

Задания заключительного этапа (полуфинал)  
по направлению «**Квантовые технологии**»

Категория участия:  
«Магистратура/специалитет»  
(для поступающих в аспирантуру)

Февраль 2024

### Задача 1. (50 баллов)

#### Вариационный алгоритм симуляции молекул на квантовом компьютере

##### Общая формулировка

Одна из главных задач вычислительной квантовой химии состоит в определении квантовых эффектов, определяющих структуру и свойства молекул. Точные молекулярные свойства можно рассчитать на основе волновой функции, описывающей взаимодействующие электроны в молекуле. Электронная волновая функция удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (1)$$

Уравнение (1) является задачей на поиск собственных значений, в которой значения энергии являются собственными значениями гамильтониана. Зачастую наибольший интерес представляет энергия основного состояния (минимальное собственное значение). Тогда, задача поиска энергии основного состояния может быть записана как задача оптимизации следующим образом

$$E_{\min} = \min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle, \quad (2)$$

где  $|\psi(\theta)\rangle$  – волновая функция зависящая от набора параметров  $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots)$ . Идея вариационного метода поиска основного состояния молекул состоит в последовательном приготовлении состояний  $|\psi(\theta)\rangle$  на квантовом компьютере при помощи параметризованных квантовых вентилях, и измерения на-

блюдаемой  $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ . Тогда, при помощи классических алгоритмов оптимизации, минимизируя значение наблюдаемой  $E(\theta)$  возможно получить минимальное значение энергии  $E_{\min}$ , а также основное состояние молекулы.

**1. (10 баллов)** В формализме вторичного квантования, электронная волновая функция молекулы записывается в представлении чисел заполнения. В этом представлении гамильтониан записывается как

$$H = \sum_{p,q} h_{pq} c_p c_q^\dagger + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} c_p^\dagger c_q^\dagger c_r c_s, \quad (3)$$

где  $c, c^\dagger$  – операторы рождения и уничтожения электронов соответственно, а коэффициенты  $h_{pq}, h_{pqrs}$  обозначают одно- и двухэлектронные кулоновские интегралы, вычисляемые с использованием орбиталей Хартри-Фока. Прямая реализация измерения наблюдаемой  $E(\theta)$  на кубитном квантовом процессоре невозможна без преобразования фермионных операторов в (3) в операторы Паули. Пользуясь преобразованием Йордана-Вигнера получить вид гамильтониана (3) в виде линейной комбинации тензорных произведений операторов Паули

$$H = \sum_i \alpha_i P_i, \quad P_i \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes N}. \quad (4)$$

В качестве ответа в этом задании загрузите файл с подробным описанием хода решения задачи в формате pdf. (*Задание с ручной проверкой.*)

**2. (20 баллов)** Одним из наиболее эффективных методов приготовления параметризованных волновых функций  $|\psi(\theta)\rangle$  на квантовом компьютере является т.н. метод унитарных связанных кластеров (unitary coupled cluster, англ.). Суть метода в приготовлении параметризованных состояний следующего вида

$$|\psi(\theta)\rangle = \exp(T_1 + T_2) |0\rangle, \quad (5)$$

где

$$T_1 = \sum_{pq} \theta_{pq} (c_q^\dagger c_p - c_p c_q^\dagger) \quad (6)$$

$$T_2 = \sum_{pqrs} \theta_{pqrs} (c_p^\dagger c_q^\dagger c_r c_s - c_s^\dagger c_r^\dagger c_q c_p), \quad (7)$$

где  $\{\theta_{pq}, \theta_{pqrs}\}$  – оптимизируемые параметры. Унитарность оператора приготовления  $\exp(T_1 + T_2)$  позволяет реализовать его на квантовом компьютере. Пользуясь преобразованием Йордана-Вигнера и приближением Сузуки-Троттера требуется построить представление оператора приготовления состояний (5) в виде гейтовой схемы. Каким образом может быть минимизирована глубина такой схемы?

В качестве ответа в этом задании загрузите файл с подробным описанием хода решения задачи в формате pdf.

(*Задание с ручной проверкой.*)

### 3. (20 баллов)

Построить гейтовую схему для гамильтониана молекулы  $H_2$  заданного в виде (4):

$$H_{H_2} = \alpha_0 II + \alpha_1 ZZ + \alpha_2 ZI + \alpha_3 IZ + \alpha_4 XX, \quad (8)$$

где  $\alpha_0 = -1.0524$ ,  $\alpha_1 = 0.01128$ ,  $\alpha_2 = 0.3979$ ,  $\alpha_3 = 0.3979$ ,  $\alpha_4 = 0.1809$ . Произвести численную симуляцию гейтовой схемы и при помощи алгоритмов оптимизации (BFGS, SPSSA, Adam, Nelder-Mead, ...) найти энергию основного состояния.

Решение данной задачи предполагает разработку алгоритма при помощи любого языка программирования (Python, C/C++, ...). В качестве ответа в этом задании загрузите файл с разработанным алгоритмом, например, в формате jupyter notebook, если использовался язык разработки Python. Рекомендуется использование библиотек квантовых вычислений для языка Python (Qiskit, PennyLane, Cirq, ...).

*(Задание с ручной проверкой.)*