



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Разработка автоматизированного метода настройки вариационных алгоритмов для квантового компьютера

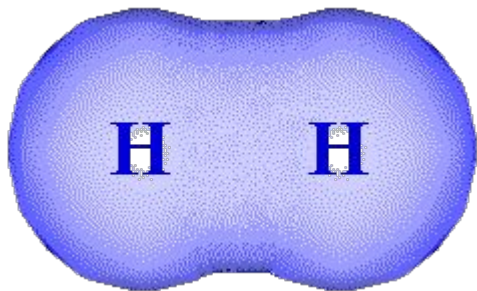
Студент: Самарин Артур Олегович, М3437

Научный руководитель: Чивилихин Даниил Сергеевич, н.с., к.т.н.
(ФИТиП)

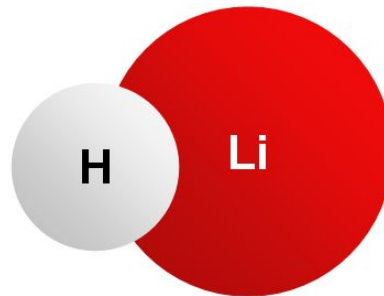
Научный консультант: Кириенко Александр, с.н.с., PhD (ФТФ)

Задача

- H - эрмитова комплекснозначная матрица
- Найти наименьшее собственное значение с заданной точностью
- H - большая, размер $2^N \times 2^N$, но разреженная
- Не решается классическими методами



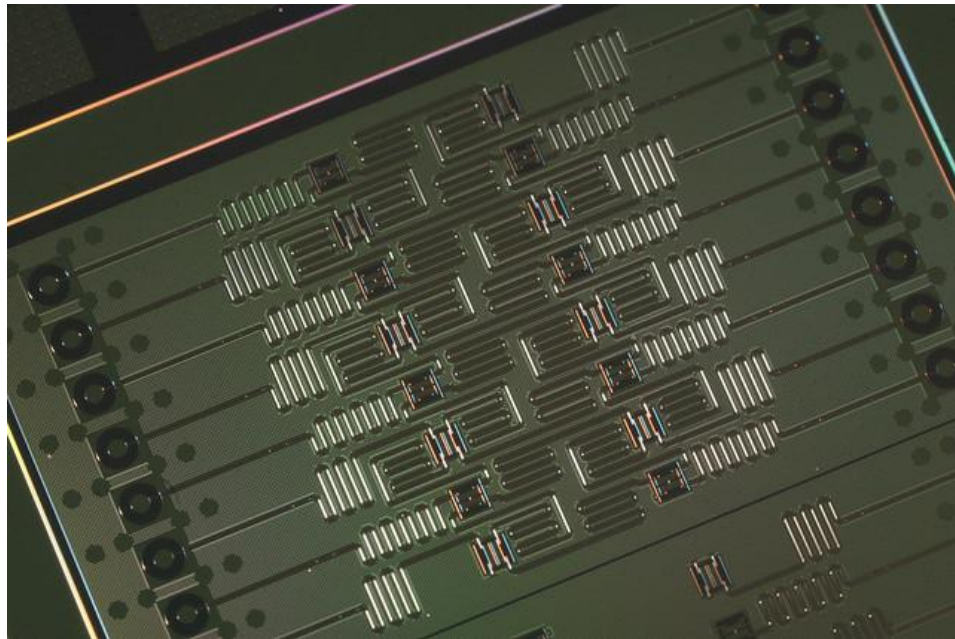
Источник изображения:
<http://nobel.scas.bcit.ca/chem0010/unit4/npcov.htm>



Источник изображения:
https://en.wikipedia.org/wiki/Lithium_hydride 2/15

Актуальность

- Квантовые компьютеры совершенствуются (IBM, Intel, Rigetti, Google, D-Wave)
- Исследования алгоритмов с участием квантовых компьютеров актуальны

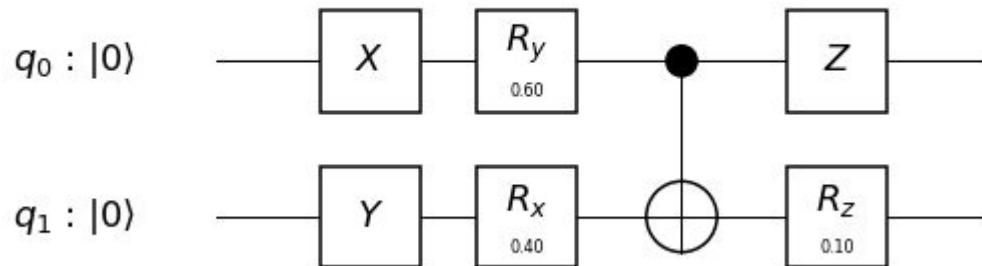


Источник изображения:

https://www.flickr.com/photos/ibm_research_zurich/34315884280/in/album-72157663611181258/

Квантовый компьютер

- N - число кубитов
- Состояние (волновая функция)
- вектор $|\psi\rangle$ из комплексных чисел, длина вектора - 2^N
- $\langle\psi|\psi\rangle = 1$
- Состояния изменяются вентилями
- Каждый вентиль - унитарный оператор

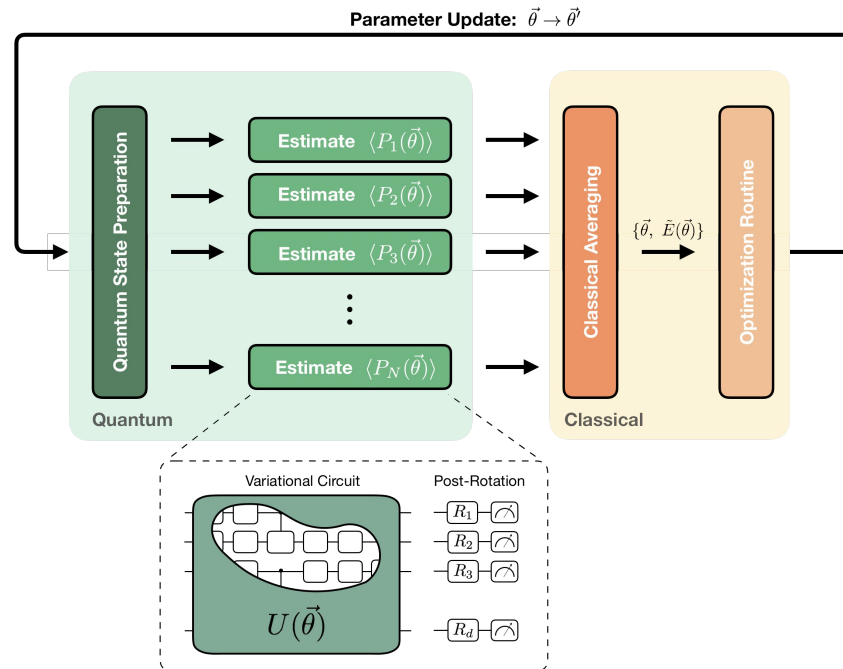


VQE (Variational quantum eigensolver)

Алгоритм минимизации

$$\langle \psi | H | \psi \rangle$$

- Ищем $|\psi\rangle$ в виде $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta_1 \dots \theta_n) |\psi_0\rangle$
- $\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \rightarrow \min$
- Использует и классический, и квантовый компьютер
- Алгоритм настраивается: $U(\theta_1 \dots \theta_n)$
- **Как выбирать U ?**



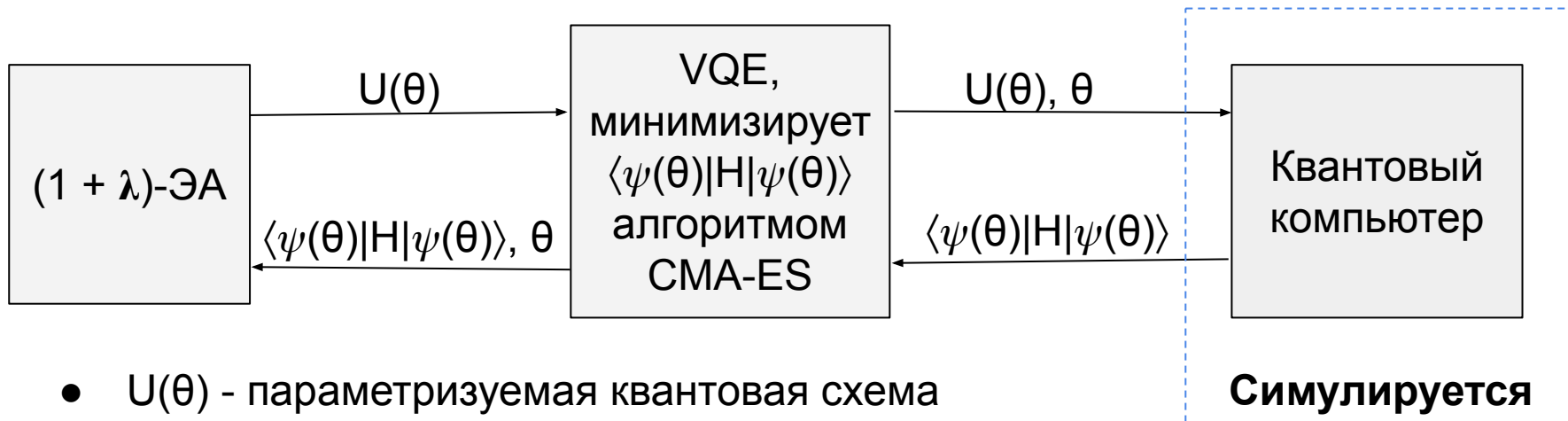
Источник изображения:

Сao Y. [и др.]. Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing // arXiv:1812.09976 [quant-ph]. 5/15 2018.

Новизна, цель и задачи

- **Новизна** этой работы заключается в том, что последовательность квантовых вентилей, соответствующая унитарному оператору, имеет не какой-либо фиксированный вид, а вырабатывается эволюционным алгоритмом. Это позволит получить более простые схемы, а значит, менее подверженные шуму.
- **Цель:** разработать автоматизированный метод настройки параметризованной квантовой схемы в алгоритме VQE с использованием эволюционного подхода
- **Задачи:** разработать разные варианты метода, сравнить их эффективность, выбрать лучший из вариантов

Схема работы предложенного метода



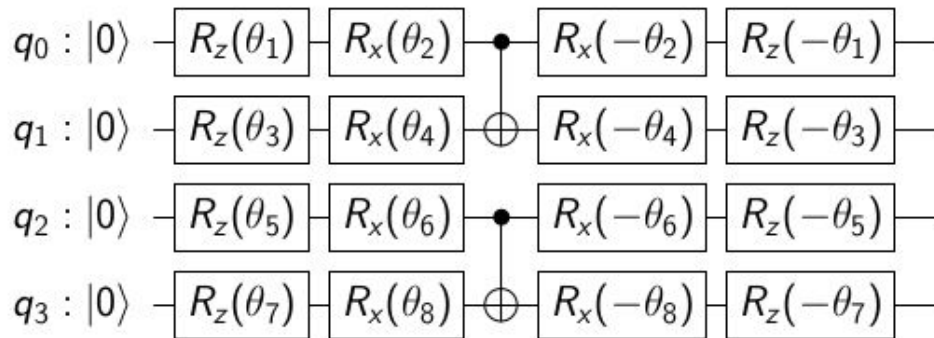
- $U(\theta)$ - параметризуемая квантовая схема
- θ - вектор численных параметров схемы
- $\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ - ожидаемое значение (минимизируемая функция)
- $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$

Эволюционный алгоритм ($1 + \lambda$)

```
x_best ← начальная особь
while не достигнут критерий останова:
    x_iteration_best ← x_best
    for i in 1... $\lambda$ :
        x ← mutate(x_best)
        if f(x) < f(x_iteration_best):
            x_iteration_best ← x
    x_best ← x_iteration_best
return x_best
```


Эволюционный алгоритм ($1 + \lambda$)

Особь: квантовая схема с параметрами (представляется списком вентилях или блоков из них)



Мутации:

- Добавить 1 вентиль в схему
- Добавить блок вентилях
- Удалить элемент из схемы

Функция стоимости:

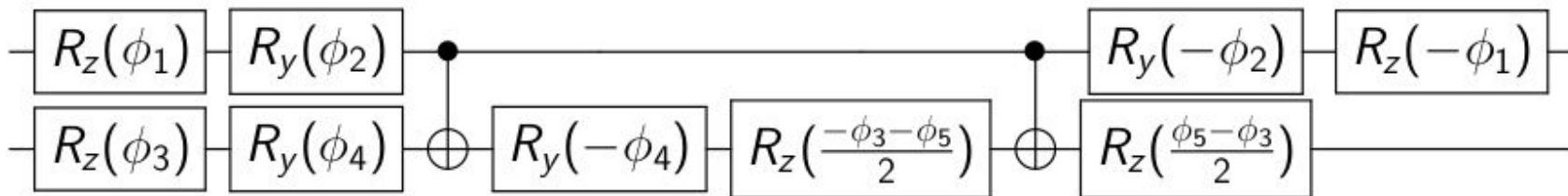
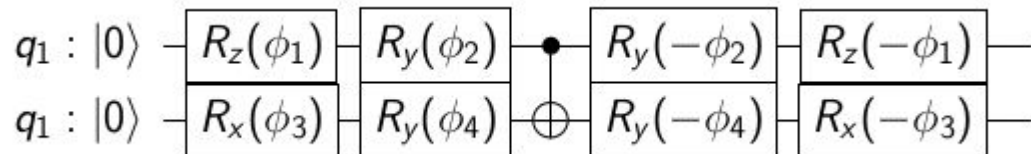
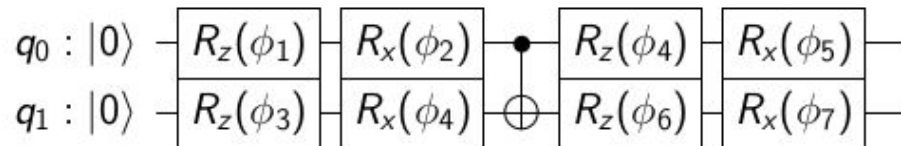
$$\min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$$

где $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_0\rangle$
 $U(\theta)$ - особь

Выбор блоков

Принципы:

- Минимизация числа параметров
- Эффективность метода
- Блок может ничего не делать



Оптимизации

- Параллельное вычисление функции стоимости для различных особей
- Фиксация части схемы (TODO)
- Ограничение бюджета поиска оптимальных вариационных параметров (TODO)

Реализация

Технологии:

- Python 3
- C++ с использованием QuEST для симуляции квантового компьютера
- Qiskit для рисования квантовых схем

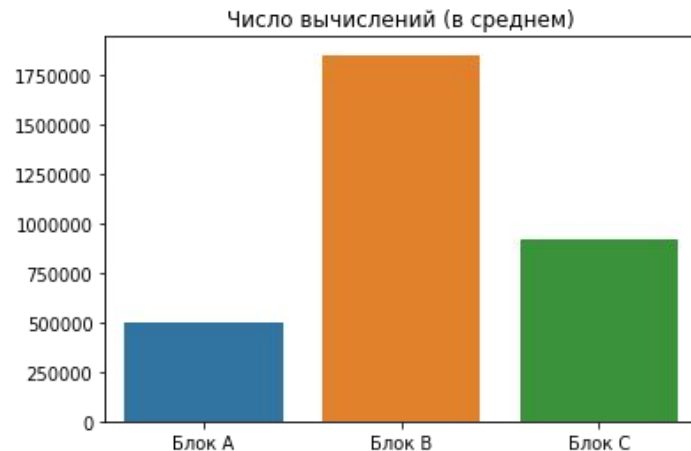
Источники данных:

- Гамильтонианы молекул H_2 , LiH , BeH_2 предоставлены научным консультантом

Github: <https://github.com/arthur-samarin/QuantumEigensolver>

Результаты

- Оценена эффективность различных вариантов метода на 4-кубитном гамильтониане LiH
- Выбран наилучший из них
- Схемы проще, чем в Kandal A. [и др.], для 8-кубитного BeH_2 13 двухкубитных операции против 49



Заключение

- Разработаны различные варианты автоматизированного метода настройки вариационной квантовой схемы в алгоритме VQE с использованием эволюционного подхода
- Оценена эффективность различных вариантов метода на 4-кубитном гамильтониане LiH , из вариантов был выбран наилучший
- Получившиеся схемы оказались проще, чем в Kandala A. [и др.].
Hardware-efficient Variational Quantum Eigensolver for Small Molecules and Quantum Magnets // Nature. 2017. № 7671 (549). С. 242–246.

Спасибо за внимание