

Министерство науки и высшего образования РФ
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
Математический факультет
Направление 02.04.01 Математика и компьютерные науки
Профиль «Математическое и компьютерное моделирование»

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Вариационный квантовый алгоритм с оптимизацией
методом отжига

Автор:
Алешин Д.А.
Подпись:

Научный руководитель:
д. ф.-м. н. Цирулёв А.Н.
Подпись:

Допущен к защите:
Руководитель ООП: Цветков В.П.

(подпись, дата)

Тверь 2025

Оглавление

Введение	3
1 Вариационные квантовые алгоритмы: общая схема	4
1.1 Базис Паули	4
1.1.1 Матричная форма	4
1.1.2 Операторная форма	6
1.2 Целевая функция и анзац	6
1.3 Общая схема алгоритма	6
1.4 Оптимизация	6
2 Вариационный квантовый алгоритм на основе метода от- жига	7
2.1 Метод отжига	7
2.2 Алгоритм	7
2.3 Сравнительные результаты тестирования	7
Заключение	7
Список литературы	8
Приложение C#	9

Введение

Глава 1

Вариационные квантовые алгоритмы: общая схема

1.1 Базис Паули

1.1.1 Матричная форма

Матрицы Паули, обозначаемые как σ_x , σ_y и σ_z , представляют собой набор эрмитовых и унитарных 2×2 матриц. Эти матрицы играют центральную роль в описании квантовых систем с полуцелым спином, таких как электроны, и занимают важное место в теории представлений группы $SU(2)$. Их использование охватывает широкий спектр задач в квантовой механике и квантовой теории поля.

Матрицы Паули определяются следующим образом:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эти матрицы имеют ряд уникальных свойств, включая эрмитовость ($\sigma_i = \sigma_i^\dagger$) и унитарность ($\sigma_i \sigma_i^\dagger = I$). Они также удовлетворяют специфическим соотношениям коммутации и антикоммутации, что делает их полезными для описания квантовых преобразований и взаимодействий.

Коммутационные соотношения для матриц Паули выражаются следующим образом:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k,$$

где ϵ_{ijk} — символ Леви-Чивиты. Эти соотношения играют важную роль в понимании квантовой динамики и описании вращений в спиновых системах.

Антикоммутационные соотношения для матриц Паули выглядят следующим образом:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I,$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, а I — единичная матрица. Эти свойства широко используются в квантовых вычислениях и других приложениях, где важна как коммутация, так и антикоммутация операторов.

Матрицы Паули находят применение в описании операторов спина. Оператор спина частицы можно выразить через линейную комбинацию матриц Паули:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma},$$

где \vec{S} — оператор спина, \hbar — приведенная постоянная Планка. Это позволяет моделировать взаимодействие спина с внешними полями и другими квантовыми системами.

В квантовой информации матрицы Паули формируют базис для всех эрмитовых матриц размерности 2×2 . Любой эрмитов оператор может быть представлен как:

$$A = a_0I + a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z,$$

где a_0, a_x, a_y, a_z — вещественные коэффициенты. Это представление используется в квантовой томографии и других вычислительных задачах.

1.1.2 Операторная форма

Перейдем к рассмотрению операторной формы матриц Паули в контексте квантовой системы из n кубитов. Каждый кубит связан с двумерным Гильбертовым пространством \mathcal{H} . Для системы из n кубитов, полное пространство \mathcal{H}_n образуется как тензорное произведение индивидуальных пространств, и его размерность равна 2^n .

Теперь определим операторную форму матриц Паули в этом пространстве. Для ортонормированного базиса $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, соответствующего каждому кубиту, мы можем выразить операторы Паули как:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_0 &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{\sigma}_1 = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \\ \hat{\sigma}_2 &= -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|, \quad \hat{\sigma}_3 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|,\end{aligned}$$

Эти операторы эрмитовы и унитарны и составляют основу в \mathcal{H} . Каждый из них может быть выражен в виде тензорного произведения операторов на отдельных кубитах:

$$\hat{\sigma}_{k_1 \dots k_n} = \hat{\sigma}_{k_1} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{k_n},$$

где $k_i \in \{0, 1, 2, 3\}$. Таким образом, операторная форма матриц Паули позволяет описывать сложные квантовые состояния и преобразования в системах из нескольких кубитов.

1.2 Целевая функция и анзац

1.3 Общая схема алгоритма

1.4 Оптимизация

Глава 2

Вариационный квантовый алгоритм на основе метода отжига

2.1 Метод отжига

2.2 Алгоритм

2.3 Сравнительные результаты тестирования

Заключение

Список литературы

Приложение С#