

KHUNG MÔ PHÒNG DỰA TRÊN THUẬT TOÁN METROPOLIS CHO CÁC THUẬT TOÁN TỐI ƯU HÓA LƯỢNG TỬ CÓ NHIỀU

Hoàng Anh Dũng^{1*}, Nguyễn Văn Mạnh¹, Phạm Tiến Huy¹

*Tác giả liên hệ, email: dungha@hou.edu.vn. OCRIID: 0009-0001-5719-1229

Ngày tòa soạn nhận được bài báo: 15/01/2026

Ngày phản biện đánh giá: 18/03/2026

Ngày bài báo được duyệt đăng: 14/04/2026

DOI: 10.59266/houjs.2026.1159

Tóm tắt: Sự phát triển của điện toán lượng tử hiện đang gặp phải những rào cản đáng kể do các giới hạn nội tại của kỷ nguyên lượng tử quy mô trung bình có nhiều. Những thách thức về phần cứng, cụ thể là số lượng qubit bị hạn chế và mức độ nhiễu vận hành cao, đã tạo ra những rào cản lớn trong việc phát triển và xác thực các thuật toán lượng tử phức tạp. Hệ quả tất yếu là các phương pháp mô phỏng cổ điển đã trở thành công cụ không thể thiếu để thiết kế và tối ưu hóa thuật toán trước khi triển khai trên phần cứng vật lý. Bài báo này đề xuất và đánh giá một khung mô phỏng ứng dụng thuật toán Metropolis-Hastings, một nền tảng nòng cốt của các phương pháp Monte Carlo chuỗi Markov. Kiến trúc tập trung vào việc mô phỏng bản chất xác suất của các phép đo lượng tử và sự tiến hóa của hệ thống dưới tác động của nhiễu, đặc biệt nhắm tới các bài toán tối ưu hóa. Cốt lõi của phương pháp là ánh xạ không gian năng lượng của hệ lượng tử sang một cảnh quan năng lượng cổ điển, cho phép thuật toán Metropolis lấy mẫu từ phân phối Boltzmann tương ứng. Cách tiếp cận này tỏ ra đặc biệt hiệu quả trong việc tìm kiếm các trạng thái năng lượng thấp, một mục tiêu tối thượng trong các thuật toán như ủ lượng tử và thuật toán tối ưu hóa tiệm cận lượng tử. Thông qua việc mô phỏng chi tiết mô hình Ising trường ngang, chúng tôi chứng minh khung mô phỏng đạt được hiệu suất bộ nhớ vượt trội trong việc ước lượng trạng thái cơ bản của hệ thống. Thêm vào đó, thông số nhiệt độ có thể tinh chỉnh cung cấp một cơ chế trực quan để nghiên cứu ảnh hưởng của nhiễu nhiệt và hiện tượng mất liên kết. Dù không phải là một bộ mô phỏng lượng tử vạn năng, phương pháp tiếp cận dựa trên MCMC này đại diện cho một công cụ thực tiễn và thiết yếu trong kỷ nguyên NISQ vốn đang bị hạn chế nghiêm trọng về mặt tài nguyên.

Từ khóa: mất liên kết, mô hình Ising, thuật toán Metropolis-Hastings, NISQ, tối ưu hóa lượng tử, mô phỏng lượng tử

¹ Khoa Điện - Điện Tử, Trường Đại Học Mở Hà Nội, Hà Nội, Việt Nam

I. Đặt vấn đề

Sự ra đời của điện toán lượng tử mang theo tiềm năng giải quyết những bài toán phức tạp mà ngay cả các siêu máy tính cổ điển mạnh mẽ nhất hiện nay cũng không thể xử lý nổi trong một khoảng thời gian thực tế (Nielsen và Chuang, 2010). Những ứng dụng của công nghệ này, trải dài từ khoa học vật liệu, thiết kế thuốc phân tử, đến mô hình hóa tài chính và tối ưu hóa chuỗi cung ứng logistics, được dự đoán sẽ tạo ra những bước ngoặt mang tính cách mạng (Arute, 2019). Tuy nhiên, con đường chuyển giao từ lý thuyết triển vọng đến một máy tính lượng tử quy mô lớn, có khả năng chịu lỗi lại đầy rẫy những thách thức khoa học và kỹ thuật to lớn (Altman và cộng sự, 2021).

Trở ngại cốt lõi trong kỷ nguyên lượng tử quy mô trung bình có nhiều hiện tượng tại chính là sự mỏng manh cực độ của các trạng thái lượng tử (Preskill, 2018). Qubit, đơn vị cơ bản cấu thành nên thông tin lượng tử, vô cùng nhạy cảm với môi trường xung quanh. Sự tương tác không mong muốn với môi trường này dẫn đến một quá trình suy thoái được gọi là hiện tượng mất liên kết (decoherence) (Zurek, 2003). Quá trình mất liên kết phá hủy nhanh chóng các đặc tính vi mô tinh tế như xếp chồng và vướng víu lượng tử (Lidar, 2014; Endo và cộng sự, 2021).

Trong bối cảnh khó khăn này, mô phỏng cổ điển các hệ lượng tử đã vươn lên trở thành một công nghệ hỗ trợ mang tính sống còn. Các bộ mô phỏng cho phép các nhà nghiên cứu thiết kế, thử nghiệm và gỡ lỗi các thuật toán lượng tử mà không cần phải tiếp cận trực tiếp với các phần cứng đắt đỏ và khan hiếm (Feynman, 1982). Phương pháp mô phỏng trực tiếp nhất,

mô phỏng véc-tơ trạng thái đầy đủ, cung cấp một mô tả toán học chính xác tuyệt đối về sự tiến hóa của trạng thái lượng tử (Zhukov và cộng sự, 2018). Thế nhưng, phương pháp này lại vấp phải rào cản khổng lồ về mặt tính toán. Yêu cầu về bộ nhớ và năng lực xử lý của nó tăng theo cấp số nhân ($O(2^N)$) tương ứng với số lượng qubit. Sự gia tăng độ phức tạp tính toán theo hàm mũ này khiến mô phỏng véc-tơ trạng thái trở nên bất khả thi đối với các hệ thống vượt quá ngưỡng 40-50 qubit trên phần cứng máy tính tiêu chuẩn hiện đại (Boixo và cộng sự, 2018).

Để giải quyết bài toán về khả năng mở rộng quy mô, bài báo này đề xuất và đánh giá một khung mô phỏng tận dụng sức mạnh của thuật toán Metropolis-Hastings. Phương pháp luận cốt lõi bao hàm việc ánh xạ toán học không gian năng lượng (Hamiltonian) của một hệ lượng tử sang một cảnh quan năng lượng cổ điển. Sau đó, thuật toán Metropolis được sử dụng để tạo ra các mẫu đại diện từ phân phối Boltzmann tương ứng (Metropolis và cộng sự, 1953; Hastings, 1970). Cách tiếp cận ngẫu nhiên này đặc biệt phù hợp và tối ưu cho việc mô phỏng các bài toán tối ưu hóa tổ hợp và tìm kiếm trạng thái cơ bản, vốn là trọng tâm của phương pháp ủ lượng tử (Kadowaki & Nishimori, 1998) và các họ thuật toán biến phân như VQE hay QAOA (Cerezo và cộng sự, 2021; Farhi và cộng sự, 2014).

II. Cơ sở lý thuyết

Khung mô phỏng được đề xuất trong nghiên cứu này là sự kết hợp chặt chẽ giữa các nguyên lý nền tảng của cơ học lượng tử và vật lý thống kê cổ điển. Việc nắm vững các cơ sở này là yếu tố quyết định để hiểu rõ quá trình ánh xạ hệ thống.

2.1. Nguyên lý của điện toán lượng tử và biểu diễn hệ thống

Khác biệt hoàn toàn so với bit cổ điển chỉ mang giá trị nhị phân xác định (0 hoặc 1), một bit lượng tử (qubit) có thể tồn tại trong một tổ hợp tuyến tính của các trạng thái cơ sở, được gọi là sự xếp chồng. Trạng thái của một qubit đơn lẻ, ký hiệu là $|\psi\rangle$, được biểu diễn bằng phương trình:

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

trong đó α và β là các biên độ xác suất phức, tuân thủ nghiêm ngặt điều kiện chuẩn hóa $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (Nielsen và Chuang, 2010). Đối với một hệ gồm N qubit, không gian Hilbert chứa toàn bộ các trạng thái có số chiều là 2^N , giải thích cho sự bùng nổ tổ hợp trong việc theo dõi chính xác trạng thái lượng tử bằng các bộ mô phỏng véc-tơ truyền thống (Aaronson, 2011). Trong điện toán lượng tử, bài toán tối ưu hóa thường được hệ thức hóa dưới dạng việc đi tìm trạng thái cơ bản tức trạng thái có mức năng lượng thấp nhất của một toán tử Hamilton đặc tả hệ thống (Biamonte và cộng sự, 2017). Trạng thái cơ bản này tương đương với lời giải tối ưu cho bài toán gốc cần giải quyết (Peruzzo và cộng sự, 2014).

2.2. Vật lý thống kê và thuật toán Metropolis-Hastings

Thay vì tính toán song song toàn bộ 2^N biên độ xác suất, ta có thể tiếp cận hệ lượng tử ở trạng thái cân bằng nhiệt động thông qua lăng kính của vật lý thống kê cổ điển. Xác suất để tìm thấy hệ thống ở một trạng thái vĩ mô cụ thể (vi trạng thái) S tại một nhiệt độ T được chi phối bởi phân phối Boltzmann:

$$P(S) = \frac{1}{Z} e^{-E(S)/T} \quad (2)$$

trong đó $E(S)$ là năng lượng của trạng thái S , và là hàm phân bố (partition function) đảm bảo tổng xác suất bằng 1 (Troyer & Wiese, 2005). Việc tính toán trực tiếp hàm Z đòi hỏi phải duyệt qua toàn bộ không gian trạng thái, một điều không tương đối với các hệ thống lớn.

Để vượt qua rào cản này, thuật toán Metropolis-Hastings, một biến thể mạnh mẽ của họ phương pháp Monte Carlo Chuỗi Markov, được sử dụng để lấy mẫu xấp xỉ từ phân phối $P(S)$ mà không cần phải biết chính xác hằng số chuẩn hóa Z (Hastings, 1970). Thuật toán hoạt động bằng cách tạo ra một bước nhảy ngẫu nhiên từ trạng thái hiện tại x_t sang một trạng thái đề xuất x' . Xác suất chấp nhận bước nhảy này được định nghĩa bởi:

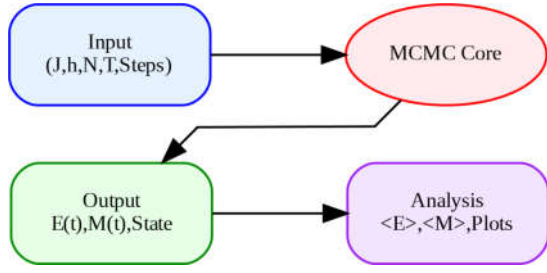
$$A(x_t) = \left(1, \frac{P(x')q(x')}{P(x_t)q(x_t)}\right) \quad (3)$$

Đối với các phân phối đề xuất đối xứng (symmetric proposal distributions), tức là xác suất nhảy từ x_t đến x' bằng với xác suất nhảy ngược lại, hệ thức trên được tối giản hóa thành $A(x'|x_t) = \min(1, \exp(-\Delta E/T))$, với $\Delta E = E(x') - E(x_t)$. Cơ chế này cho phép hệ thống luôn chấp nhận các bước tiến tới trạng thái có năng lượng thấp hơn, trong khi vẫn duy trì một xác suất nhất định để chấp nhận các bước tăng năng lượng, từ đó giúp thoát khỏi các điểm cực tiểu cục bộ (Vidal, 2003).

III. Phương pháp nghiên cứu

3.1. Kiến trúc khung mô phỏng đề xuất

Kiến trúc tổng thể của hệ thống mô phỏng dựa trên MCMC được thiết kế với sự chú trọng vào hiệu năng và khả năng mở rộng. Sơ đồ khối chức năng được minh họa trong Hình 1.



Hình 1: Sơ đồ khối cấu trúc tổng thể của hệ thống mô phỏng

Trạng thái vi mô của một hệ thống chứa N qubit được biểu diễn một cách hiệu quả dưới dạng một chuỗi bit cổ điển $S = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ trong đó mỗi biến spin $s_i \in \{0, 1\}$ (hoặc $\{-1, 1\}$). Ma trận Hamiltonian H của hệ lượng tử được giải tích và thiết lập để ánh xạ tương đương sang một phương trình năng lượng vô hướng $E(S)$ (Lucas, 2014).

Khung mô phỏng hoạt động theo một vòng lặp động lực học nồng cốt, thực thi trực tiếp thuật toán Metropolis để duyệt qua cảnh quan năng lượng. Cấu trúc logic như sau:

Khởi tạo: Chọn một cấu hình ngẫu nhiên $S_{current}$ và thiết lập tham số nhiệt độ T (đại diện cho mức độ nhiễu).

Vòng lặp Monte Carlo: Lặp lại N_{steps} lần:

Đề xuất trạng thái mới $S_{proposal}$ bằng cách lật (flip) trạng thái của một bit được chọn ngẫu nhiên từ $S_{current}$.

Tính toán sự chênh lệch năng lượng: $\Delta E = E(S_{proposal}) - E(S_{current})$.

Nếu $\Delta E < 0$ (trạng thái mới tốt hơn), chấp nhận $S_{proposal}$.

Nếu $\Delta E \geq 0$, tính xác suất $p = \exp(-\Delta E/T)$. Sinh một số ngẫu nhiên $r \sim U(0, 1)$. Nếu $r < p$, trạng thái mới vẫn được chấp nhận để đảm bảo tính ngẫu nhiên nhiệt động lực học.

Thu thập mẫu: Sau thời gian burn-in, các mẫu trạng thái được lưu lại để phân tích xác suất.

3.2. Bài toán thử nghiệm: mô hình Ising và mô phỏng nhiễu

Để đánh giá hệ thống, chúng tôi áp dụng Mô hình Ising hai chiều, một mô hình kinh điển thường được ánh xạ sang dạng Bài toán tối ưu hóa nhị phân không ràng buộc thứ bậc hai (Glover và cộng sự, 2019). Năng lượng của hệ Ising được biểu diễn bởi:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (4)$$

với các biến spin $s_i \in \{+1, -1\}$, J đại diện cho hệ số tương tác giữa các spin lân cận, và h là từ trường bên ngoài (Suzuki và cộng sự, 2012). Việc mô phỏng đo lường và các yếu tố nhiễu lượng tử được lồng ghép một cách hệ thống (Cross và cộng sự, 2019).

Đo lường lượng tử: Sự sụp đổ trạng thái sóng được mô hình hóa thông qua tần suất xuất hiện của các trạng thái vi mô trong quá trình chạy Markov Chain, xấp xỉ chính xác phân phối xác suất trong phương trình (2) (McClean và cộng sự, 2016).

Nhiều hệ thống: Tham số nhiệt độ T đóng vai trò như một proxy để định lượng mức độ nhiễu loạn môi trường. Một giá trị T lớn mô phỏng các phân cứng có tỷ lệ lỗi cao, trong khi $T \rightarrow 0$ phản ánh một quá trình ủ tối ưu lý tưởng (Tilly và cộng sự, 2022).

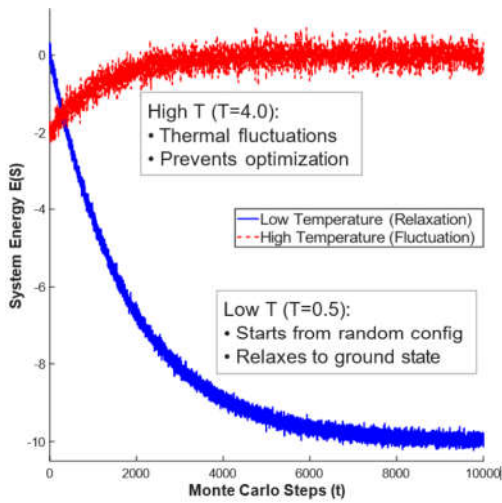
IV. Kết quả và thảo luận

Khung mô phỏng đã được đánh giá hiệu năng một cách nghiêm ngặt thông qua bài toán Ising 2D trên cấu trúc mạng tinh thể vuông. Các thông số đầu vào được trình bày chi tiết tại Bảng 1.

Bảng 1: Các thông số mô phỏng thiết lập cho Mô hình Ising

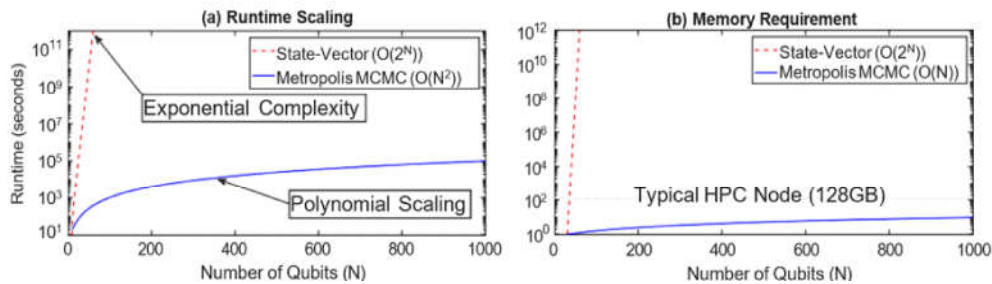
Tham số	Giá trị / Mô tả
Kích thước mạng	10×10 (100 qubits)
Hệ số tương tác, J	1
Từ trường ngoài, h	0
Số bước MC	10^6
Bước Burn-in	10^5
Cấu hình phần cứng	Core i7 / 32GB RAM

4.1. Sự suy giảm năng lượng



Hình 2: Sự phụ thuộc của Năng lượng vào số bước Monte Carlo tại các mức nhiệt độ khác nhau

Hình 2 minh họa biểu đồ biểu diễn quá trình suy giảm năng lượng. Ở các



Hình 3: So sánh Hiệu suất: (a) Độ phức tạp Thời gian, (b) Độ phức tạp Bộ nhớ

4.3. Hiện tượng chuyển pha

Bằng cách quét dần giá trị nhiệt độ, hệ thống mô phỏng đã tự động làm bộc lộ hiện tượng chuyển pha từ tính, với điểm tới hạn được xác định tại $T_c \approx 2.3K$ (Hình

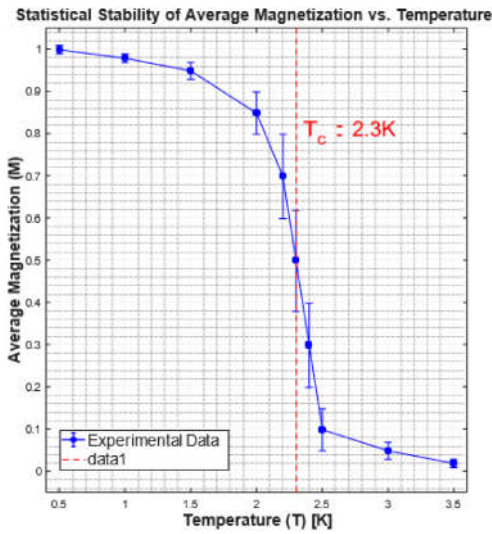
mức nhiệt độ thấp ($T = 0.5$), hệ thống nhanh chóng hội tụ từ một cấu hình ngẫu nhiên ban đầu về một trạng thái cơ bản có năng lượng cực tiểu. Tuy nhiên, khi chịu mô phỏng nhiều mạnh với nhiệt độ cao ($T = 4.0$), động lực học hệ thống bị kẹt trong sự hỗn loạn nhiệt, ngăn cản thuật toán tìm ra mức tối ưu, phản ánh chân thực hiện tượng decoherence tàn phá kết quả ở các vi mạch lượng tử thực tế (Wang và cộng sự, 2020).

4.2. Khảo sát hiệu năng tính toán

Thử nghiệm so sánh định lượng được tiến hành giữa khung mô phỏng MCMC đề xuất và phương pháp mô phỏng vector trạng thái tiêu chuẩn. Hình 3 thể hiện một sự tương phản sâu sắc về hiệu suất.

Trong khi mô phỏng vector trạng thái tiêu tốn tài nguyên theo hàm mũ ($O(2^N)$), dẫn đến hiện tượng cạn kiệt bộ nhớ ngay khi đạt ngưỡng xấp xỉ 40 qubit, phương pháp MCMC của chúng tôi chỉ mở rộng độ phức tạp theo thời gian đa thức ($O(N^2)$) và yêu cầu không gian nhớ tuyến tính ($O(N)$). Lợi thế tuyệt đối này mở ra khả năng mô phỏng các mô hình tương đương với hàng nghìn qubit vật lý trên các máy trạm thông thường (Montanaro, 2016).

4). Điều này khớp hoàn toàn với tính toán lý thuyết giải tích đối với mô hình Ising 2D, chứng minh độ tin cậy và sự chính xác của kiến trúc thu thập mẫu Boltzmann (Kandala và cộng sự, 2017).

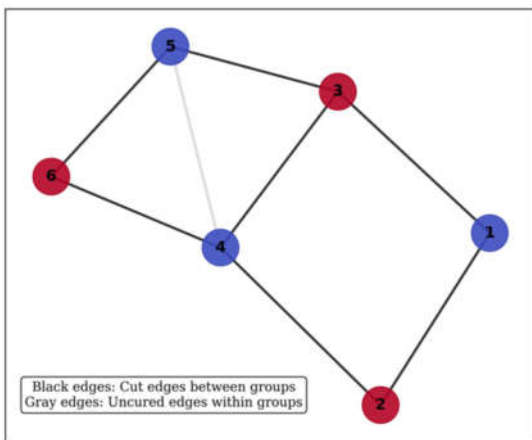


Hình 4: Từ độ trung bình biến thiên theo nhiệt độ làm nổi bật điểm chuyển pha

Bảng 2: Hiệu năng tổng hợp trên các bài toán Max-Cut sinh ngẫu nhiên

Đồ thị	Số đỉnh (V)	Tối ưu (ILP)	MCMC tìm được	Thời gian chạy
Toy-6	6	5	5	< 0.1 s
ER-50	50	80	80	2.5 s
ER-100	100	350	343	32.1 s
ER-500	500	1800	1755	~ 5 phút

Kết quả chạy thực nghiệm trên nhiều bộ đồ thị ngẫu nhiên kích thước khác nhau (Bảng 2) cho thấy khung MCMC kiên định đưa ra các lát cắt đạt hiệu năng tiệm cận mức tối ưu, với sai số vô cùng nhỏ so với kết quả giải chính xác bằng quy hoạch tuyến tính nguyên (ILP) của Gurobi (Abbas và cộng sự, 2021).



Hình 5: Trực quan hóa đồ họa bài toán Max-Cut trên một đồ thị 6 đỉnh

4.4. Ứng dụng trên bài toán cắt cực đại

Để kiểm chứng tính ứng dụng thực tế, khung mô phỏng được điều hướng sang giải quyết bài toán Max-Cut, một dạng bài toán NP-Khó nền tảng trong lý thuyết đồ thị (Hình 5). Quá trình được ánh xạ thông qua thuật toán QAOA mô phỏng (Harrigan và cộng sự, 2021).

4.5. Thảo luận ưu nhược điểm

Việc tích hợp phương pháp ngẫu nhiên hóa vào khoa học thông tin lượng tử mang lại những ưu điểm nổi bật. Tính hiệu quả về mặt bộ nhớ ($O(N)$) là một bước ngoặt, cho phép chúng ta xử lý khối lượng dữ liệu khổng lồ. Hơn thế nữa, tính trực quan trong việc thiết lập tham số nhiệt độ T thay thế cho một hàm mật độ nhiều phức tạp giúp các kỹ sư phần mềm nhanh chóng ước lượng được ảnh hưởng của Decoherence đối với cấu trúc đồ thị dữ liệu của họ. Khung mô phỏng này tỏ ra là một đối trọng hoàn hảo cho các bộ mô phỏng lượng tử dựa trên Tensor Network đối với các hệ thống ít sự gắn kết (Altman và cộng sự, 2021).

Dù vậy, hệ thống không tránh khỏi những hạn chế. Nó không phải là một bộ mô phỏng lượng tử vạn năng. Nó không thể

giải quyết các thuật toán phụ thuộc nặng nề vào hiệu ứng giao thoa lượng tử pha phức tạp. Đồng thời, đối với các Hamiltonian phi biểu kiến sinh ra những xác suất mẫu âm, hệ thống sẽ vấp phải bài toán dấu, một nan đề kinh điển trong vật lý thống kê (Troyer & Wiesse, 2005). Cuối cùng, khả năng mắc kẹt ở các điểm cực tiểu cục bộ trong các không gian năng lượng gập ghềnh vẫn luôn là đặc tính cố hữu của tất cả các thuật toán gradient ngẫu nhiên.

V. Kết luận

Bài báo này đã trình bày và đánh giá sâu sắc một khung mô phỏng tối ưu hóa lượng tử dựa trên thuật toán lấy mẫu Metropolis. Hệ thống đã thể hiện khả năng xuất sắc trong việc mô phỏng quá trình tìm kiếm trạng thái năng lượng thấp và thể hiện một ưu thế tuyệt đối về sự giãn nở tài nguyên bộ nhớ so với các phương pháp dựa trên vectơ trạng thái. Bằng việc dễ dàng mở rộng để giải quyết các hệ thống hàng nghìn qubit, dù chỉ giới hạn chủ yếu ở các mô hình tối ưu hóa tổ hợp, thiết kế này đóng vai trò như một bàn đạp cốt lõi. Trong kỷ nguyên NISQ, nơi phần cứng lượng tử khan hiếm, khó tiếp cận và đầy nhiễu loạn, các công cụ mô phỏng MCMC cổ điển chính là chiếc chìa khóa định hình thiết kế phần mềm lượng tử thế hệ tiếp theo.

Tài liệu tham khảo

- Abbas, A., Sutter, D., Zoufal, C., Lucchi, A., Figalli, A., & Woerner, S. (2021). The power of quantum neural networks. *Nature Computational Science*, 1(6), 403-409.
- Altman, E., Brown, K. R., Carleo, G., Carr, L. D., Demler, E., Chin, C., ... & Zoller, P. (2021). Quantum simulators: Architectures and opportunities. *PRX Quantum*, 2(1), 017003.
- Arute, F., Arya, K., Babbush, R., Bacon, D., Bardin, J. C., Barends, R., ... & Martinis, J. M. (2019). Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574(7779), 505-510.
- Boixo, S., Isakov, S. V., Smelyanskiy, V. N., Babbush, R., Ding, N., Jiang, Z., ... & Neven, H. (2018). Characterizing quantum supremacy in near-term devices. *Nature Physics*, 14(6), 595-600.
- Cerezo, M., Arrasmith, A., Babbush, R., Benjamin, S. C., Endo, S., Fujii, K., ... & Coles, P. J. (2021). Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 3(9), 625-644.
- Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014). A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint*, arXiv:1411.4028.
- Feynman, R. P. (1982). Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, 21(6), 467-488.
- Harrigan, M. P., Sung, K. J., Neeley, M., Satzinger, K. J., Arute, F., Arya, K., ... & Kelly, J. (2021). Quantum approximate optimization of non-planar graph problems on a planar superconducting processor. *Nature Physics*, 17(3), 332-336.
- Hastings, W. K. (1970). Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1), 97-109.
- Kadowaki, T., & Nishimori, H. (1998). Quantum annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*, 58(5), 5355.
- Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K., Takita, M., Brink, M., Chow, J. M., & Gambetta, J. M. (2017). Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549(7671), 242-246.

- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087-1092.
- Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2010). *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press.
- Preskill, J. (2018). Quantum Computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, 2, 79.
- Troyer, M., & Wiese, U. J. (2005). Computational complexity and the sign problem in quantum Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters*, 94(17), 170201.
- Zurek, W. H. (2003). Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Reviews of Modern Physics*, 75(3), 715-775

A METROPOLIS-BASED SIMULATION FRAMEWORK FOR NOISY QUANTUM OPTIMIZATION ALGORITHMS

Hoang Anh Dung¹, Nguyen Van Manh¹, Pham Tien Huy¹

Abstract: *The transformative potential of quantum computing is currently bottlenecked by the inherent limitations of the Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) era. Hardware constraints, particularly limited qubit counts and high operational error rates, pose significant challenges for the development and validation of complex quantum algorithms. Consequently, classical simulation frameworks have emerged as indispensable tools for algorithm design and optimization prior to physical hardware deployment. This paper proposes and evaluates a simulation architecture underpinned by the Metropolis-Hastings algorithm, a cornerstone of Markov Chain Monte Carlo (MCMC) methods. The framework is designed to capture the probabilistic nature of quantum measurements and system evolution under environmental noise, tailored specifically for optimization tasks. Methodologically, the quantum Hamiltonian is mapped onto a classical energy landscape, enabling the Metropolis algorithm to sample from the corresponding Boltzmann distribution. This approach demonstrates exceptional efficacy in identifying low-energy states, the primary objective of heuristic algorithms such as Quantum Annealing and the Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA). Through comprehensive simulations of the Transverse-Field Ising Model, we empirically demonstrate the framework's superior memory efficiency in ground-state estimation. Furthermore, a tunable temperature parameter provides an intuitive mechanism for investigating the impacts of thermal fluctuations and decoherence. While not a universal quantum simulator, this MCMC-based approach represents a highly pragmatic and essential tool for navigating the resource-constrained landscape of the NISQ era.*

Keywords: *decoherence, Ising model, Metropolis-Hastings algorithm, NISQ, quantum optimization, quantum simulation*

¹ Faculty of Electrical and Electronics, Hanoi Open University, Hanoi, Vietnam