**Исследование аппаратно-эффективных анзацев для вариационных квантовых алгоритмов.**

В области квантовых вычислений в настоящее время физически реализованы лишь шумными квантовыми устройствами среднего размера (в англоязычной литературе Noisy Intermidiate Scale Quantum NISQ). Такие устройства способные выполнять преобразования лишь на небольших квантовых системах, с ограниченным максимальным размером запутанных подсистем, при этом подвержены ошибкам в ходе вычислений.

Прикладное использование NISQ устройств в виду описанных ограничений невозможно для реализации крупных популярных квантовых алгоритмов, таких как алгоритм Шора и алгоритм Гровера, так как для них требуется больше ресурсов, чем NISQ устройства могут предоставить. Таким образом для практического использования существующих технологий, а так же устройств, которые предположительно появятся в ближайшем будущем, наиболее перспективными представляются гибридные алгоритмы, где часть операций выполняется на классическом компьютере а подзадачи, сложные для классической обработки, выполняются на квантовом устройстве. Алгоритмы, реализуемые на таких гибридных устройствах называются вариационными квантовыми алгоритмами ВКА.

ВКА считаются потенциально перспективными для решения ряда оптимизационных задач, а так же задач из области физики многих тел, в частности задач квантовой химии. Однако, ВКА нуждаются в детальном исследовании, так как их применение связано с рядом проблем, включая сложность оптимизируемости, точность результатов и эффективность их применения в сравнении с классическими алгоритмами. Более того сложной задачей является эффективная физическая реализация ВКА.

Эффективное использование доступных ресурсов возможно благодаря переиспользованию физических кубитов многократно в процессе реализации одной квантовой схемы. Такой подход позволяет значительно расширить размерность параметризованной части схемы ВКА, по сравнению с размерностью имеющейся физической системой кубитов, на которой реализуется алгоритм. Повышение размерности схем крайне важно для реализации ВКА на квантовых шумных устройствах среднего размера.

В данной работе изучается использование разновидностей зацикленных систем для реализации аппаратно-эффективных квантовых схем для ВКА и возможность их эффективного применения. На данный момент проведён обзор литературы в предметной области. Изучен и описан способ применения ВКА к различным задачам, с фокусом на решение квантовохимических задач поиска основного состояния молекул. Изучены и описаны основные проблемы использования ВКА и методы борьбы с ними. Изучены различные виды параметризованной части квантовой схемы, называемые анзацем. Так же изучены методы создания аппаратно-эффективных анзацев с помощью зацикленных схем и возможные итоговые конфигурации.

Для численного анализа различных аппаратно-эффективных архитектур анзаца ВКА с переиспользованием кубитов, реализуемых с применением зацикленных схем проводится моделирование решения с помощью ВКА оптимизационных задач поиска основного энергетического состояния квантовых систем с заданным гамильтонианом. Моделирование проводится на языке программирования python с использованием специализированного модуля для квантовых вычислений PennyLane.

Для анализа задач различной размерности рассмотрен гамильтониан Швингера, так как его можно представить в общем виде и задать для произвольной размерности, при этом он имеет сложную геометрию связей, что критично сложно для рассматриваемого вида анзацев. Для анализа эффективности практического применения рассмотрены гамильтонианы двухатомных молекул H2 и LiH и трёхатомных молекул Н2O и LiSH.

Проведено сравнение точности поиска основного состояния с использованием анзацев различной глубины и архитектуры для квантовых систем различной размерности. В результате численных экспериментов показано, что для поиска основного состояния структур со сложной геометрией связей необходимо использовать многослойные аппаратно-эффективные анзацы, при этом лучшее качество показывают однородные анзацы, состоящие из слоёв с одинаковой геометрией. Проведено численное сравнение нескольких оптимизаторов. Так же рассмотрены различные стратегии инициализации начальных параметров анзаца ВКА.