

Quantum Imaginary Time Evolution applied to UD-MIS problem

Victor A. Penas, Marcelo Losada, and Pedro Walter Lamberti

Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba and CONICET, Argentina

Abstract. We apply a procedure based on the quantum imaginary time evolution method to solve the unit-disk maximum independent set problem. A numerical simulation is performed for a 6-qubit graph using a set of linear domains. We find that the failure probability of the procedure is relatively small and rapidly decreases with the number of shots.

Keywords: quantum algorithms, quantum computation, quantum optimization

Evolución Temporal Imaginaria Cuántica y el problema de UD-MIS

Resumen Aplicamos un procedimiento basado en el método de evolución temporal imaginaria cuántica para encontrar el conjunto máximo independiente de grafos de disco unitario. Se realizó una simulación numérica de un grafo de 6 cúbits utilizando un conjunto de dominios lineales. Observamos que la probabilidad de fallo del procedimiento es relativamente baja y disminuye rápidamente con el número de mediciones.

Palabras clave: algoritmos cuánticos, computación cuántica, optimización cuántica

1. Introducción

El cálculo del estado fundamental de un sistema cuántico es crucial en diversas áreas de la física y la optimización. La computación cuántica emerge como una herramienta prometedora para calcular estos estados, tarea que resulta intratable para las computadoras clásicas para sistemas de muchos cúbits. Algunos de los algoritmos cuánticos propuestos para abordar esta tarea incluyen el algoritmo de optimización adiabática (Das y Chakrabarti, 2008; Farhi et al., 2001), el algoritmo de optimización aproximada cuántica (QAOA) (Farhi et al., 2014; Herrman et al., 2022; Medvidović y Carleo, 2021;

Ostrowski et al., 2020; Shaydulin et al., 2021; Zhou et al., 2020; Zhu et al., 2022). Un método alternativo, denominado evolución temporal imaginaria cuántica (QITE) fue propuesto recientemente (Motta et al., 2019). Este enfoque emula la evolución temporal imaginaria usando evoluciones unitarias asistidas por mediciones. Algunas aplicaciones del algoritmo QITE incluyen la química cuántica en hardware cuántico ruidoso de escala intermedia (NISQ), (Barison et al., 2022; Tsuchimochi et al., 2023; Yeter-Aydeniz et al., 2020), en simulación de sistemas cuánticos abiertos (Kamakari et al., 2022), observables termodinámicos (Gacon et al., 2024; Getelina et al., 2023) y más recientemente en problemas de optimización como Max-Cut y optimización binaria polinómica no restringida (PUBO) (Alam et al., 2023; Bauer et al., 2024). En un trabajo previo (Penas et al., 2025) aplicamos un método basado en QITE para encontrar el máximo conjunto independiente de un grafo de disco unitario (problema de UD-MIS). Este problema es un ejemplo de optimización combinatoria que pertenece a la clase de problemas NP-hard. En este trabajo continuamos dicha investigación, considerando un grafo de disco unitario de 6 cúbits y usando un conjunto de dominios lineales. Estudiamos la fidelidad del estado final con respecto al estado esperado y la probabilidad de fallo del método a medida que aumentan las iteraciones.

2. El problema del máximo conjunto independiente en disco unitario

Sea $G = (V, E)$ un grafo con un conjunto de vértices V y un conjunto de aristas E , y sea N el número total de vértices. Un conjunto independiente de G es un conjunto de vértices mutuamente no conectados. Sea $S = (s_1, \dots, s_N)$ una cadena de bits de longitud N ($s_i \in \{0, 1\}$), y sea \mathcal{B}_N el conjunto de todas las posibles cadenas de bits de longitud N . El problema del máximo conjunto independiente (MIS) consiste en el siguiente problema de maximización: $\max_{S \in \mathcal{B}_N} \sum_{i=1}^N s_i$ tal que $S = (s_1, \dots, s_N)$ corresponde a un conjunto independiente, es decir, para todo par de vértices (i, i') tenemos que $s_i = s_{i'} = 1 \implies (i, i') \notin E$. El problema de UD-MIS es el problema de MIS restringido a grafos de disco unitario. Un grafo es de disco unitario si a cada vértice se le puede asociar una posición en el plano bidimensional de modo que dos vértices compartan una arista si y sólo si su distancia es menor que la unidad. Este problema de optimización puede ser reformulado como un problema de optimización cuántica. Consiste en encontrar el estado fundamental de un Hamiltoniano de la forma:

$$H = - \sum_{i \in V} \hat{n}_i + u \sum_{(i, i') \in E} \hat{n}_i \hat{n}_{i'}, \quad (1)$$

con $\hat{n}_i = (I - Z_i)/2$ y Z_i la matriz de Pauli en la dirección z actuando en el cúbit i , y u un parámetro cuyo valor puede ajustarse. La idea es asociar cada cadena de bits $S = (s_1, \dots, s_N)$ con un estado cuántico $|s_1, \dots, s_N\rangle$. Fijar $u > 1$ garantiza que el fundamental de H represente al máximo conjunto independiente.

3. Método de optimización basado en QITE

La idea del algoritmo QITE consiste en obtener el estado fundamental del Hamiltoniano de un sistema cuántico como el límite a tiempos largos de la ecuación de

Schrödinger en tiempo imaginario. Se aproxima la acción no unitaria e^{-tH} por una secuencia de evoluciones unitarias asociadas a cada paso de una descomposición de Trotter de H . Más precisamente, $H = \sum_i h_i$ donde h_i actúa en una cierta cantidad de cúbits y cada paso de Trotter contiene una exponencial no unitaria asociada a h_i a tiempo $\tau = t/n$ (n cantidad de iteraciones de Trotter). Cada unitaria utilizada para aproximar la exponencial no unitaria e^{-tH} actúa sobre una cierta cantidad de cúbits (dominio) alrededor del soporte de h_i . Iterando este proceso, se construye el operador de QITE $Q_H(\tau, n, \mathcal{D})$ (Motta et al., 2019). Aquí, \mathcal{D} contiene la información de todos los dominios. Vamos a llamar a un conjunto de dominios \mathcal{D} lineal si cada evolución unitaria actúa sobre un solo cúbit.

Denotamos E_0, \dots, E_{d-1} los autovalores de H , ordenados de manera no-decreciente. Los correspondientes autovectores se denotan como $|E_0\rangle, \dots, |E_{d-1}\rangle$, respectivamente. Los autovectores de H coinciden con los vectores de la base computacional, en algún orden. El problema que queremos resolver es (Penas et al., 2025): *Encontrar el autovalor E_0 de H o un autovalor E_i tal que $E_i \leq E_0 + \delta E$, con $\delta E \geq 0$ un error tolerable.* Los estados asociados con estos autovalores son llamados estados aceptables. Los pasos de la propuesta son los siguientes:

1. Estado inicial $|\psi_0\rangle = \mathbf{H}^{\otimes N}|0\dots 0\rangle$, con $\mathbf{H}^{\otimes N}$ la compuerta de Hadamard en N qubits. El estado inicial se puede escribir como $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{i=0}^{d-1} |E_i\rangle$.
2. Aplicamos $Q_H(\tau, n_{\max}, \mathcal{D})$ hasta el tiempo t_{\max} : $|\psi_0\rangle \rightarrow |\phi_{t_{\max}}^{qite}\rangle = Q_H(\tau, n_{\max}, \mathcal{D})|\psi_0\rangle$, donde t_{\max} , τ , y \mathcal{D} dependen del problema ($n_{\max} = t_{\max}/\tau$).
3. Medimos $|\phi_{t_{\max}}^{qite}\rangle$ M veces (M la cantidad de shots) en la base computacional, con $M \ll d$. Guardamos las M salidas E_{i_m} ($1 \leq m \leq M$).
4. En una computadora clásica, elegimos de las M salidas E_{i_m} el de menor energía.

Al medir en la base computacional, se espera obtener con más probabilidad los autoestados con menor energía al crecer n_{\max} . Si consideramos M shots, al aumentar M , más chances hay de conseguir un estado tal que $E_i \leq E_0 + \delta E$.

4. Resultados Numéricos

Los resultados numéricos obtenidos en esta sección resultaron de simulaciones en computadoras clásicas usando librerías conocidas como Qiskit y NumPy en language Python. Aplicamos el método basado en QITE descrito en la Sec. 3 para encontrar el conjunto independiente máximo del grafo de disco unitario de 6 cúbits que se muestra en la Fig. 1. Se utilizó un conjunto de dominios lineales. El Hamiltoniano asociado a dicho problema se obtiene a partir de este grafo usando (1). El estado fundamental tiene degeneración tres, y representa a los tres máximos conjuntos independientes. Estos conjuntos son: $\{0, 2\}$, $\{0, 4\}$, $\{2, 5\}$. Los parámetros utilizados son $\tau = 0,01$ y tiempo máximo $t_{\max} = 10$, lo que implica una cantidad total de iteraciones $n_{\max} = 1000$. Se obtuvo para cada paso de la iteración la fidelidad entre el estado de QITE, $|\phi_t^{qite}\rangle$, y el estado exacto, $|\psi_t^{ite}\rangle$, que resulta de la evolución temporal imaginaria. La fidelidad entre dos estados puros $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ se define como $F(\psi_1, \psi_2) = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2$. Además, se obtuvo la fidelidad entre $|\phi_t^{qite}\rangle$ y el estado exacto a tiempo final, $|\psi_{t_{\max}}^{ite}\rangle$, a medida que crece el número de iteraciones.

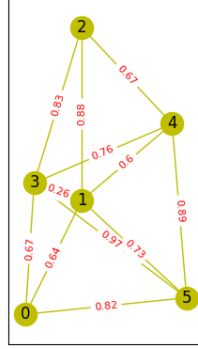


Figura 1. Instancia de grafo asociado al problema de UD-MIS para 6 cúbits.

En las Fig.2a y Fig.2b se muestran los resultados obtenidos, respectivamente.

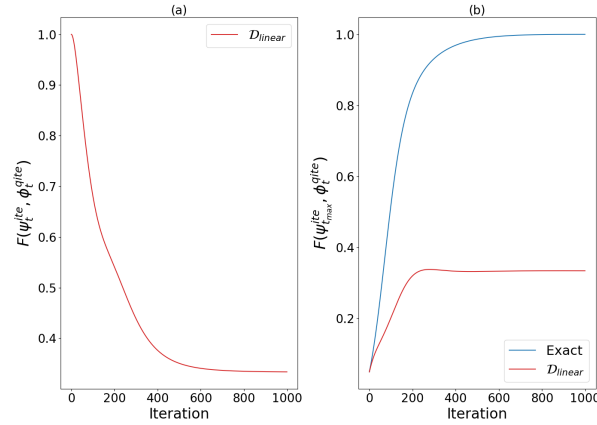


Figura 2. Error y fidelidad para el grafo de 6 cúbits de Fig. 1.

Se observa que la fidelidad entre $|\psi_t^{ite}\rangle$ y $|\phi_t^{qite}\rangle$ se separa a medida que crece el número de iteraciones. Esto es razonable, ya que en cada iteración se va acumulando error debido a la aproximación asociada con el dominio elegido. También se observa que el estado final de QITE no converge al estado exacto de la evolución temporal imaginaria. Si bien los estados obtenidos difieren significativamente del estado exacto $|\psi_t^{ite}\rangle$, veremos que esto no afecta al rendimiento del método.

Dado que el método propuesto es probabilístico, tiene asociada una probabilidad de fallo. Denominamos $P_F^{qite}(t)$ a la probabilidad de fallo asociada al estado de QITE,

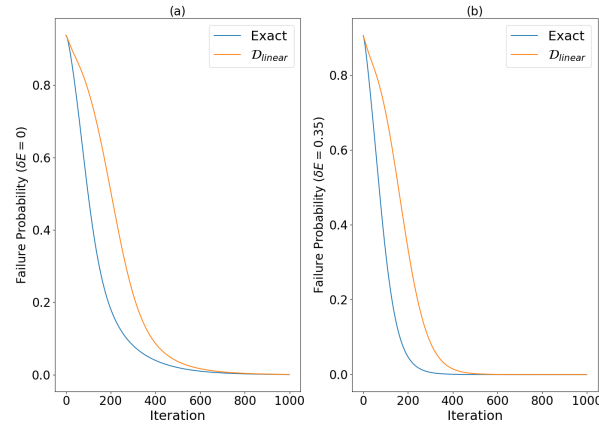


Figura 3. Probabilidad de fallo. (a) $P_F^{ite}(t)$ (línea azul) y $P_F^{qite}(t)$ para $\delta E = 0$. (b) $\delta E = 0,35$.

$|\phi_t^{qite}\rangle$, y $P_F^{ite}(t)$ a la probabilidad de fallo asociada al estado exacto $|\psi_t^{ite}\rangle$. En (Penas et al., 2025) se encontraron sus respectivas expresiones. En la Fig. 3 se muestra cómo evolucionan ambas probabilidades de fallo a medida que crece el número de iteraciones. Se eligieron dos tolerancias: $\delta E = 0$ y $\delta E = 0,35$. $\delta E = 0$ implica que sólo son aceptables los estados fundamentales, mientras que $\delta E = 0,35$ implica que también son aceptables los primeros excitados.

En la Fig. 3, se observa que $P_F^{qite}(t)$ decae al aumentar el número de iteraciones (para ambos valores de δE). Por lo tanto, a pesar de usar un dominio lineal, y de que la fidelidad entre $|\psi_t^{ite}\rangle$ y $|\phi_t^{qite}\rangle$ no es cercana a 1, el rendimiento del método propuesto es adecuado.

Para una mejor caracterización del rendimiento del método propuesto con un dominio lineal, se requiere un análisis más profundo que incluya un mayor número de cúbits y evaluaciones de desempeño en computadoras cuánticas reales.

Referencias

- Alam, R., Siopsis, G., Herrman, R., Ostrowski, J., Lotshaw, P., & Humble, T. (2023). Solving MaxCut with quantum imaginary time evolution. *Quantum Inf Process*, 22, 281. <https://doi.org/10.1007/s11128-023-04045-7>
- Barison, S., Galli, D. E., & Motta, M. (2022). Quantum simulations of molecular systems with intrinsic atomic orbitals. *Physical Review A*, 106(2). <https://doi.org/10.1103/physreva.106.022404>
- Bauer, N. M., Alam, R., Siopsis, G., & Ostrowski, J. (2024). Combinatorial optimization with quantum imaginary time evolution. *Phys. Rev. A*, 109, 052430. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.052430>
- Das, A., & Chakrabarti, B. K. (2008). Colloquium: Quantum annealing and analog quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, 80(3), 1061-1081. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.80.1061>

- Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014). A Quantum Approximate Optimization Algorithm. <https://arxiv.org/abs/1411.4028>
- Farhi, E., Goldstone, J., Gutmann, S., Lapan, J., Lundgren, A., & Preda, D. (2001). A Quantum Adiabatic Evolution Algorithm Applied to Random Instances of an NP-Complete Problem. *Science*, 292(5516), 472-475. <https://doi.org/10.1126/science.1057726>
- Gacon, J., Nys, J., Rossi, R., Woerner, S., & Carleo, G. (2024). Variational quantum time evolution without the quantum geometric tensor. *Physical Review Research*, 6(1). <https://doi.org/10.1103/physrevresearch.6.013143>
- Getelina, J. C., Gomes, N., Iadecola, T., Orth, P. P., & Yao, Y.-X. (2023). Adaptive variational quantum minimally entangled typical thermal states for finite temperature simulations. *SciPost Physics*, 15(3). <https://doi.org/10.21468/scipostphys.15.3.102>
- Herrman, R., Lotshaw, P. C., Ostrowski, J., Humble, T. S., & Siopsis, G. (2022). Multi-angle quantum approximate optimization algorithm. *Scientific Reports*, 12, 6781. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-10555-8>
- Kamakari, H., Sun, S.-N., Motta, M., & Minnich, A. J. (2022). Digital Quantum Simulation of Open Quantum Systems Using Quantum Imaginary-Time Evolution. *PRX Quantum*, 3(1). <https://doi.org/10.1103/prxquantum.3.010320>
- Medvidović, M., & Carleo, G. (2021). Classical variational simulation of the Quantum Approximate Optimization Algorithm. *npj Quantum Information*, 7(1). <https://doi.org/10.1038/s41534-021-00440-z>
- Motta, M., Sun, C., Tan, A. T. K., O'Rourke, M. J., Ye, E., Minnich, A. J., Brandão, F. G. S. L., & Chan, G. K.-L. (2019). Determining eigenstates and thermal states on a quantum computer using quantum imaginary time evolution. *Nature Physics*, 16(2), 205-210. <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0704-4>
- Ostrowski, J., Herrman, R., Humble, T. S., & Siopsis, G. (2020). Lower Bounds on Circuit Depth of the Quantum Approximate Optimization Algorithm. <https://arxiv.org/abs/2008.01820>
- Penas, V. A., Losada, M., & Lamberti, P. W. (2025). Quantum imaginary time evolution and the unit-disk maximum independent set problem. *Phys. Rev. A*, 111, 042403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.111.042403>
- Shaydulin, R., Hadfield, S., Hogg, T., & Safro, I. (2021). Classical symmetries and the Quantum Approximate Optimization Algorithm. *Quantum Information Processing*, 20(11). <https://doi.org/10.1007/s11128-021-03298-4>
- Tsuchimochi, T., Ryo, Y., Ten-no, S. L., & Sasasako, K. (2023). Improved Algorithms of Quantum Imaginary Time Evolution for Ground and Excited States of Molecular Systems. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 19(2), 503-513. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.2c00906>
- Yeter-Aydeniz, K., Pooser, R. C., & Siopsis, G. (2020). Practical quantum computation of chemical and nuclear energy levels using quantum imaginary time evolution and Lanczos algorithms. *npj Quantum Inf*, 6, 63. <https://doi.org/10.1038/s41534-020-00290-1>
- Zhou, L., Wang, S.-T., Choi, S., Pichler, H., & Lukin, M. D. (2020). Quantum Approximate Optimization Algorithm: Performance, Mechanism, and Implementation

- on Near-Term Devices. *Physical Review X*, 10(2). <https://doi.org/10.1103/physrevx.10.021067>
- Zhu, L., Tang, H. L., Barron, G. S., Calderon-Vargas, F. A., Mayhall, N. J., Barnes, E., & Economou, S. E. (2022). Adaptive quantum approximate optimization algorithm for solving combinatorial problems on a quantum computer. *Phys. Rev. Res.*, 4, 033029. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.033029>