

СИМУЛИРОВАННЫЙ КВАНТОВЫЙ ОТЖИГ С GPU-УСКОРЕНИЕМ ДЛЯ ЗАДАЧИ НАХОЖДЕНИЯ КРАТЧАЙШЕГО ПУТИ В ГРАФЕ БОЛЬШОЙ РАЗМЕРНОСТИ

А.И. Соболев¹

¹*Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А.,
г. Саратов
e-mail: sobalex03@mail.ru*

Аннотация

Разработан алгоритм симулированного квантового отжига (SQA) для решения задачи о кратчайшем пути в больших взвешенных графах на языке программирования Python. Метод основан на формализме путевого интеграла Монте-Карло и имитирует квантовое туннелирование на классическом компьютере. Внедрены GPU-ускорение (CuPy), параллельная обработка квантовых реплик и списки кандидатов. Эксперимент на больших графах (более 500 узлов) показал, что SQA на GPU достигает решения, близкого к оптимуму при лучшем качестве сходимости относительно метода имитации отжига.

Ключевые слова: задача о кратчайшем пути, симулированный квантовый отжиг, имитационный отжиг, GPU-ускорение, метаэвристика, параллельные вычисления, квантовое туннелирование.

Введение

Задача нахождения кратчайшего пути между двумя вершинами во взвешенном графе является одной из классических задач оптимизации. Несмотря на существование точных полиномиальных алгоритмов (например, Дейкстры), для графов с очень большим числом узлов или для динамически изменяющихся графов время работы и требования к памяти точных методов становятся критическими. Кроме того, в ряде приложений допустимо быстрое приближённое решение с гарантированной погрешностью. В таких случаях применяются метаэвристики, среди которых выделяется имитационный отжиг (Simulated Annealing, SA) [1,2].

В предыдущих исследованиях [3] классический SA показал существенные ограничения при масштабировании на задачи большей размерности: склонность к застреванию в локальных оптимумах и низкая эффективность при масштабировании на графы с тысячами вершин. Альтернативой является симулированный квантовый отжиг (Simulated Quantum Annealing, SQA) - метод, имитирующий на классическом компьютере квантовое туннелирование через энергетические барьеры. SQA позволяет более эффективно исследовать пространство решений и реже застревать в локальных минимумах [4]. Цель данной работы - разработка и оптимизация алгоритма SQA для задачи о кратчайшем пути с использованием GPU-ускорения.

1. Обоснование модификаций

В рамках предыдущего исследования была реализована классическая версия алгоритма SA и его многопоточная версия для решения задачи нахождения кратчайшего пути. Алгоритм был протестирован на задаче с 500 вершинами (Плотность графа составляла 19,94%). Классический имитационный отжиг (SA) для задачи о кратчайшем пути оперирует одним текущим путём (состоянием) и последовательно предлагает случайные модификации (например, перестановку двух вершин или добавление/удаление промежуточных узлов). При высокой температуре разрешаются ухудшающие переходы, что позволяет выходить из локальных минимумов. Однако в задачах большой размерности этот механизм становится неэффективным: вероятность преодолеть высокий барьер экспоненциально мала.

Симулированный квантовый отжиг (SQA) решает проблемы алгоритма имитации отжига, имитируя квантовое туннелирование. В SQA вместо одного состояния рассматривается система из R квантовых реплик (копий) системы, связанных между собой фиктивным квантовым полем. Реплики эволюционируют по методу квантового Монте-Карло (Path-Integral Monte Carlo), что позволяет системе коллективно проходить сквозь барьеры без необходимости их перепрыгивать [5]. Ключевая идея метода: энергия системы заменяется на псевдоэнергию, включающую как классическую энергию (длина пути) каждой реплики, так и взаимодействие между соседними репликами и рассчитывается по формуле (1):

$$E_{total} = \sum_{k=1}^R L(p_k) + \Gamma \sum_{k=1}^R d(p_k, p_{k+1}), \quad (1)$$

где $L(p_k)$ – длина пути реплики k , $d(p_k, p_{k+1})$ – некоторая мера расстояния между путями (например, число различных рёбер), Γ – сила квантового поля. При большом Γ реплики вынуждены быть похожими, что соответствует сильному туннелированию. Постепенно Γ уменьшается до нуля, и система сходится к классическому оптимуму.

2. Архитектура алгоритма и технические оптимизации

Разработанный алгоритм SQA (Simulated Quantum Annealing) специализирован для задачи о кратчайшем пути. Входные данные: взвешенный граф $G = (V, E)$ с матрицей весов W , начальная вершина s и целевая вершина t . Требуется найти путь минимальной суммарной длины.

2.1. Структура SQA

Задаются начальные параметры: классическая температура T_0 и квантовое поле Γ_0 . В ходе итераций T снижается по линейному закону, Γ – по закону $\Gamma = \Gamma_0 * (1 - k/K)$, где k – номер итерации, K – общее число итераций.

- На каждом шаге для каждой реплики:
- Генерируется кандидат локальной модификацией.
- Вычисляется изменение классической энергии ΔL .
- Вычисляется изменение взаимодействия с соседними репликами ΔI .

Принимается решение по метрополисовскому критерию с вероятностью $\exp(-(\Delta L + \Delta I)/T)$.

После завершения итераций выбирается лучшая реплика, к ней применяется финальный локальный поиск (2-opt).

2.2. Технические оптимизации

GPU-ускорение через CuPy. Матрица весов графа хранится на GPU. Вычисление длины пути для всех реплик выполняется параллельно с использованием cuPy и кастомных ядер CUDA. Операции выбора случайных соседей и генерации кандидатов также векторизованы.

3. Тестирование алгоритма

Для оценки эффективности SQA на различных графах, было проведено множественное количество запусков для выявления показателей, результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Результаты экспериментов на различных графах

Показатель	Симуляция квантового отжига (SQA) Граф - 500 вершин Плотность – 19,94%	Имитация отжига (QA) Граф - 500 вершин Плотность – 19,94%	Симуляция квантового отжига (SQA) Граф - 1000 вершин Плотность - 30,52%	Имитация отжига (QA) Граф - 1000 вершин Плотность – 30,52%
Среднее отклонение от оптимума	26,01	2640	28,68	2640
Стандартное отклонение (дисперсия)	14,01	3230,3	17,74	5345,1
Коэффициент вариации (относит. разброс)	53,8%	3356,57%	55,21%	5317,21%
Макс. отклонение (наихудший случай)	36,4%	7496,5%	35,28%	9563,2%
Доля успешных запусков (ошибка <5%)	20%	6,7%	17%	4,9%
Среднее время сходимости	3,48 сек	0,0363 сек	5,78 сек	0,1265 сек

Алгоритм Дейкстры не смог найти правильный ответ для данных графа из-за нехватки вычислительных ресурсов, поэтому сравнение проводилось с алгоритмом имитации отжига, разработанным ранее.

Относительно высокое стандартное отклонение и коэффициент вариации SQA обусловлены спецификой тестовых графов: маленькая плотность (разреженный граф, мало альтернативных связей) и широкий диапазон весов рёбер от 0 до 500. В таких условиях даже небольшие изменения в траектории поиска могут приводить к качественно разным путям, что характерно для метаэвристик на разреженных графах с экстремальными весами.

Загрузка GPU составила 40–50%. Это объясняется тем, что не все части алгоритма можно эффективно распараллелить. Вычисление длин путей хорошо ускоряется на GPU, а вот генерация новых путей-кандидатов и проверка, если в них нет циклов, выполняются последовательно и загружают GPU слабее.

Заключение

В ходе работы был разработан и исследован алгоритм симулированного квантового отжига с GPU-ускорением для решения задачи о кратчайшем пути в больших графах. Экспериментально подтверждено, что SQA на GPU превосходит классический имитационный отжиг по качеству найденного решения. Использование CuPy, и списков кандидатов обеспечило эффективную загрузку вычислительных ресурсов. В дальнейшем планируется изменить среду разработки на язык программирования C++ для ускорения алгоритма.

Список использованных источников

1. Kirkpatrick S. Optimization by simulated annealing / S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi // Science. – 1983. – V. 220, № 4598. – P. 671–680.
2. Наумов, И. Е. Построение Р-гиперграфов методом имитации отжига / И. Е. Наумов, Е. В. Хворостухина // Интеллектуальные системы. Теория и приложения. – URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=49337576> (дата обращения: 18.03.2026).
3. Соболев, А. И. Метод имитации отжига для решения задачи поиска кратчайшего пути / А. И. Соболев // Проблемы управления в социально-экономических и технических системах: материалы XXI Международной научно-практической конференции. В 2-х томах. – Саратов: Издательский центр "Наука", 2025. – С. 116–119. – URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=82648522> (дата обращения: 18.03.2026).
4. Quantum annealing by the path-integral Monte Carlo method: The two-dimensional random Ising model / R. Martoňák, G. E. Santoro, E. Tosatti // Physical Review B. – 2004. – V. 70, № 22. – P. 224203.
5. Quantum annealing in the transverse Ising model / T. Kadowaki, H. Nishimori // Physical Review E. – 1998. – V. 58, № 5. – P. 5355.

SIMULATED QUANTUM ANNEALING WITH GPU ACCELERATION FOR THE LARGE-SCALE SHORTEST PATH PROBLEM

A.I. Sobolev¹

¹*Saratov State Technical University named after Yu.A. Gagarin, Saratov
e-mail: sobalex03@mail.ru*

Abstract

A simulated quantum annealing (SQA) algorithm for solving the shortest path problem in large weighted graphs has been developed using the Python programming language. The method is based on the Monte Carlo path integral formalism and simulates quantum tunneling on a classical computer. GPU acceleration (CuPy), parallel processing of quantum replicas, and candidate lists are implemented. An experiment on large graphs (over 500 nodes) showed that SQA on a GPU achieves a solution close to the optimum with better convergence quality than the simulated annealing method.

Keywords: shortest path problem, simulated quantum annealing, simulated annealing, GPU acceleration, metaheuristic, parallel computing, quantum tunneling.