000 (100%)

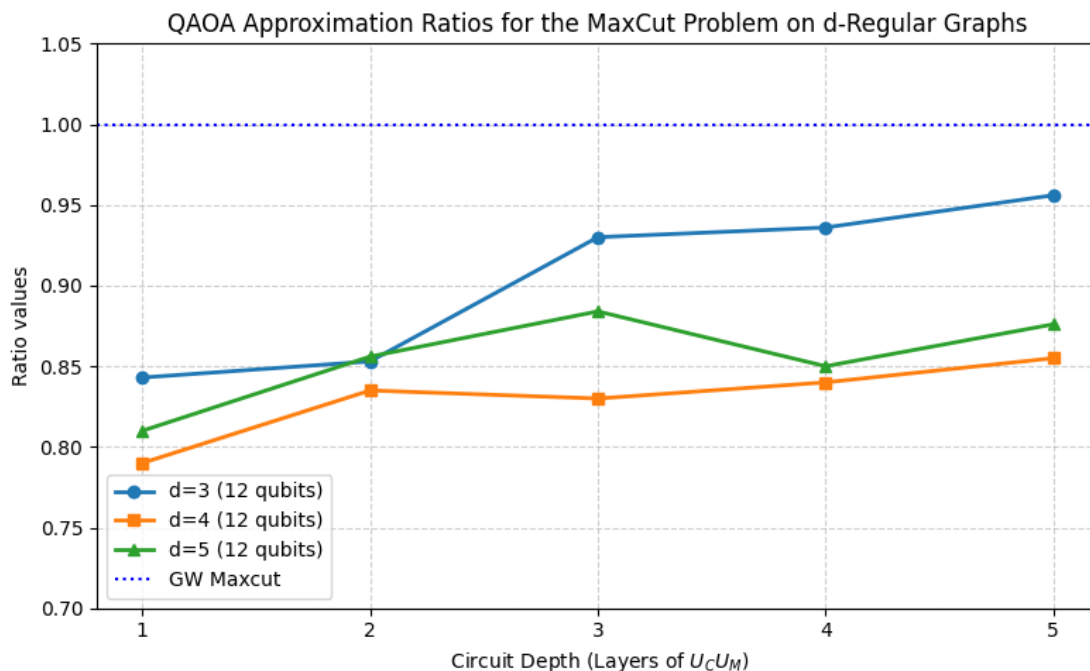
2. $n=6$, GW Best Cut value = 9 (100%)

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	7.70	0.855 (85.5%)
2	7.20	0.800 (80%)
3	8.20	0.911 (91.1%)
4	8.40	0.933 (93.3%)
5	7.95	0.883 (88.3%)

3. $n=8$, GW Best Cut value= 13 (100%)

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	11.40	0.876 (87.6%)
2	10.70	0.823 (82.3%)
3	10.65	0.819 (81.9%)
4	11.80	0.907 (90.7%)
5	11.00	0.846 (84.6%)

4.2 Λόγος Επίδοσης για Γράφους Random d-Regular



Η δεύτερη περίπτωση εφαρμογής του QAOA στην επίλυση του Max-Cut, είναι πάνω σε μοντέλα γραφημάτων τύπου **Random d-Regular**, για διαφορετικές τιμές του d (βαθμός κάθε κόμβου) και σταθερό αριθμό qubits (κόμβων).

- Στο $p=1$, και οι τρεις εκδοχές του γραφήματος παρουσιάζουν σχετικά χαμηλές τιμές στον λόγο απόδοσης, με τον QAOA να πετυχαίνει ακρίβειες κοντά στο 80-85% της βέλτιστης τιμής του GW, που και εδώ είναι στο 100%.
- Στο $p=2$, η αλλαγή στον βαθμό θεωρείται αμελητέα καθώς οι λόγοι επίδοσης του QAOA και για τις τρεις εκδοχές συγκλίνουν στο 85% του βέλτιστου αποτελέσματος, δείχνοντας μια μικρή αύξηση σε σχέση με το προηγούμενο επίπεδο.
- Στο $3 \leq p \leq 5$, η επίδοση του QAOA γίνεται πλέον εμφανής, διότι μόνο η εκδοχή του **3-Regular** Γράφου πλησιάζει πραγματικά την βέλτιστη λύση του κλασικού αλγορίθμου GW. Οι υπόλοιπες δύο περιπτώσεις πετυχαίνουν μόνο να φτάσουν σε ένα λόγο απόδοσης κοντά στο 86%.

Οι παραπάνω μετρήσεις επιβεβαιώνουν ότι:

- Ο αλγόριθμος Goemans-Williamson είναι εμφανώς ανώτερος σε αυτή την περίπτωση Τυχαίων γραφημάτων, **υπερτερόντας** του QAOA για όλες τις τιμές του p και ανεξαρτήτως του βαθμού d .
- Στην περίπτωση που $p \gg 5$ και οι λόγοι απόδοσης του QAOA προσέγγιζαν αυτόν του GW, θα υπήρχε το ενδεχόμενο εμφάνισης του **κβαντικού πλεονεκτήματος** των μεταβλητών κβαντικών αλγορίθμων έναντι των κλασικών.

Αντίστοιχα για τον τύπο γραφημάτων d-Regular ισχύουν οι παρακάτω πίνακες υπολογισμού του λόγου ακρίβειας για κάθε διαφορετική τιμή του d:

1. Nodes =12, **d=3**, GW Best Cut value = **15 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	12.65	0.843 (84.3%)
2	12.80	0.853 (85.3%)
3	13.95	0.930 (93%)
4	14.05	0.936 (93.6%)
5	14.35	0.956 (95.6%)

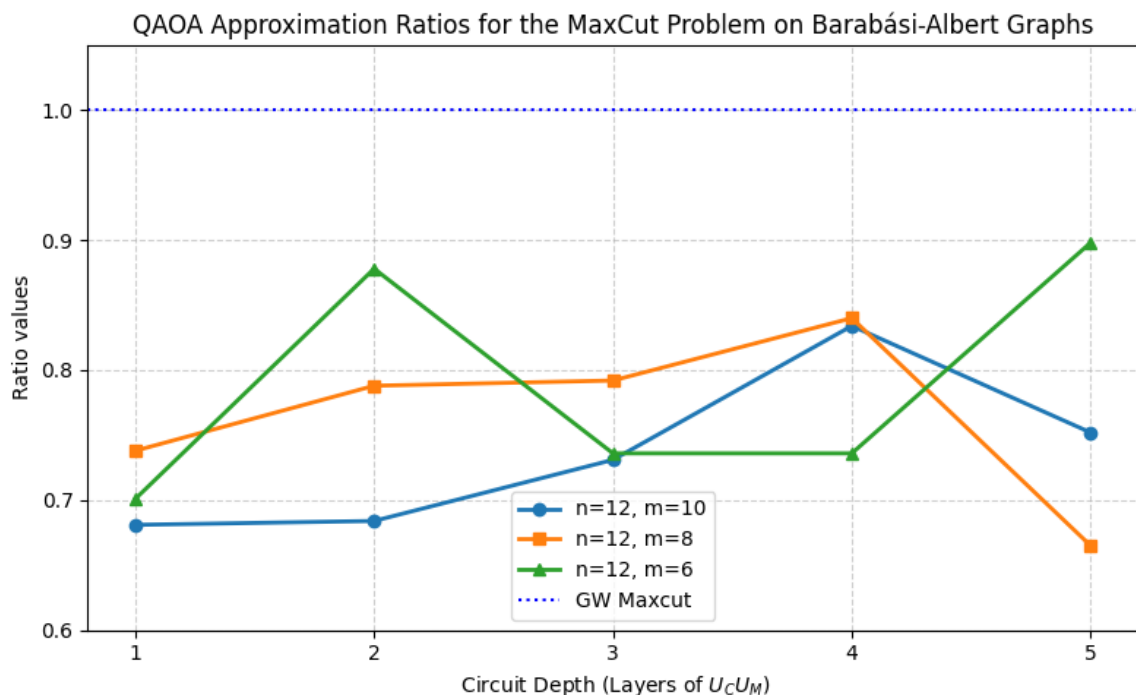
2. Nodes = 12, **d=4**, GW Best Cut value = **20 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	15.80	0.790 (79%)
2	16.70	0.835 (83.5%)
3	16.60	0.830 (83%)
4	16.80	0.840 (84%)
5	17.10	0.855 (85.5%)

3. Nodes=12, **d=5**, GW Best Cut value = **23 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	18.65	0.810 (81%)
2	19.70	0.856 (85.6%)
3	20.35	0.884 (88.4%)
4	19.55	0.850 (85%)
5	20.15	0.876 (87.6%)

4.3 Λόγος Επίδοσης για Γράφους Barabási–Albert



Η τρίτη και τελευταία περίπτωση εφαρμογής του QAOA αφορά το μοντέλο γραφήματος *Barabási–Albert*. Ο υπολογισμός των λόγων απόδοσης πραγματοποιείται για τρεις εκδοχές του Γράφου, τις οποίες διαφοροποιεί το preferential attachment m , ενώ ταυτόχρονα ο αριθμός των κόμβων παραμένει σταθερός με $n=12$.

- Για $p=1$, οι λόγοι απόδοσης του QAOA λαμβάνουν εξαιρετικά χαμηλές τιμές κοντά στο 60-70% της βέλτιστης τιμής (100%), υποδεικνύοντας την κακή απόδοση του αλγορίθμου ακόμη και στο μικρότερο αριθμό επιπέδων.
- Για $p=2$, ο λόγος απόδοσης για $m=6$ αυξάνεται έντονα προσεγγίζοντας το 90% της βέλτιστης τιμής του GW, ενώ για $m=8$ και $m=10$ ο λόγος αυτός παραμένει κάτω από το 80%.
- Για $3 \leq p \leq 5$, οι τιμές των λόγων απόδοσης και για τις τρεις εκδοχές του γραφήματος Barabasi-Albert, ύστερα από κάποιες διακυμάνσεις, οριστικοποιούνται κάτω από το όριο του αλγορίθμου Goemans-Williamson. Με αυτό τον τρόπο υποδηλώνεται η μη ύπαρξη κβαντικού πλεονεκτήματος του QAOA για μικρές τιμές του p .

Τα συμπεράσματα που απορρέουν από εδώ είναι πως:

- Ο αλγόριθμος Goemans-Williamson, δηλαδή η κλασική προσέγγιση στην επίλυση του προβλήματος Max-Cut, φαίνεται να υπερνικά ξανά τον κβαντικό του αντίπαλο και αυτό να συμβαίνει για κάθε τιμή του m και σε όλα τα επίπεδα p του κβαντικού κυκλώματος.

- Η αυξανόμενη τιμή του preferential attachment m προσδίδει μεγαλύτερη **πυκνότητα** σε κάθε εκδοχή και επομένως προσθέτει μεγαλύτερο **βαθμό πολυπλοκότητας** στο κβαντικό κύκλωμα του QAOA. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την δημιουργία ασυμφωνίας μεταξύ των επιπέδων του κυκλώματος και συνεπώς την αδυναμία σωστών υπολογισμών.

1. Nodes = 12, $m = 10$, GW Best Cut value = **19 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	12.95	0.681 (68.1%)
2	13.00	0.684 (68.4%)
3	13.90	0.731 (73.1%)
4	15.85	0.834 (83.4%)
5	14.30	0.752 (75.2%)

2. Nodes = 12, $m = 8$, GW Best Cut value = **26 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	19.20	0.738 (73.8%)
2	20.50	0.788 (78.8%)
3	20.60	0.792 (79.2%)
4	21.85	0.840 (84%)
5	17.30	0.665 (66.5%)

3. Nodes = 12, $m = 6$, GW Best Cut value = **26 (100%)**

<i>QAOA Circuit depth (p)</i>	$\langle C \rangle_p$	α_{QAOA}
1	18.25	0.701 (70.1%)
2	22.85	0.878 (87.8%)
3	19.15	0.736 (73.6%)
4	19.15	0.736 (73.6%)
5	23.35	0.898 (89.8%)

4.4 Το πρόβλημα των Εξαφανιζόμενων Κλίσεων

Μια από τις πιο γνωστές προκλήσεις που εμφανίζονται στην εκπαίδευση παραμετροποιημένων κβαντικών κυκλωμάτων αφορά τον υπολογισμό της Συνάρτησης κόστους. Σε πολλές περιπτώσεις, το τοπίο (landscape) αυτής της συνάρτησης παρουσιάζεται να είναι *επίπεδο*, με αυτό να σημαίνει πως η κλίση (gradient) που αφορά τις παραμέτρους εξαφανίζεται με εκθετικό βαθμό. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται *Barren Plateau* (Άγονο Πεδίο), προκύπτει αρκετά συχνά στην εκπαίδευση των κβαντικών κυκλωμάτων όσο αυξάνεται το βάθος τους αλλά και ο αριθμός των qubits, ενώ παράλληλα δημιουργεί προβλήματα στην διαδικασία της βελτιστοποίησης.

Λοθείσας μιας συνάρτησης κόστους $C(\theta)$, το φαινόμενο αυτό θα ισχύει αν για όλες τις παραμέτρους $\theta_i \in \theta$, η διακύμανση (variance) της μερικής παραγώγου της $C(\theta)$ εξαφανίζεται εκθετικά με τον αριθμό n των qubits:

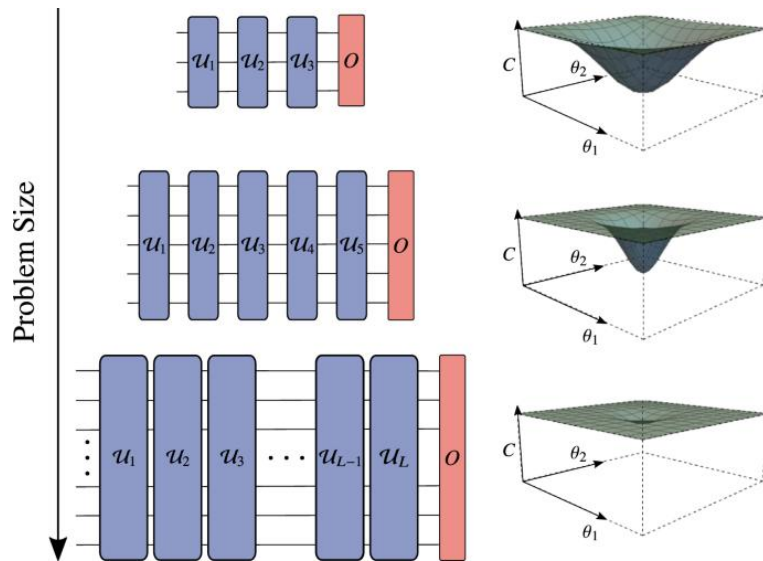
$$Var_{\theta}[\partial_i C(\theta)] \leq O(b^{-n})$$

Όπου $b > 1$ μια σταθερά. Ο παραπάνω τύπος υποδηλώνει πως η κλίση της $C(\theta)$ θα είναι κατά μέσο όρο σχετικά μικρή ή θα προσεγγίζει το 0.

Αυτό συμβαίνει λόγω της ανισότητας Chebyshev που ορίζει πως, η πιθανότητα που έχει η μερική παράγωγος $\partial_i C(\theta)$ να αποκλίνει από τον μέσο όρο της κατά μια τιμή μεγαλύτερη από μια σταθερά $c > 0$ περιορίζεται από το $Var_{\theta}[\partial_i C(\theta)]$:

$$Pr[|\partial_i C(\theta)| \geq c] \leq \frac{1}{c^2} Var_{\theta}[\partial_i C(\theta)]$$

Το φαινόμενο barren plateau εμφανίζεται σε μεγαλύτερο βαθμό στα κβαντικά κυκλώματα που είναι μη δομημένα, έχουν υψηλό βαθμό εκφραστικότητας (η ικανότητα να προσεγγίζουν αποτελεσματικά οποιαδήποτε κβαντική κατάσταση με υψηλή ακρίβεια) και ουσιαστικά εξερευνούν περιοχές του χώρου Hilbert όπου οι κλίσεις εξαλείφονται [17]. Επιπλέον, σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση του παίζει και η κβαντική διεμπλοκή, η οποία δημιουργείται μεταξύ των κβαντικών σε κβαντικά κυκλώματα μεγάλου βάθους (πολλών επιπέδων), έχοντας σαν αποτέλεσμα κλίσεις που προσεγγίζουν το 0.



4.5 Συμπεράσματα

Σε γενικότερα πλαίσια, η απόδοση του **QAOA** για το πρόβλημα Max-Cut παρουσιάζεται περισσότερο υποσχόμενη για τους τύπους γραφημάτων **Erdos-Renyi** και **d-Regular Random**.

Αναλυτικότερα, στην περίπτωση των ER γραφημάτων, ο λόγος ακρίβειας του QAOA *ισοφαρίζει* και πλησιάζει αρκετά τα αποτελέσματα του κλασικού αλγορίθμου Goemans-Williamson, ενώ για τους Regular Γράφους οι τιμές αυτές ακολουθούν μια ανοδική πορεία, φτάνοντας και μέχρι το **95%** (απόκλιση **5%**) της βέλτιστης τιμής του GW.

Από την άλλη, ο QAOA δείχνει να δυσκολεύεται σε μεγάλο βαθμό με την περίπτωση των γραφημάτων **Barabasi-Albert**, με τον καλύτερο λόγο απόδοσης του να έχει απόκλιση σχεδόν **10%** από την καλύτερη τιμή του GW.

Οι παραπάνω αναλύσεις υποδηλώνουν την τάση του QAOA να αποδίδει καλύτερα σε συγκεκριμένες τοπολογίες τυχαίων γραφημάτων, τονίζοντας παράλληλα και την ανάγκη για εύρεση πιο βελτιωμένων τεχνικών κβαντικής βελτιστοποίησης, μετριάσμου σφαλμάτων και κατασκευής κβαντικών κυκλωμάτων.

Τα τελικά αποτελέσματα ευθυγραμμίζονται και με τις θεωρητικές μελέτες για την λειτουργικότητα και χρησιμότητα των Μεταβλητών Κβαντικών Αλγορίθμων στα προβλήματα Συνδυαστικής Βελτιστοποίησης, και αποτελούν σημάδι πως η συγκεκριμένη κατηγορία αλγορίθμων θα βοηθήσει τους Κβαντικούς Υπολογιστές να φτάσουν πιο κοντά στο λεγόμενο *Κβαντικό Πλεονέκτημα* [19], [20], [21].

Παράρτημα

A. Επιπρόσθετοι Πίνακες και Εικόνες

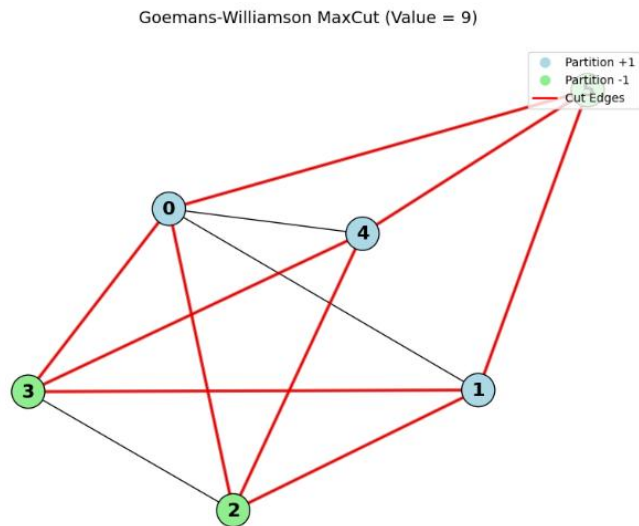
Σε αυτό το τμήμα θα παρατεθούν οι πίνακες και εικόνες γραφημάτων για τις υπόλοιπες περιπτώσεις των γραφών που εξετάστηκαν από τον QAOA, καθώς η μέθοδος που ακολουθήθηκε για την παραγωγή ήταν ακριβώς η ίδια με αυτή των υποκεφαλαίων 3.2 και 3.3.

A.1 Erdos-Renyi graph

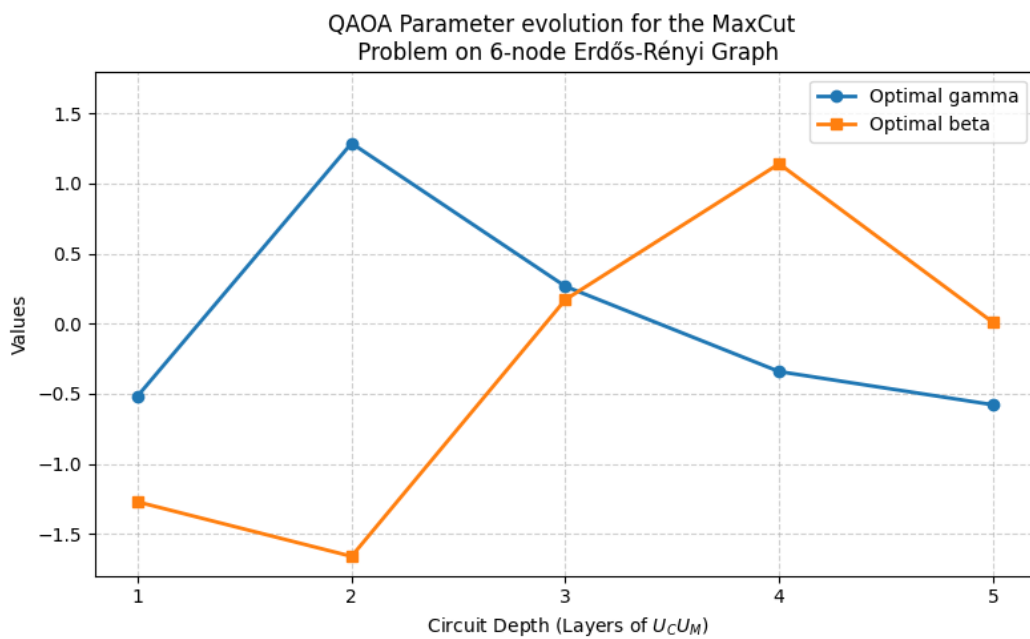
1. Nodes = 6, $p = 0.6$



Εικόνα 15: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 6-node Erdos-Renyi graph.



Εικόνα 16: Η μέγιστη τομή για τον 6-node ER, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



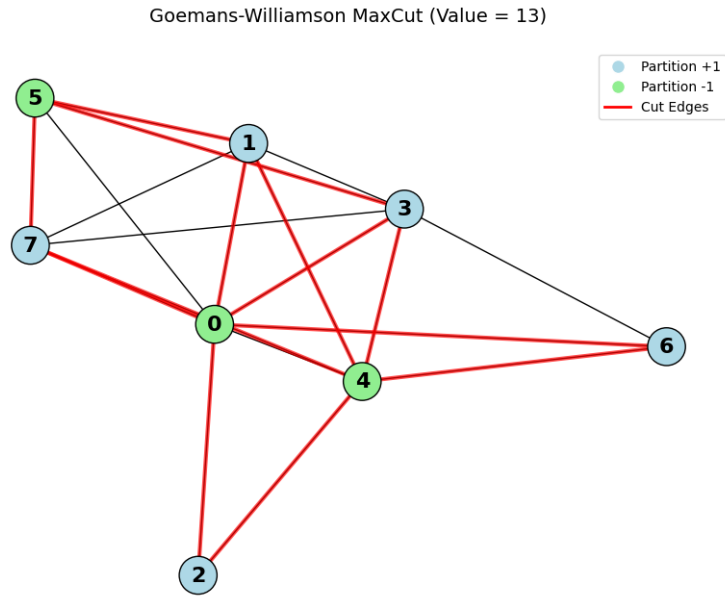
Εικόνα 17: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β .

Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-0.51574112	-1.27275932
2	1.28789617	-1.66143574
3	0.26636174	0.17105735
4	-0.34219302	1.14123455
5	-0.57913684	0.00924029

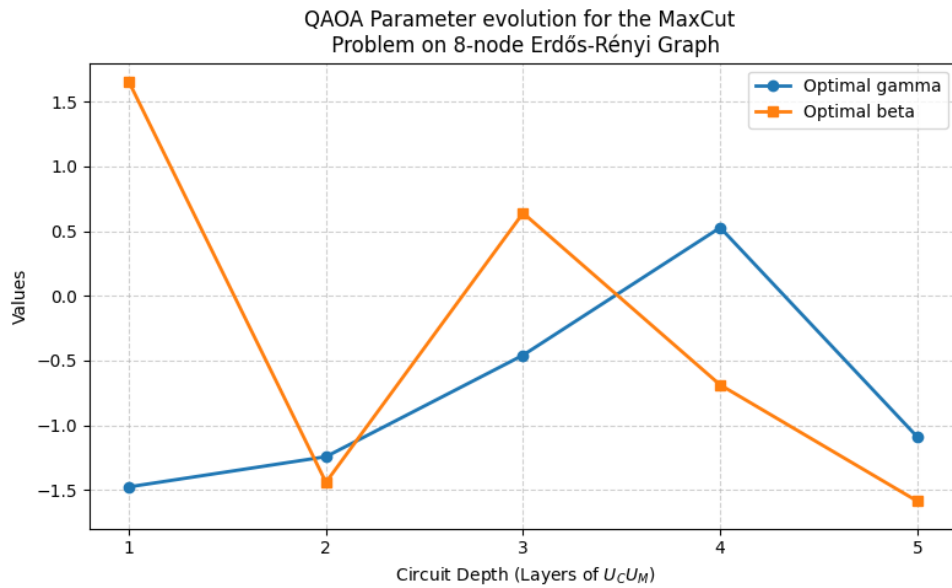
2. Nodes = 8, p=0.6



Εικόνα 18: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 8-node Erdos-Renyi graph.

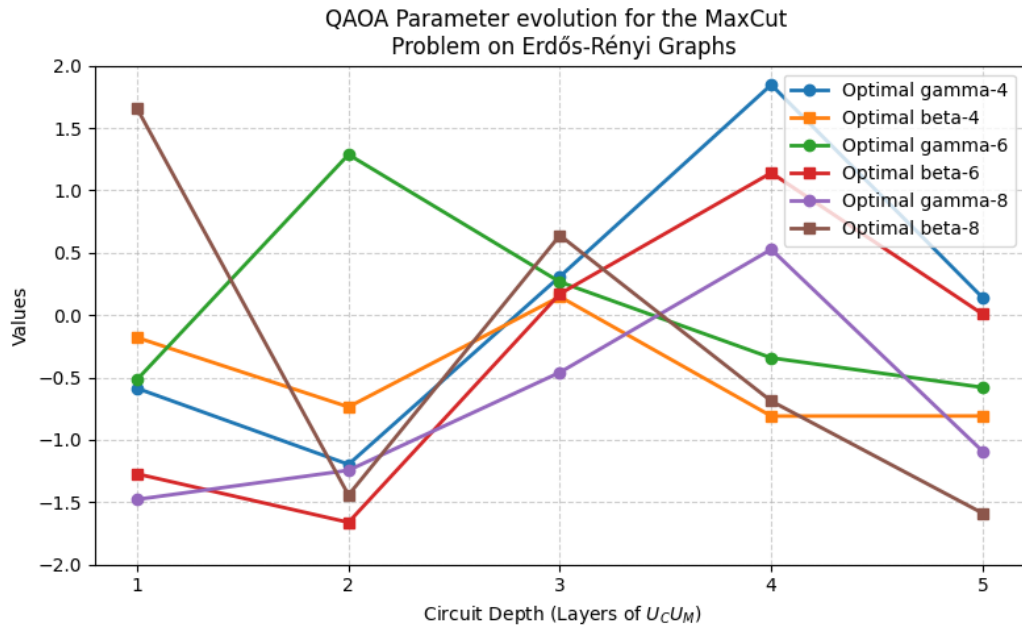


Εικόνα 19: Η μέγιστη τομή για τον 8-node ER, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



Εικόνα 20: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου ER των 8 κόμβων.

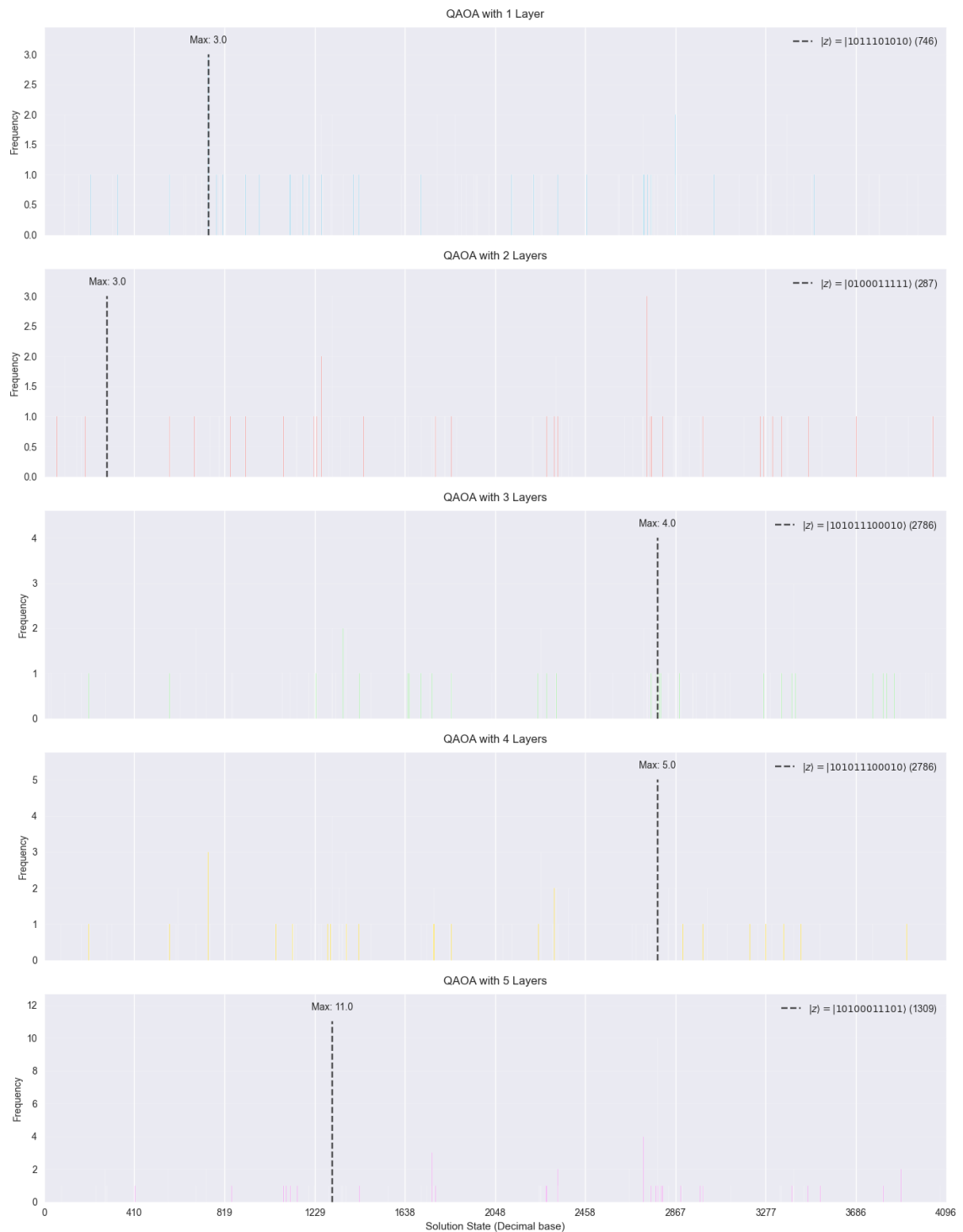
Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-1.47733792	1.65582459
2	-1.24396054	-1.44229618
3	-0.45894349	0.63992318
4	0.52755132	-0.68875281
5	-1.09109449	-1.58762846



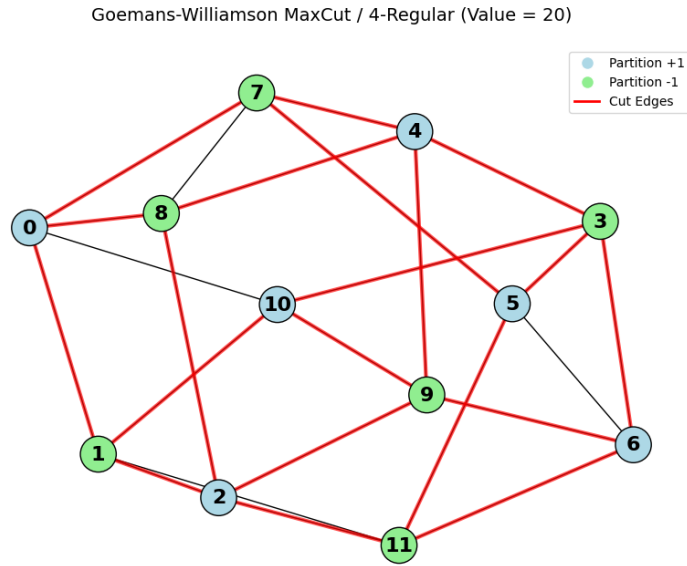
Εικόνα 21: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ και β για όλες τις περιπτώσεις των γραφημάτων Erdos-Rényi.

A.2 Random d-Regular graph

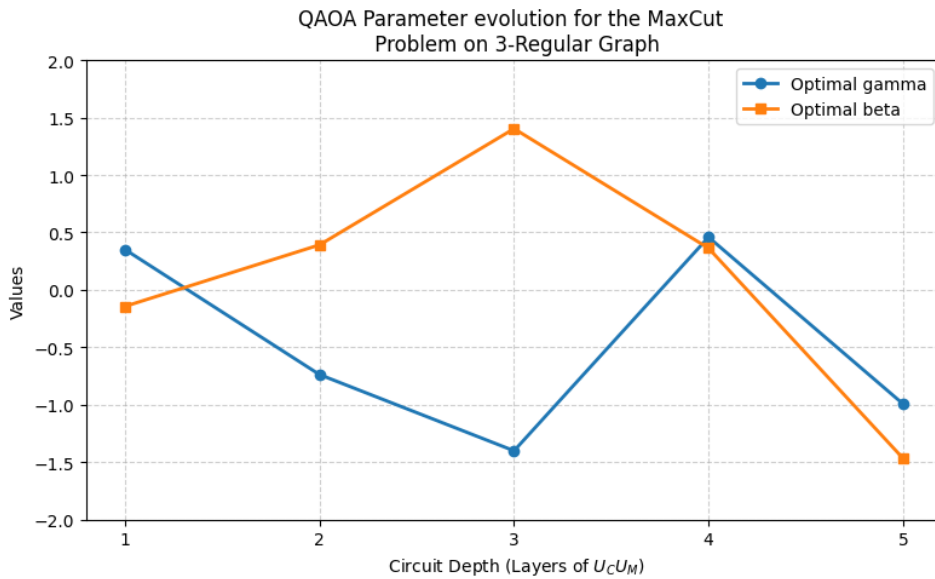
1. Nodes = 12, d = 3



Εικόνα 22: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 3-Regular graph.



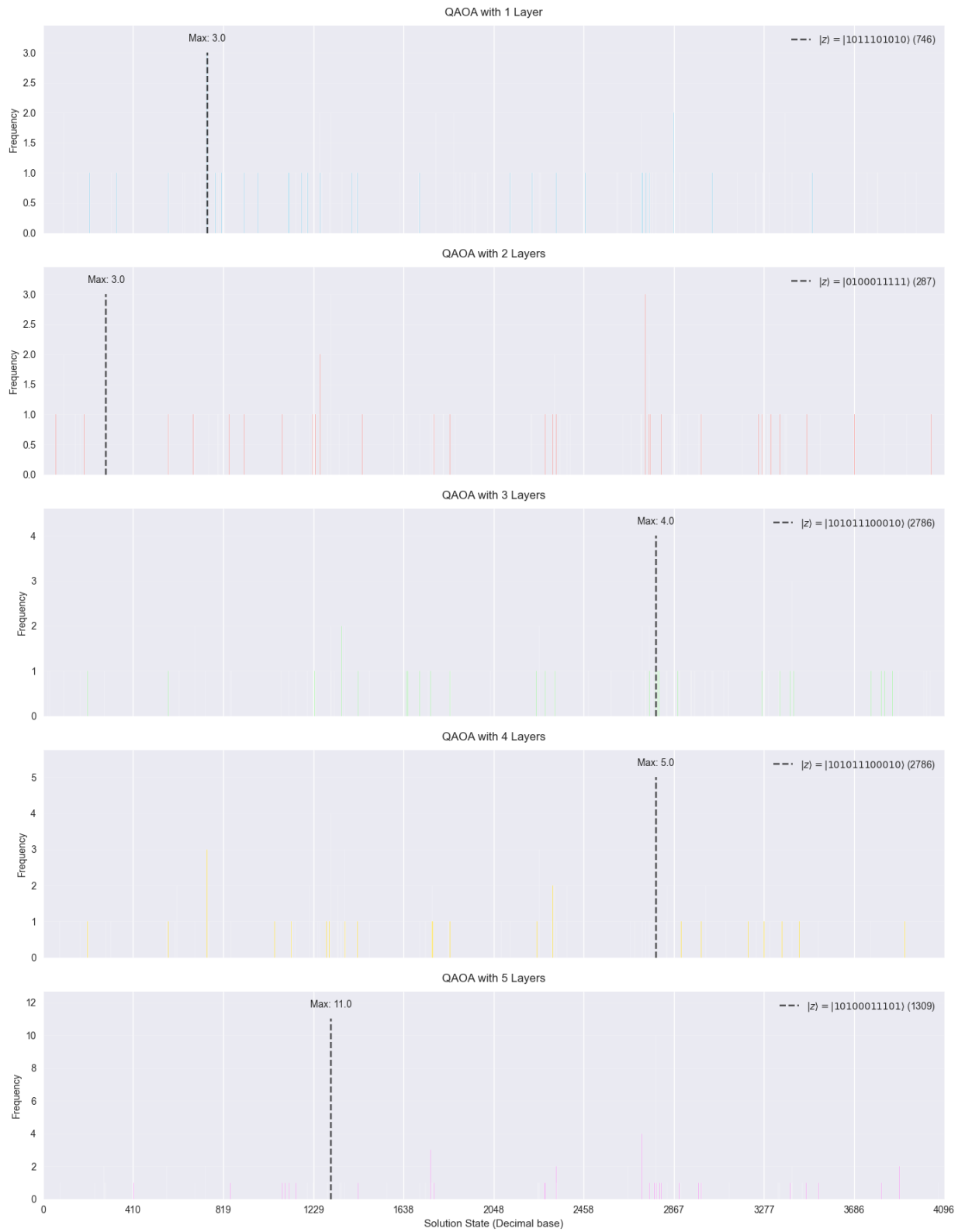
Εικόνα 23: Η μέγιστη τομή για τον 3-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



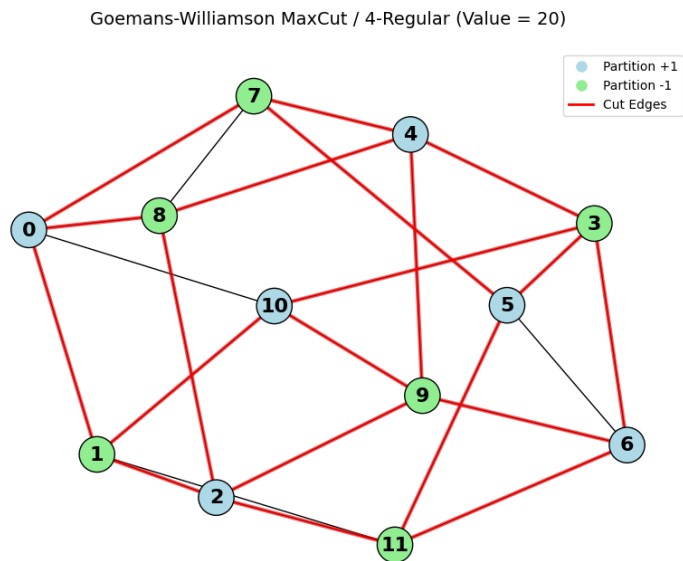
Εικόνα 24: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 3-Regular.

Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	0.35087082	-0.14329197
2	-0.73768724	0.39201033
3	-1.40064323	1.40339688
4	0.45906769	0.36309289
5	-0.992259	-1.46606377

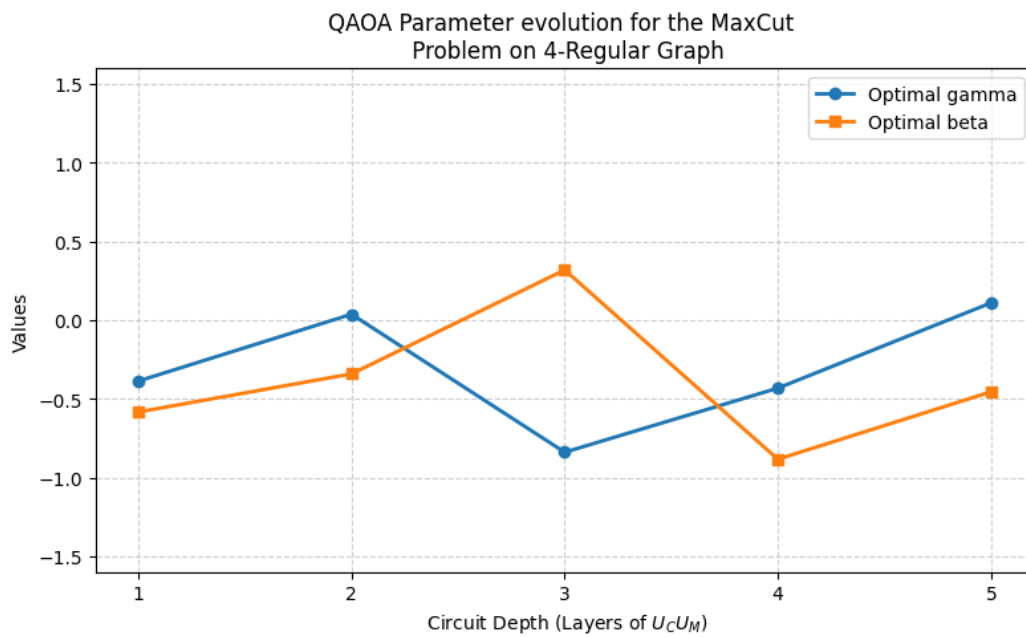
2. Nodes = 12, d=4



Εικόνα 25: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 4-Regular graph.



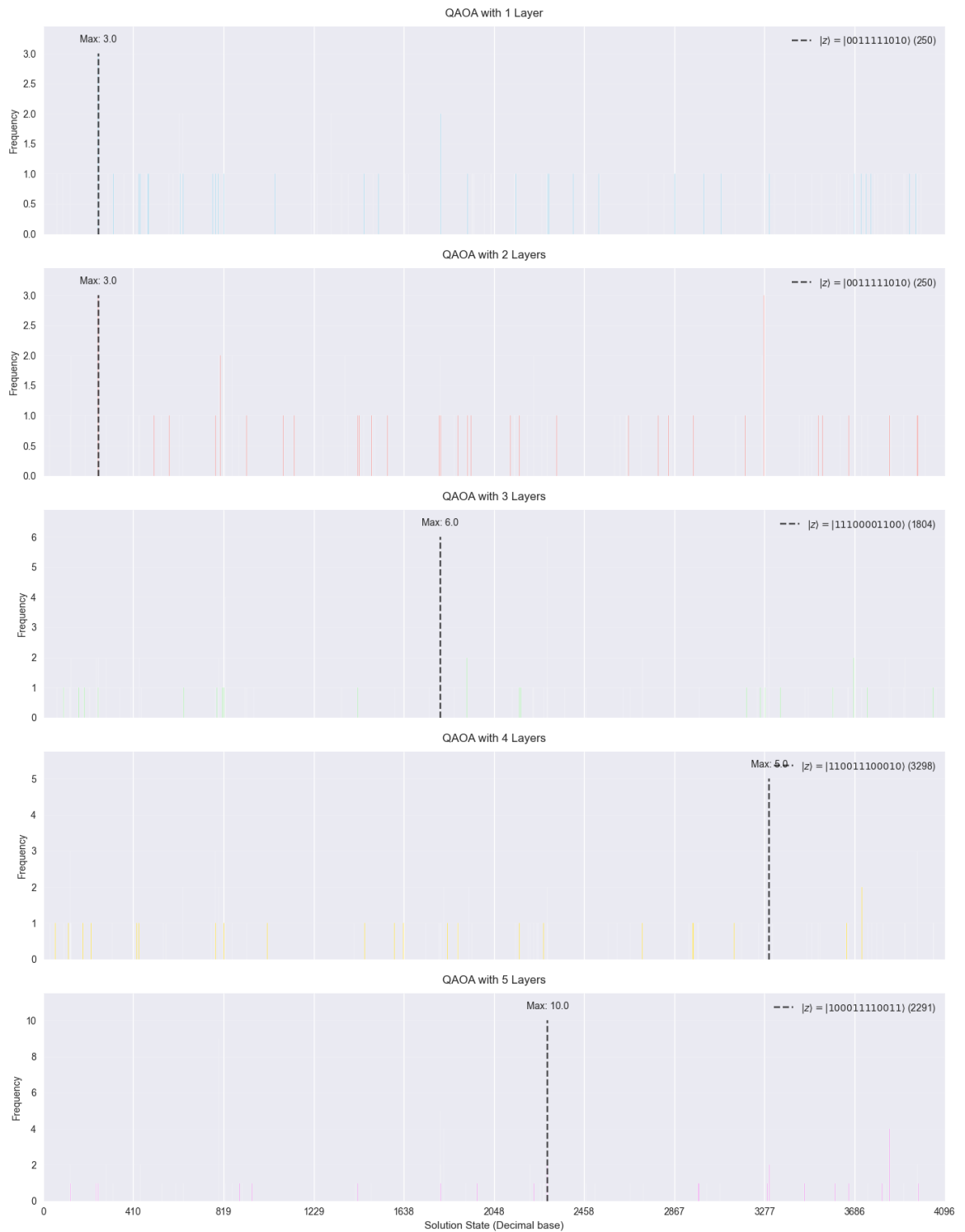
Εικόνα 26: Η μέγιστη τομή για τον 4-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



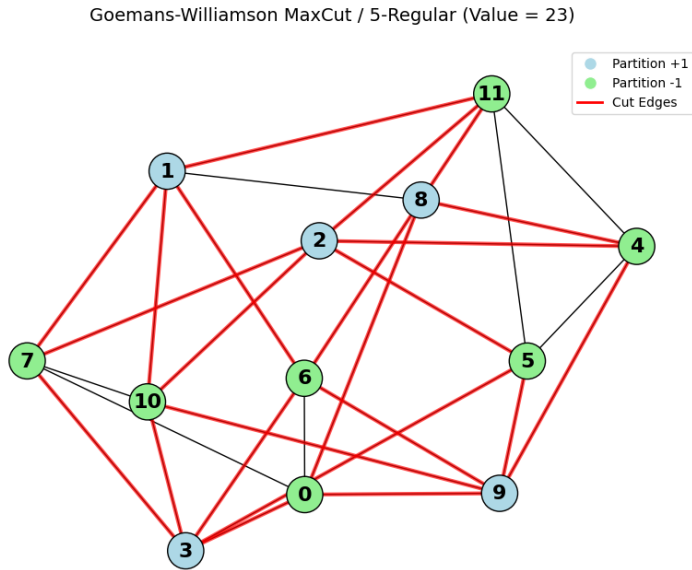
Εικόνα 27: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 4-Regular.

Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-0.38744962	-0.58375529
2	0.03703715	-0.34169056
3	-0.83932602	0.31861207
4	-0.43217376	-0.88401321
5	0.10954108	-0.45542584

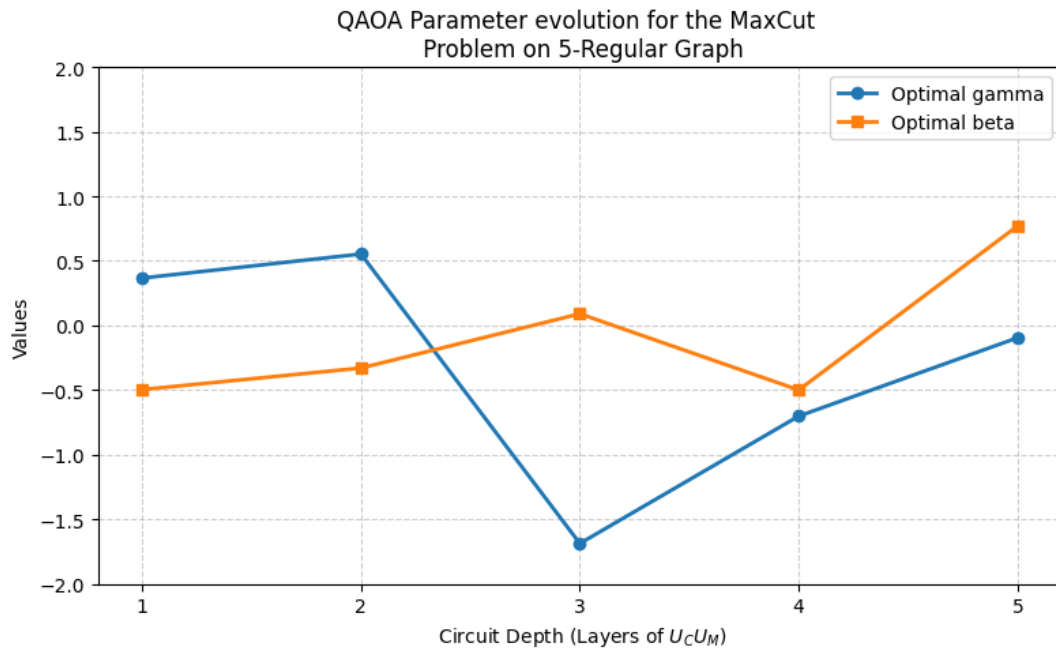
3. Nodes = 12, d = 5



Εικόνα 28: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον 5-Regular graph.

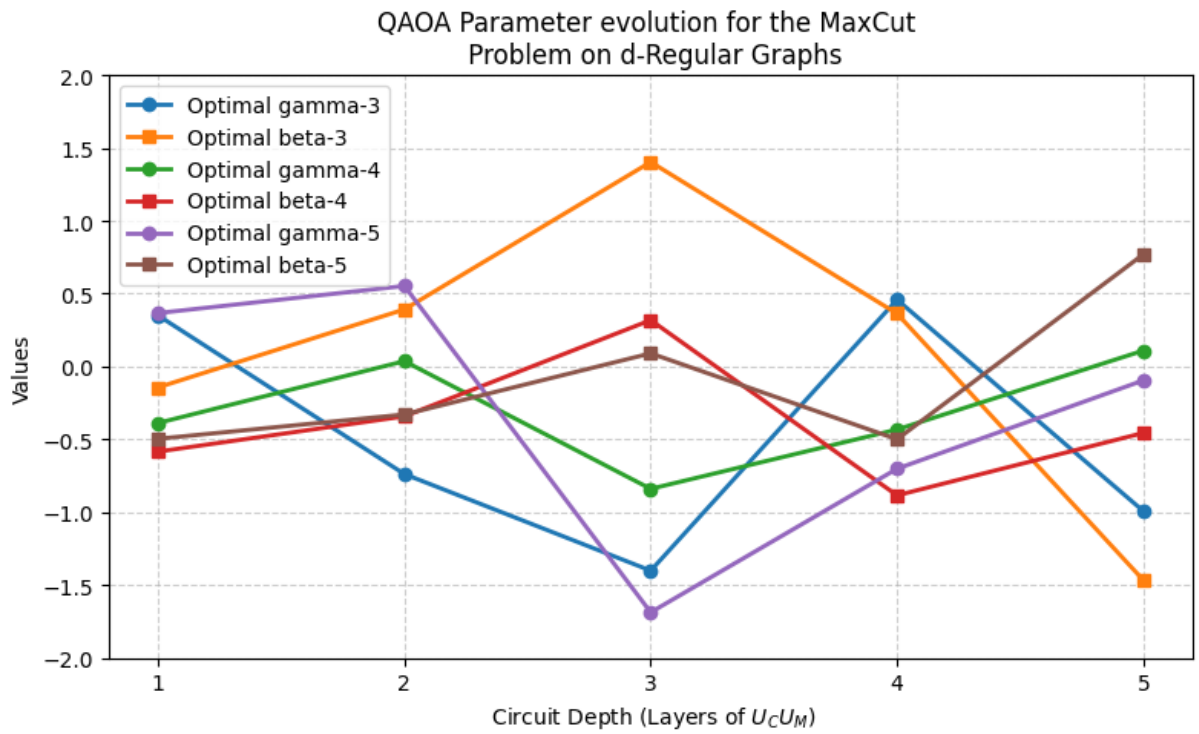


Εικόνα 29: Η μέγιστη τομή για τον 5-Regular graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



Εικόνα 30: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου 5-Regular.

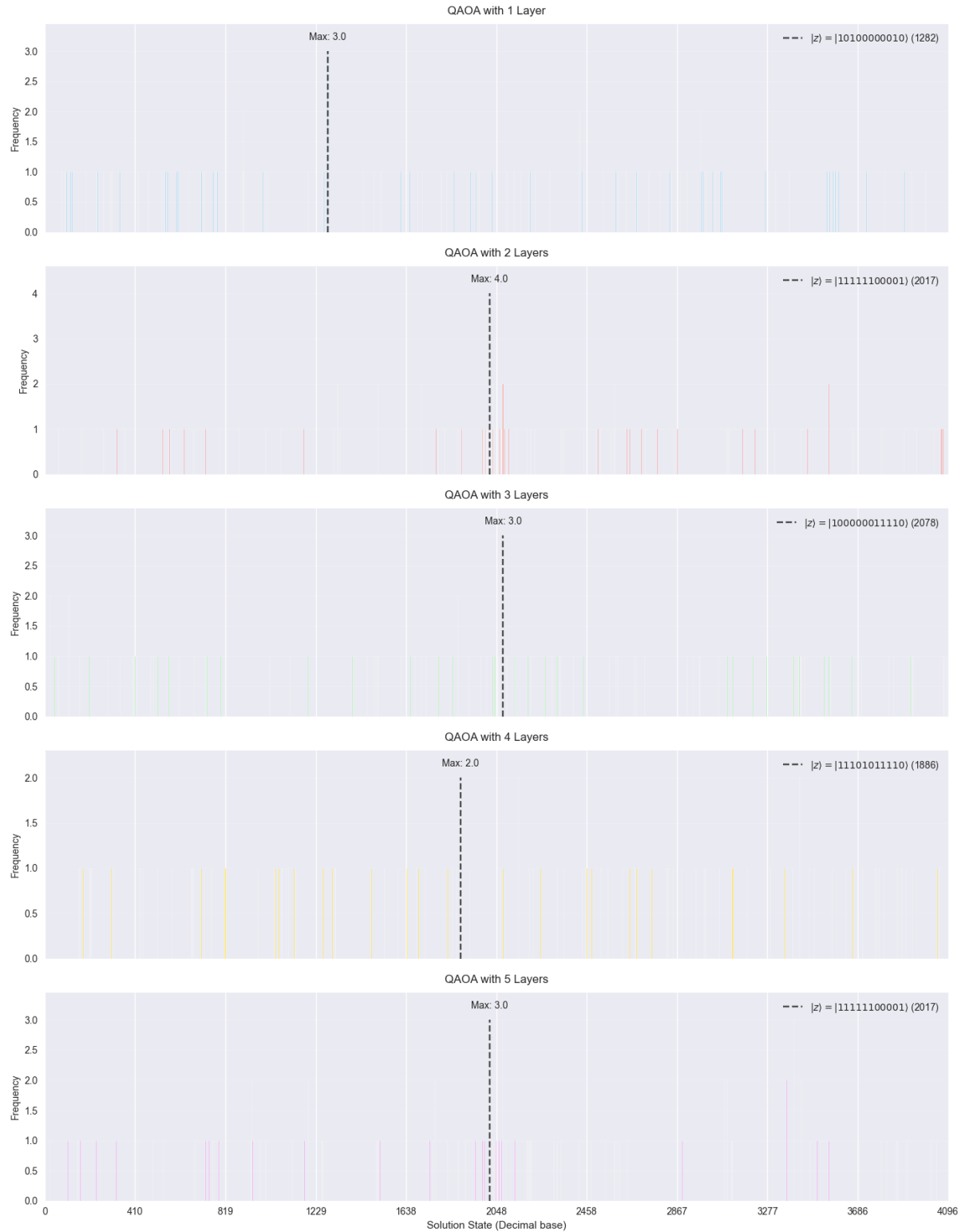
Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	0.36689535	-0.4959598
2	0.55305691	-0.32907549
3	-1.68668356	0.09056273
4	-0.70125856	-0.49917916
5	-0.09498078	0.7701055



Εικόνα 31: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ κα β για όλες τις περιπτώσεις του d των γραφημάτων Regular.

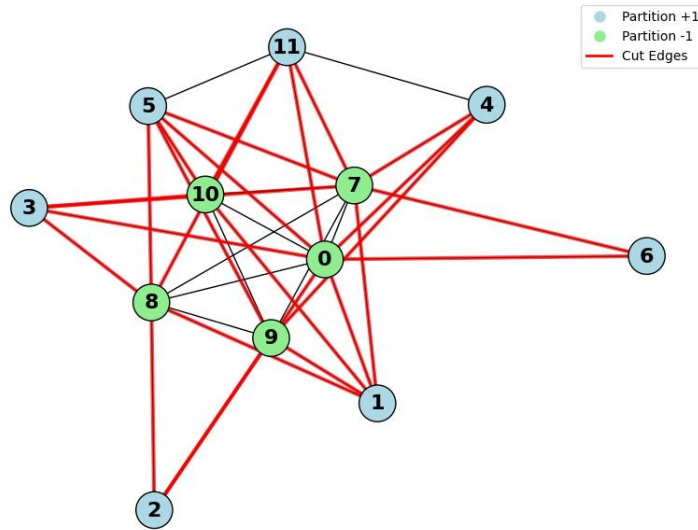
A.3 Barabasi-Albert graph

1. nodes = 12, preferential attachment m = 6



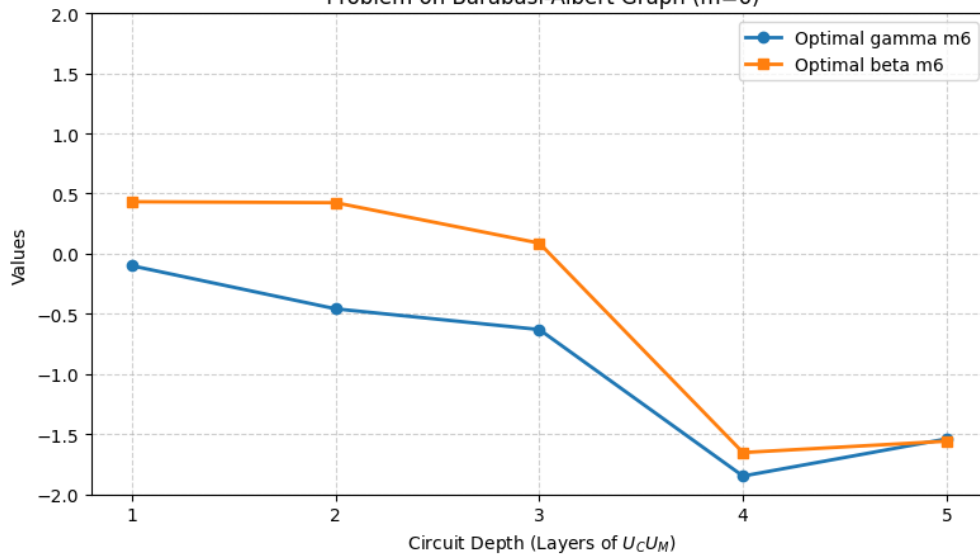
Εικόνα 32: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m6-BA graph.

Goemans-Williamson MaxCut / Barabasi-Albert Graph (Value = 26)



Εικόνα 33: Η μέγιστη τομή για τον m6-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.

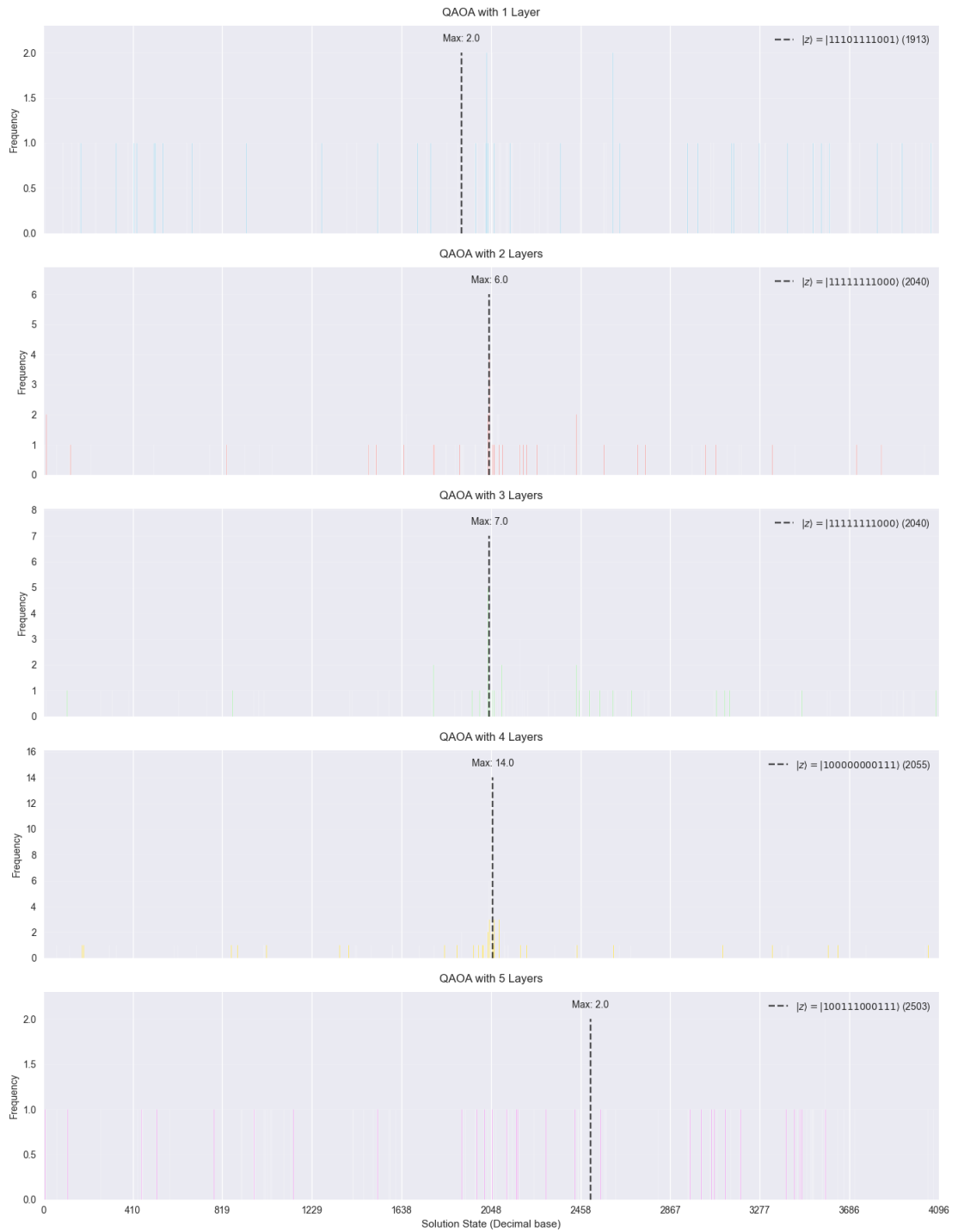
QAOA Parameter evolution for the MaxCut Problem on Barabasi-Albert Graph (m=6)



Εικόνα 34: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m6-BA.

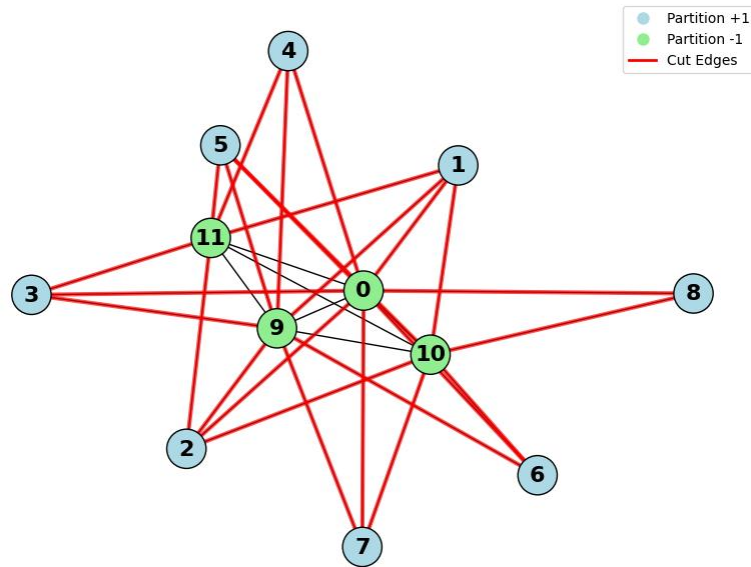
Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-0.10019229	0.43221558
2	-0.45814986	0.42416885
3	-0.63013035	0.08812854
4	-1.84765834	-1.65242438
5	-1.53874364	-1.5578206

2. Nodes = 12, m = 8

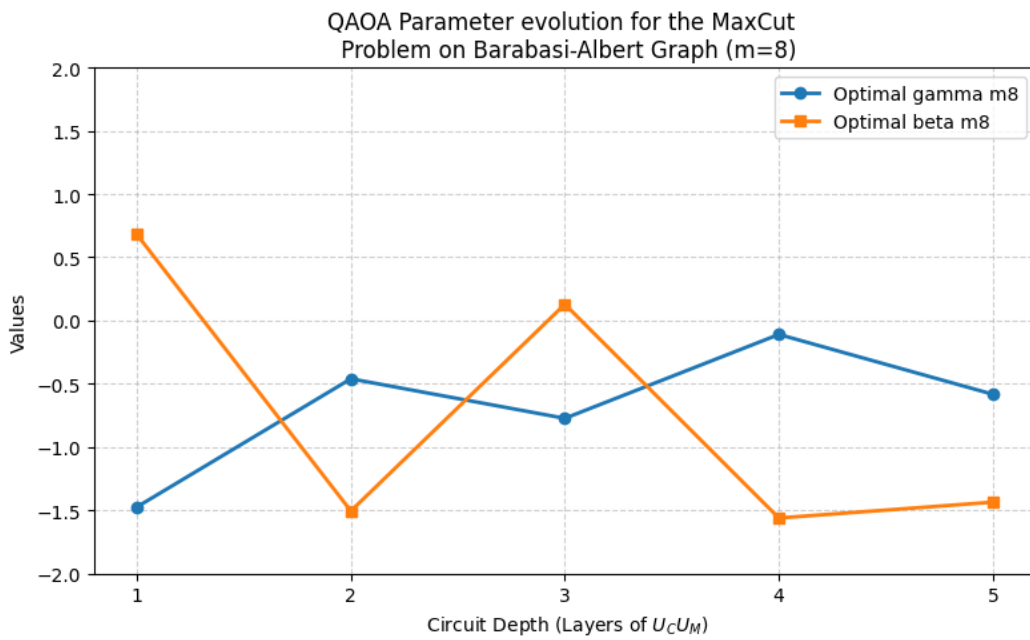


Εικόνα 35: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m8-BA graph.

Goemans-Williamson MaxCut / Barabasi-Albert Graph (Value = 26)



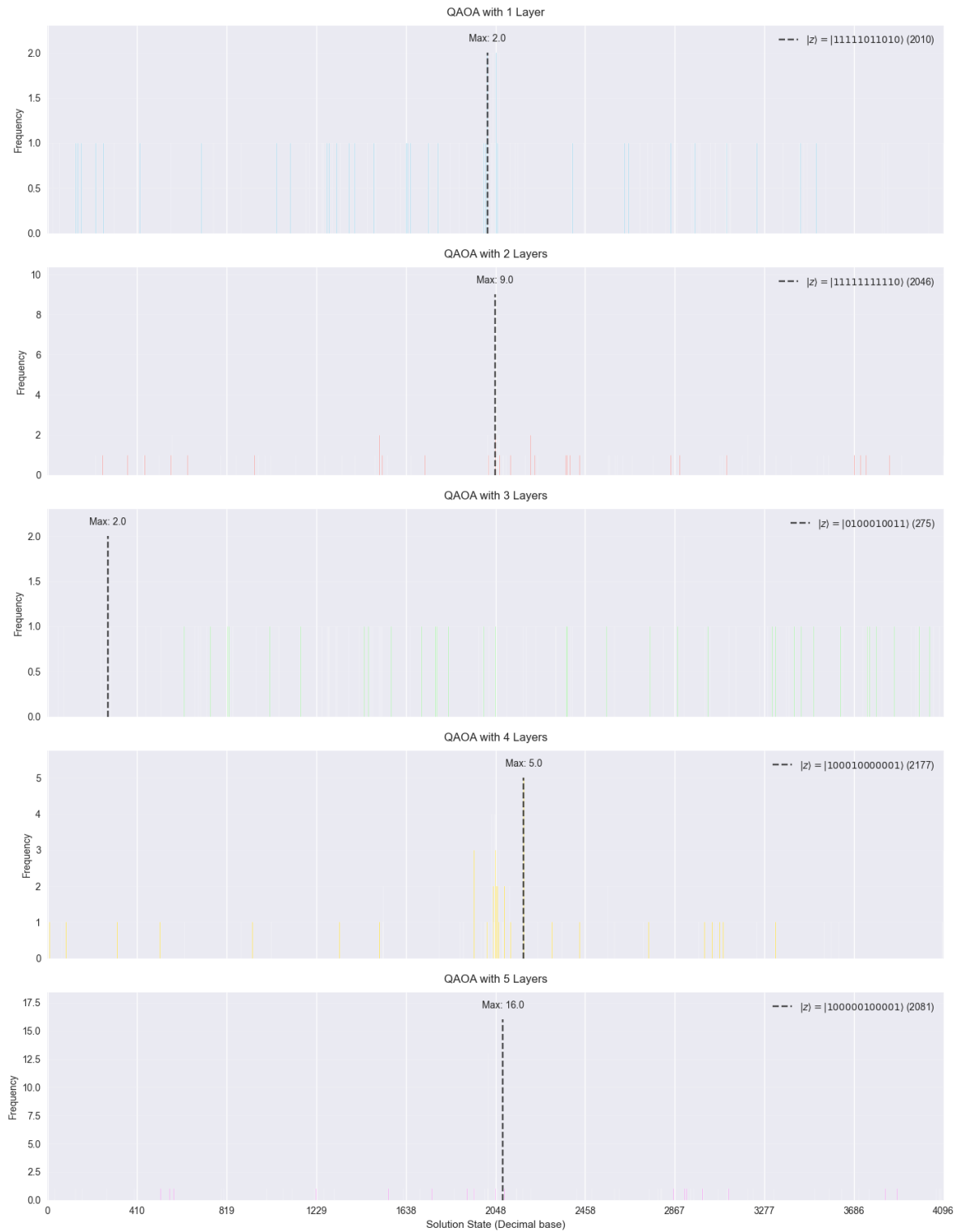
Εικόνα 36: Η μέγιστη τομή για τον m8-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



Εικόνα 37: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m8-BA.

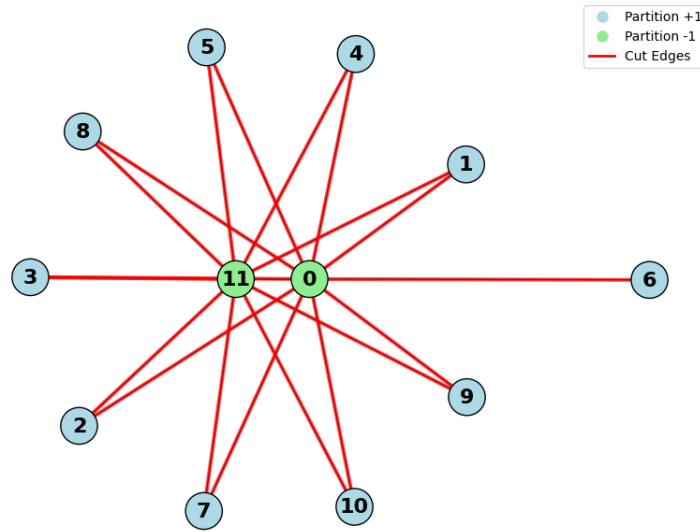
Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-1.47335584	0.68029238
2	-0.46033491	-1.5050995
3	-0.7727108	0.12891583
4	-0.10971706	-1.56057817
5	-0.58256579	-1.43516638

3. Nodes=12, m = 10

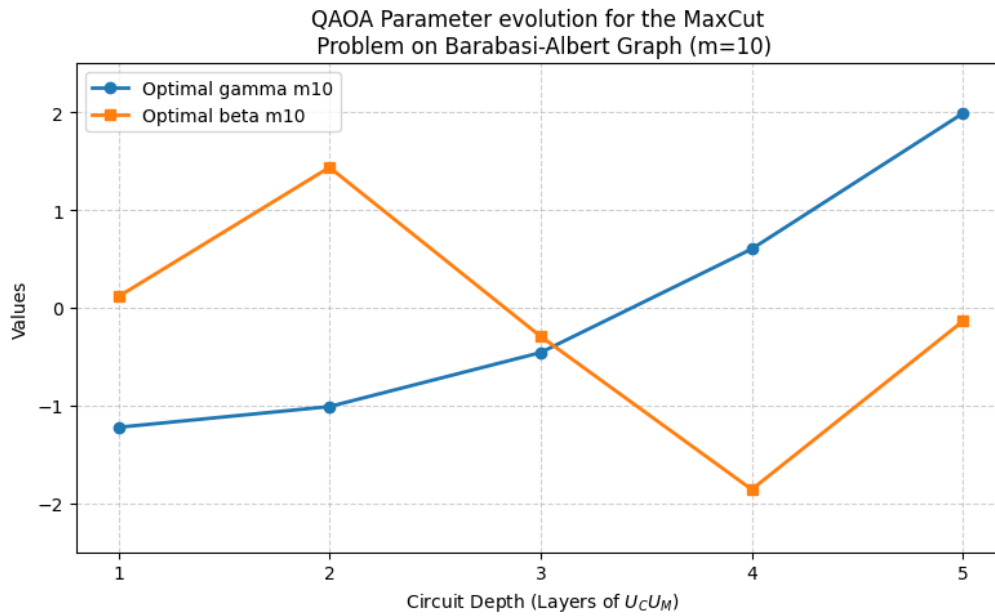


Εικόνα 38: Αποτελέσματα του QAOA για το πρόβλημα Max-Cut στον m10-BA graph.

Goemans-Williamson MaxCut / Barabasi-Albert Graph (Value = 19)

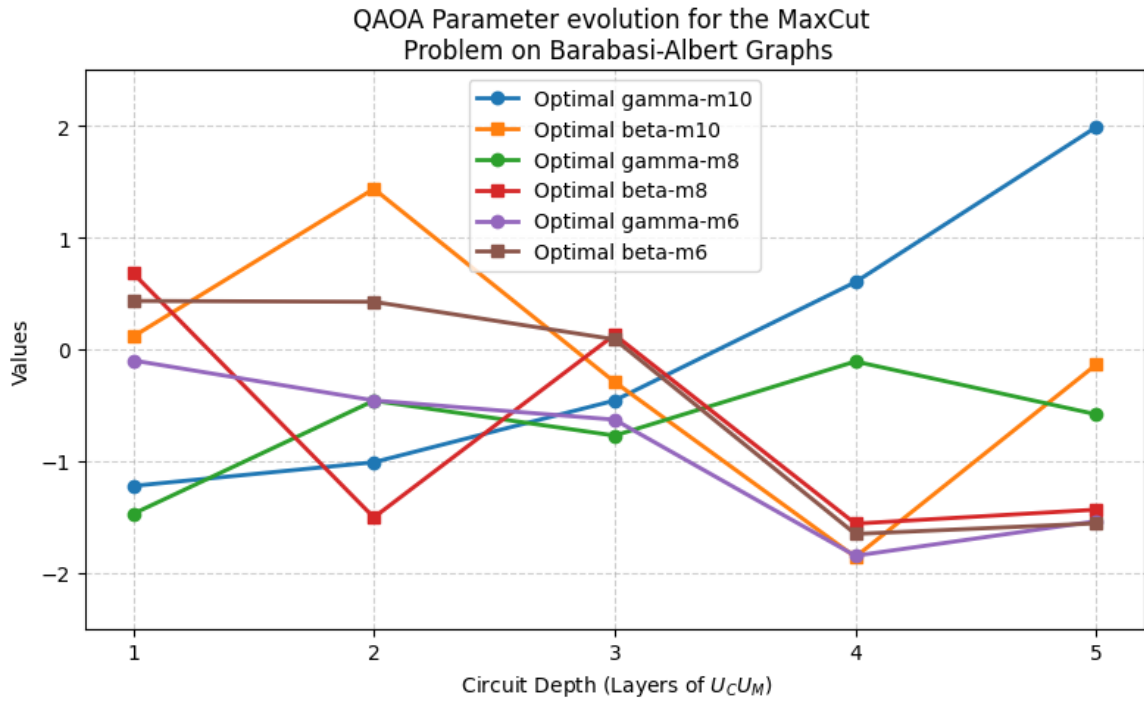


Εικόνα 39: Η μέγιστη τομή για τον m10-BA graph, όπως την βρίσκει ο αλγόριθμος Goemans-Williamson.



Εικόνα 40: Ανάλυση των βέλτιστων παραμέτρων γ και β του γράφου m10-BA.

Layers (p)	Optimal γ	Optimal β
1	-1.22306509	0.11300668
2	-1.01118768	1.43500837
3	-0.4588821	-0.29305945
4	0.60032343	-1.85842411
5	1.98680543	-0.13818365



Εικόνα 41: Συνολική ανάλυση της μεταβολής των παραμέτρων γ κα β για όλες τις περιπτώσεις του preferential attachment m για τα γραφήματα Barabasi-Albert.

B. Μαθηματικές αποδείξεις

B.1 Goemans-Williamson is 0.878-approximate

Προκειμένου να αποδειχτεί ο λόγος απόδοσης α του αλγορίθμου Goemans-Williamson θα οριστεί αρχικά η αναμενόμενη τιμή της διαμέρισης

$$E[Cut] = \sum_{(i,j) \in E} P[x_i \neq x_j] = \sum_{(i,j) \in E} \frac{\theta_{ij}}{\pi}$$

όπου $\theta_{ij} = \arccos(u_i u_j)$

Η βέλτιστη τιμή του SDP προβλήματος είναι

$$SDP_{OPT} = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} (1 - \cos \theta_{ij})$$

Ενώ ο λόγος ακρίβειας για την χειρότερη περίπτωση θα είναι

$$\alpha_{worst\ case} = \min_{0 \leq \theta \leq \pi} \frac{\theta/\pi}{(1 - \cos \theta)/2}$$

Η παραπάνω ελαχιστοποίηση δίνει σαν αποτέλεσμα $\theta \approx 2.33\ radians$ και στον λόγο ακρίβειας την τιμή $\alpha \geq 0.878$.

B.2 Suzuki-Trotter Decomposition

Το ανάπτυγμα Suzuki-Trotter αποτελεί ένα εργαλείο που χρησιμοποιείται για προσεγγίσει έναν εκθετικό τελεστή ως γινόμενο πιο απλών τελεστών [22].

- **Ανάπτυγμα Suzuki-Trotter 1^{ης} Τάξεως**

Το ανάπτυγμα Suzuki-Trotter 1^{ης} Τάξεως χρησιμοποιείται στην προσέγγιση του εκθετικού ενός αθροίσματος 2 μη-μεταθετικών τελεστών A και B . Δοθείσας μιας Hamiltonian H που ορίζεται ως το άθροισμα των A και B , δηλαδή $H = A + B$, ο τελεστής της χρονικής εξέλιξης είναι

$$e^{-iHt} = e^{-i(A+B)t} \tag{B.2.1}$$

Όταν τα A και B δεν μετατίθενται, ο υπολογισμός του $e^{-i(A+B)t}$ αποτελεί ένα δύσκολο εγχείρημα. Το ανάπτυγμα Suzuki-Trotter 1^{ης} Τάξεως προσεγγίζει τον τελεστή αυτό ως εξής

$$e^{-iHt} \approx \left(e^{-iA \frac{t}{n}} e^{-iB \frac{t}{n}} \right)^n \tag{B.2.2}$$

- **Απόδειξη**

Για να αποδειχθεί η παραπάνω σχέση θα οριστεί αρχικά το εκθετικό ενός τελεστή με χρήση του αναπτύγματος Σειρών:

$$e^X = I + X + \frac{X^2}{2!} + \frac{X^3}{3!} + \dots \quad (B.2.3)$$

Όπου I είναι ο ταυτοτικός τελεστής. Χρησιμοποιώντας αυτή τη σχέση για τα $e^{-iA\frac{t}{n}}$ και $e^{-iB\frac{t}{n}}$, η προσέγγιση για μικρά t/n είναι

$$e^{-iA\frac{t}{n}} \approx I - iA\frac{t}{n}, \quad e^{-iB\frac{t}{n}} \approx I - iB\frac{t}{n} \quad (B.2.4)$$

Με πολλαπλασιασμό των 2 παραπάνω τελεστών προκύπτει

$$\begin{aligned} e^{-iA\frac{t}{n}} e^{-iB\frac{t}{n}} &\approx \left(I - iA\frac{t}{n}\right) \left(I - iB\frac{t}{n}\right) \\ &= I - iA\frac{t}{n} - iB\frac{t}{n} + O\left(\frac{t^2}{n^2}\right) \end{aligned} \quad (B.2.5)$$

Όπου οι υψηλότερης τάξης όροι $O\left(\frac{t^2}{n^2}\right)$ θεωρούνται αμελητέοι για $n \rightarrow \infty$. Ο τελεστής της χρονικής εξέλιξης εκφράζεται ως

$$e^{-iHt} \approx \left(e^{-iA\frac{t}{n}} e^{-iB\frac{t}{n}}\right)^n$$

Αντικαθιστώντας το με το αποτέλεσμα της εξίσωσης (B.2.5) και υψώνοντας το στην δύναμη n προκύπτει

$$\left(e^{-iA\frac{t}{n}} e^{-iB\frac{t}{n}}\right)^n \approx \left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n \quad (B.2.6)$$

Κάνοντας χρήση της του ορισμού της *εκθετικής συνάρτησης*, μπορεί πολύ εύκολα να αποδειχθεί η σχέση

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n = e^{-i(A+B)t}$$

Για τον υπολογισμό του παραπάνω ορίου, θα γίνει ανάπτυξη του όρου $\left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n$ με χρήση του *Διωνυμικού Θεωρήματος*:

$$(x+y)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} x^{n-k} y^k \quad (B.2.7)$$

Εδώ $x = I$ και $y = -i(A+B)\frac{t}{n}$. Αντικαθιστώντας τα στην σχέση (B.2.7) θα προκύψει

$$\left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} I^{n-k} \left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^k$$

Για $I^{n-k} = I$ θα είναι

$$\left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{(-i)^k (A+B)^k t^k}{n^k} \quad (B.2.8)$$

Προσθέτοντας και τον ορισμό του παραγοντικού, προκύπτει

$$\frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{n(n-1)(n-2)\cdots(n-k+1)}{k!}$$

Επομένως

$$\frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot \frac{1}{n^k} = \frac{1}{n^k} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \left(1 - \frac{2}{n}\right) \cdots \left(1 - \frac{k-1}{n}\right) \quad (B.2.9)$$

Όσο το n θα τείνει προς το άπειρο, ο όρος $\left(1 - \frac{m}{n}\right)$ θα προσεγγίζει το 1 για κάθε $m < k$. Άρα στο όριο $n \rightarrow \infty$, ο όρος της σχέσης (B.2.9) γίνεται

$$\frac{n!}{k!(n-k)!} \cdot \frac{1}{n^k} \rightarrow \frac{1}{k!} \quad (B.2.10)$$

Αντικαθιστώντας την σχέση (B.2.10) στην σχέση (B.2.8) θα προκύψει

$$\left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} ((-i(A+B)t)^k) \quad (B.2.11)$$

Για μεγάλο n ($n \rightarrow \infty$) το άνω όριο του τελεστή Αθροίσματος γίνεται άπειρο και η Σειρά παίρνει την μορφή της Εκθετικής Συνάρτησης

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Επομένως

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(I - i(A+B)\frac{t}{n}\right)^n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{((-i(A+B)t)^k)}{k!} = e^{-i(A+B)t}$$

Αποδεικνύοντας τελικώς το **Ανάπτυγμα Suzuki-Trotter 1ης Τάξεως**

$$e^{-iHt} \approx \left(e^{-iA\frac{t}{n}} e^{-iB\frac{t}{n}}\right)^n \rightarrow e^{-i(A+B)t}, n \rightarrow \infty$$

B.3 Max-Cut is NP-Hard

Η απόδειξη για το NP-Hardness του προβλήματος της Μέγιστης Διαμέρισης θα πραγματοποιηθεί με την μέθοδο της επαγωγής ενός άλλου NP-Hard προβλήματος και πιο συγκεκριμένα του *Max-2-SAT*.

1. Κατασκευή ενός γράφου $G = (V, E)$ για τον οποίο:
 - Για κάθε μεταβλητή x_i προκύπτουν 2 κόμβοι x_i και $\bar{x}_i$.
 - Για κάθε συνθήκη (clause) της μορφής $(l_i \vee l_j)$, γίνεται προσθήκη μιας ακμής ανάμεσα στα l_i και l_j .
 - Προσθήκη των ακμών $(x_i, \bar{x}_i)$ για όλες τις μεταβλητές.
2. Μια διαμέριση στον G αντιστοιχεί σε μια απόδοση τιμών αληθείας (truth assignment):
 - Αν $x_i \in S$, τότε το $x_i = True$
 - Αν $\bar{x}_i \in S$, τότε το $x_i = False$
3. Μια συνθήκη $(l_i \vee l_j)$ είναι μη-ικανοποιήσιμη αν και τα δύο στοιχεία $l_i, l_j = False$, που σημαίνει ότι τα αντίθετα $\bar{l}_i, \bar{l}_j$ ανήκουν στην ίδια διαμέριση. Επομένως, ο αριθμός των διαμερίσεων ισούται με τον αριθμό των ικανοποιήσιμων συνθηκών (satisfied clauses).

Εφόσον το πρόβλημα *Max-2-SAT* είναι *NP-Hard*, από την μέθοδο της αναγωγής προκύπτει ότι και το πρόβλημα *Max-Cut* είναι *NP-Hard*.

- [1] P. Benioff, "The Computer as a Physical System: A Microscopic Quantum Mechanical Hamiltonian Model of Computers as Represented by Turing Machines," 1980.
- [2] R. P. Feynman, "Simulating Physics with Computers," 1982.
- [3] J. Preskill, "Quantum Computing in the NISQ era and beyond," Jan. 2018, doi: 10.22331/q-2018-08-06-79.
- [4] T. Ayrat, P. Besserve, D. Lacroix, and E. A. R. Guzman, "Quantum computing with and for many-body physics," Mar. 2023, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/2303.04850>
- [5] X. Yuan, S. Endo, Q. Zhao, Y. Li, and S. Benjamin, "Theory of variational quantum simulation," Dec. 2018, doi: 10.22331/q-2019-10-07-191.
- [6] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, 2023.
- [7] D. Bohm, "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of 'Hidden' Variables. I," Jan. 1952.
- [8] A. P. B. R. N. Einstein, "Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?," *Physical Review*, vol. 47, May 1935.
- [9] S. Mangini Supervisor and C. Macchiavello, "Dottorato di Ricerca in Fisica-XXXV ciclo Variational quantum algorithms for machine learning," 2023.
- [10] M. Stęchły, "Introduction to Variational Quantum Algorithms," Feb. 2024, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/2402.15879>
- [11] K. Blekos *et al.*, "A Review on Quantum Approximate Optimization Algorithm and its Variants," Jun. 2023, doi: 10.1016/j.physrep.2024.03.002.
- [12] Kolomvatsos K, "P, NP, NP-Complete Problems," Jun. 2022.
- [13] Parrilo Pablo, "MIT 6.972 Algebraic techniques and semidefinite optimization (Lecture 2)," Feb. 2006.
- [14] Wikipedia contributors, "Erdős–Rényi model," https://en.wikipedia.org/wiki/Erd%C5%91s%E2%80%93R%C3%A9nyi_model.
- [15] Wikipedia contributors, "Random regular graph," https://en.wikipedia.org/wiki/Random_regular_graph.
- [16] Wikipedia contributors, "Barabási–Albert model," https://en.wikipedia.org/wiki/Barab%C3%A1si%E2%80%93Albert_model.
- [17] J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Neven, "Barren plateaus in quantum neural network training landscapes," Mar. 2018, doi: 10.1038/s41467-018-07090-4.
- [18] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, "A Quantum Approximate Optimization Algorithm," Nov. 2014, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/1411.4028>
- [19] J. W. Z. Lau, K. H. Lim, H. Shrotriya, and L. C. Kwek, "NISQ computing: where are we and where do we go?," Dec. 01, 2022, *Springer*. doi: 10.1007/s43673-022-00058-z.
- [20] H.-L. Huang *et al.*, "Near-Term Quantum Computing Techniques: Variational Quantum Algorithms, Error Mitigation, Circuit Compilation, Benchmarking and Classical Simulation," Nov. 2022, doi: 10.1007/s11433-022-2057-y.
- [21] A. Zeguendry, Z. Jarir, and M. Quafafou, "Quantum Machine Learning: A Review and Case Studies," Feb. 01, 2023, *MDPI*. doi: 10.3390/e25020287.
- [22] T. Sadhukhan, "Suzuki-Trotter Decomposition: A Step-by-Step Theoretical proof of the formulae. Suzuki-Trotter Decomposition." [Online]. Available: <https://www.researchgate.net/publication/388349534>