

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОГЛАВЛЕНИЕ.....	4
ВВЕДЕНИЕ.....	6
1 КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ЗАДАЧА ПОИСКА ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ И ЭВОЛЮЦИОННЫЕ АЛГОРИТМЫ.....	8
1.1 Квантовые вычисления.....	8
1.1.1 Модель квантовых вычислений.....	8
1.1.2 Измерения.....	12
1.1.3 Вычисление ожидаемого значения.....	13
1.1.4 Развитие квантовых компьютеров.....	13
1.2 Задача поиска энергии основного состояния молекулы.....	14
1.2.1 Описание задачи.....	14
1.2.2 Классические методы решения.....	15
1.2.3 Метод VQE.....	16
1.2.4 Другие подходы к решению, использующие квантовый компьютер.....	19
1.3 Эволюционные алгоритмы.....	19
1.3.1 Эволюционный алгоритм $(1 + 1)$	19
1.3.2 Эволюционный алгоритм $(1 + \lambda)$	20
Выводы по главе 1.....	21
2 РАЗРАБОТКА МЕТОДА НАСТРОЙКИ АЛГОРИТМА VQE С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННОГО ПОДХОДА.....	22
2.1 Схема работы предложенного метода.....	22
2.2 Использование эволюционного алгоритма.....	23
2.2.1 Представление особи и функция стоимости.....	23
2.2.2 Оператор мутации.....	25
2.2.3 Критерий останова.....	26
2.3 Реализация метода.....	27
2.4 Оптимизации метода.....	29
Выводы по главе 2.....	29

3 ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕДЛОЖЕННОГО МЕТОДА.....	31
3.1 Сравнение вариантов метода между собой.....	31
3.2 Сравнение разработанного метода с другими подходами.....	32
Выводы по главе 3.....	36
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	37
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	38
Печатные издания на русском языке.....	38
Печатные издания на английском языке.....	38

ВВЕДЕНИЕ

Основное состояния молекулы – состояние, в котором ее энергия минимальна, поиск энергии такого состояния является одной из задач квантовой химии [2]. Молекулу можно задать ее гамильтонианом – самосопряженной (эрмитовой) матрицей, элементы которой являются комплексными числами. Основное состояние молекулы – это собственный вектор гамильтониана, соответствующий наименьшему собственному значению.

Существуют классические методы поиска наименьшего собственного значения (и вместе с ним соответствующего собственного вектора), однако эти методы практически невозможно использовать даже для молекул среднего размера [2].

Актуальность работы. Квантовые компьютеры в теории смогут помочь решить задачу поиска энергии основного состояния молекулы, но на текущий момент не существует квантовых компьютеров, опережающих классические в каких-либо практических задачах. Однако технологии построения квантовых компьютеров развиваются, и в будущем такие квантовые компьютеры могут появиться. При этом уже существующие квантовые компьютеры можно использовать для поиска энергии основного состояния небольших молекул, в том числе молекулы водорода [11], молекул LiH и BeH₂ [7]. В связи с этим исследования алгоритмов с участием квантовых компьютеров являются актуальными.

Научная новизна. Существует несколько подходов к решению задачи поиска энергии основного состояния молекулы с использованием квантовых вычислений, один из них – Variational Quantum Eigensolver (VQE) [2, 7, 11]. Он использует одновременно классический и квантовый компьютеры, пытаясь искать основное состояние в виде произведения параметризованного унитарного оператора, представимого как последовательность квантовых вентилей, на некое начальное состояние. Классический компьютер используется для численной оптимизации параметров унитарного оператора, а квантовый для применения

соответствующего набора вентилях и оценки полученного состояния. Унитарный оператор можно выбирать по-разному. Новизна этой работы заключается в том, что последовательность квантовых вентилях, соответствующая унитарному оператору, имеет не какой-либо фиксированный вид, как в [7, 11], а вырабатывается эволюционным алгоритмом [1].

Цель работы – разработка автоматизированного метода настройки параметризованной квантовой схемы в алгоритме VQE с использованием эволюционного подхода.

Основные задачи работы состоят в следующем:

1. Разработать разные варианты метода настройки параметризованной квантовой схемы в алгоритме VQE с использованием эволюционного подхода.
2. Оценить и сравнить эффективность различных вариантов разработанного метода.
3. Выбрать лучший из вариантов.

1 КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ЗАДАЧА ПОИСКА ЭНЕРГИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ И ЭВОЛЮЦИОННЫЕ АЛГОРИТМЫ

1.1 Квантовые вычисления

1.1.1 Модель квантовых вычислений

В данном разделе приводятся основные понятия, используемые в вычислениях с использованием квантового компьютера. Более подробно тема изложена в [10].

В отличие от состояния N -битного классического компьютера, которое описывается двоичной строкой длины N , состояние N -кубитного квантового компьютера описывается сложнее: он может находиться в суперпозиции одновременно всех 2^N классических состояний, при этом степень вхождения каждого состояния характеризуется комплексным числом, называемым амплитудой, причем сумма квадратов абсолютных значений амплитуд равна единице. Таким образом состояние N -кубитного компьютера – это вектор из 2^N комплексных значений. Такой вектор также называют волновой функцией.

Произвольное состояние квантового компьютера можно представить как линейную комбинацию классических, например, для $N=2$:

$$|\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle \quad (1.1.1.1)$$

$$\alpha_i \in \mathbb{C}, \sum_i |\alpha_i|^2 = 1 \quad (1.1.1.2)$$

Здесь $|\psi\rangle$ – вектор произвольного состояния, α_i – амплитуды, $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ – векторы, соответствующие классическим состояниям:

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.1.3)$$

В квантовой физике приняты обозначения Дирака (также называемые обозначениями бра-кет), в них вектор-столбец обозначается как $|\psi\rangle$, а вектор-

строка как $\langle\psi|$, $|\psi\rangle$ и $\langle\psi|$ связаны между собой – один получается транспонированием и комплексным сопряжением из другого.

В пространстве состояний вводится скалярное произведение:

$$(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = |\psi\rangle^\dagger |\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle, \quad (1.1.1.4)$$

где $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$ – запись транспонирования и комплексного сопряжения, также для сокращения записи рядом стоящие $\langle\psi|$ и $|\psi\rangle$ объединяют в $\langle\psi|\psi\rangle$.

Скалярное произведение порождает норму:

$$\| |\psi\rangle \| = \sqrt{\sum_i |\psi_i|^2} \quad (1.1.1.5)$$

Все допустимые состояния квантового компьютера обладают единичной нормой.

Состояние квантового компьютера может быть изменено с помощью вентиля. Каждый вентиль изменяет состояние, применяя к нему какой-либо унитарный оператор. Списки некоторых из вентилях и соответствующих операторов приведены в таблицах 1 и 2. Матрицы операторов приведены для схем из одного и двух кубитов соответственно. Для получения матрицы той же операции для большего числа кубитов следует использовать тензорное произведение операторов I и требуемого оператора.

Таблица 1 – Некоторые однокубитные вентили

Обозначение оператора	Название вентиля	Матрица
I, σ_0	Единичный вентиль	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
X, σ_1	Вентиль Паули-X	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
Y, σ_2	Вентиль Паули-Y	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
Z, σ_3	Вентиль Паули-Z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
H	Вентиль Адамара	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$
Rx(ϕ)	Поворот Rx	$\begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & -i \sin \frac{\phi}{2} \\ -i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$
Ry(ϕ)	Поворот Ry	$\begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} & \sin \frac{\phi}{2} \\ \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{pmatrix}$
Rz(ϕ)	Поворот Rz	$\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}$

Таблица 2 – Некоторые двухкубитные вентили

Обозначение оператора	Название вентиля	Матрица
CNOT	Контролируемое отрицание	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
SWAP	Обмен	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Последовательность квантовых вентилях образуют квантовую схему, примеры схем изображены на рисунках 1 и 2. На рисунке 1 изображена схема,

результатирующее состояние которой называется состоянием Белла:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (1.1.1.6)$$

Покажем, что результирующее состояние действительно такое. Для этого в явном виде запишем соответствующий схеме унитарный оператор и умножим его на вектор, соответствующий состоянию $|00\rangle$.

Оператору H , примененному к первому из двух кубитов, соответствует унитарный оператор:

$$H_1 = H \otimes I = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.1.1.7)$$

Унитарный оператор для всей схемы имеет вид:

$$U = U_{cnot} H_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.1.1.8)$$

Осталось применить унитарный оператор, соответствующий всей схеме, к начальному состоянию:

$$|\psi\rangle = U |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (1.1.1.9)$$

Как и ожидалось, получено состояние Белла.

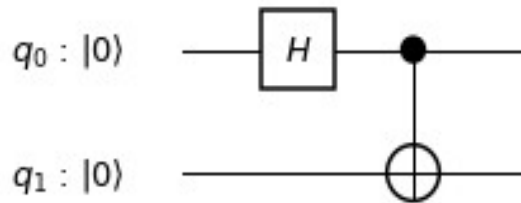


Рисунок 1 – Пример квантовой схемы, состоящей из H и $CNOT$

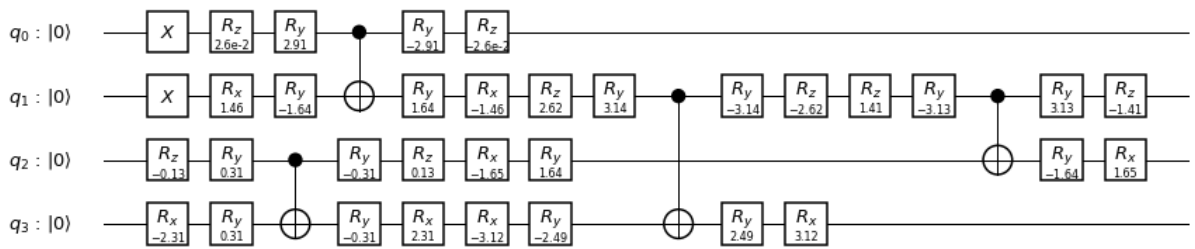


Рисунок 2 – Пример сложной квантовой схемы, состоящей из элементов X, Rx, Ry, Rz и CNOT.

1.1.2 Измерения

В отличие от классического компьютера, состояние квантового компьютера не может быть прочитано и выведено на экран. Его состояние можно только измерить, при этом измерение изменяет состояние. Измерение — единственный способ извлечь информацию из квантового компьютера.

При измерении всех кубитов одновременно в результате получается одна из 2^N битовых строк длины N, при этом вероятность каждой строки равна квадрату модуля соответствующей амплитуды (заметим, что сумма квадратов модулей амплитуд всегда равна единице, поэтому состояние порождает вероятностное распределение на битовых строках).

Так как измерение является вероятностным процессом, то чтобы сделать какие-то выводы требуется собрать статистику – провести множество измерений. После каждого измерения система коллапсирует в одно из классических состояний, последующие измерения будут давать один и тот же результат. Поэтому приходится повторять не только измерения, но и весь набор квантовых вентилей, который привел к этому состоянию.

К примеру, при измерении всех кубитов в состоянии Белла (формула 1.1.1.6) с вероятностью 0,5 будет получена каждая из строк 00 и 11. Заметим, что результаты измерений первого и второго кубитов зависимы между собой, такое явление называется квантовой запутанностью.

1.1.3 Вычисление ожидаемого значения

Ожидаемым значением (квантовомеханическим средним) эрмитовой матрицы H для состояния $|\psi\rangle$ называется число $\langle\psi|H|\psi\rangle$. Заметим, что это число всегда вещественное, так как H – эрмитова.

При симуляции квантового компьютера, где состояние явным образом представлено в памяти, это значение может быть посчитано напрямую. Однако для реального квантового компьютера это не так.

Так как единственным способом получить информацию из квантового компьютера является измерение, то подсчет ожидаемого значения тоже должен выполняться с помощью измерений. В квантовой химии матрица H формируется определенным образом на основе взаимодействия входящих в молекулу частиц, что позволяет ее записать в виде линейной комбинации произведений операторов $X(\sigma_1)$, $Y(\sigma_2)$, $Z(\sigma_3)$ [2]

$$H = \sum_i c_i H_i = \sum_i c_i \sigma_{i1} \dots \sigma_{ik}, \quad (1.1.3.1)$$

где каждый из операторов σ_{ij} является X , Y или Z , действующим на один из кубитов.

Линейность ожидаемого значения относительно H позволяет посчитать ожидаемые значения для компонентов H_i , а потом их сложить [9]. Для компонентов H_i несложно подсчитать ожидаемое значение, для этого надо применить некоторые дополнительные квантовые вентили, а потом сделать выводы на основе статистики измерений. Эта процедура реализована, например, в библиотеке Qiskit [12]. В этой работе квантовый компьютер симулируется, необходимости в данной процедуре нет, поэтому она не будет рассмотрена подробно.

1.1.4 Развитие квантовых компьютеров

На данный момент нет квантовых компьютеров, опережающих классические в каких-либо практических задачах. Самой обещающей технологией построения квантовых компьютеров является использование сверхпроводимости.

Универсальные квантовые компьютеры, позволяющие применять любые однокубитные и двухкубитные вентили, появились относительно недавно. IBM представила 5-кубитный квантовый компьютер в 2016 году, а в мае 2017 года 16-кубитный [13]. В 2018 году Google представила 72-кубитный компьютер [5]. У компании Rigetti есть планы на достижение отметки в 128 кубит [14] в ближайшее время. Тем самым, квантовые компьютеры, опережающие классические, в скором времени могут появиться.

1.2 Задача поиска энергии основного состояния молекулы

1.2.1 Описание задачи

Задача поиска энергии основного состояния молекулы состоит в поиске наименьшего собственного значения эрмитовой матрицы H , описывающей некоторую молекулу [2]. Также H называют гамильтонианом молекулы. Наименьшее собственное значение также называют энергией основного состояния.

Заметим, что ожидаемое значение матрицы H для произвольного вектора единичной нормы не меньше энергии основного состояния:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq \lambda_{min}, \quad (1.2.1.1)$$

где $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, где λ_{min} – энергия основного состояния, при этом равенство достигается когда $|\psi\rangle$ является собственным вектором H , соответствующем наименьшему собственному значению.

Запись гамильтониана молекулы является задачей квантовой химии, не рассматривающейся подробно в этой работе. Общая идея состоит в том, чтобы учитывать взаимодействия ядер атомов молекулы и электронов между собой:

$$\hat{H}_{mol} = - \sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{2M_i} - \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{2} - \sum_{i,j} \frac{Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (1.2.1.2)$$

где \vec{R}_i , M_i , Z_i соответствуют пространственным координатам, массам и зарядом ядер, а \vec{r}_i соответствует пространственным координатам электронов [2]. При этом размерность пространства растет экспоненциально с увеличением числа частиц в

молекуле, что делает использование классических методов практически невозможным [2].

1.2.2 Классические методы решения

Степенной метод (метод степенных итераций)

Степенной метод является итерационным и заключается в постоянном применении оператора A к приближению собственного вектора. Метод находит собственное значение, наибольшее по модулю, и соответствующий ему собственный вектор [4].

Итерации проводятся по следующей формуле, где N — нормализация вектора:

$$|\psi_{n+1}\rangle = N[A|\psi_n\rangle] \quad (1.2.2.1)$$

Задачу поиска наименьшего собственного значения можно свести к задаче поиска собственного значения, наибольшего по модулю, с помощью вычитания из H диагональной матрицы μI , где μ достаточно большое. Тогда итерации примут вид:

$$|\psi_{n+1}\rangle = N[(H - \mu I)|\psi_n\rangle] \quad (1.2.2.2)$$

Полученный собственный вектор для $H - \mu I$ будет собственным вектором и для H , однако соответствующее собственное значение для H будет больше на μ . Чтобы метод давал наименьшее собственное значение для H , μ должен быть не меньше разности абсолютных значений наибольшего и наименьшего собственных чисел H .

Обратный степенной метод (метод обратных степенных итераций)

Обратный степенной метод позволяет найти наименьшее по модулю собственное значение [4]. Метод представляет собой степенной метод, примененный для матрицы, обратной A . Он основан на том, что собственные вектора для A и A^{-1} одинаковы. Для матрицы A^{-1} он ищет собственный вектор, соответствующий наибольшему по модулю собственному значению A^{-1} , тот же вектор соответствует наименьшему по модулю собственному значению A . Если

взять $A = H - \mu I$, то метод найдет собственный вектор, соответствующий собственному значению H , наиболее близкому к μ .

Итерации этого метода выглядят так:

$$|\psi_{n+1}\rangle = N[(H - \mu I)^{-1} |\psi_n\rangle] \quad (1.2.2.3)$$

1.2.3 Метод VQE

Метод Variational quantum eigensolver (VQE) является методом поиска энергии основного состояния, использующим квантовый компьютер [2]. Он ищет собственный вектор в виде

$$|\psi\rangle = U(\vec{\theta}) |\psi_0\rangle, \quad (1.2.3.1)$$

где $U(\vec{\theta})$ – параметризованный унитарный оператор, соответствующий некоторому набору квантовых вентилей. В отличие от классических методов, векторы $|\psi\rangle$ не представляется в явном виде в памяти классического компьютера. Вместо этого вектор $|\psi\rangle$ представляется волновой функцией системы из несколько кубит. Векторы длины 2^N требуют всего N кубитов в квантовом компьютере, в отличие от $O(2^N)$ байт в классическом, это позволяет решать задачу даже для больших значений N . Также достоинством этого метода является то, что его можно запускать на уже существующих машинах.

Схема работы алгоритма VQE изображена на рисунке 3. Алгоритм VQE состоит в следующем.

1. Подготовить начальное состояние $|\psi_0\rangle$.
2. Применить квантовую схему $U(\vec{\theta})$.
3. Измерить значение $E(\vec{\theta}) = \langle\psi| H |\psi\rangle$ (процесс измерения описан в разделе 1.1.3).
4. Используя классический алгоритм минимизации $E(\vec{\theta})$ найти следующий набор параметров $\vec{\theta}'$, вернуться к шагу 1.

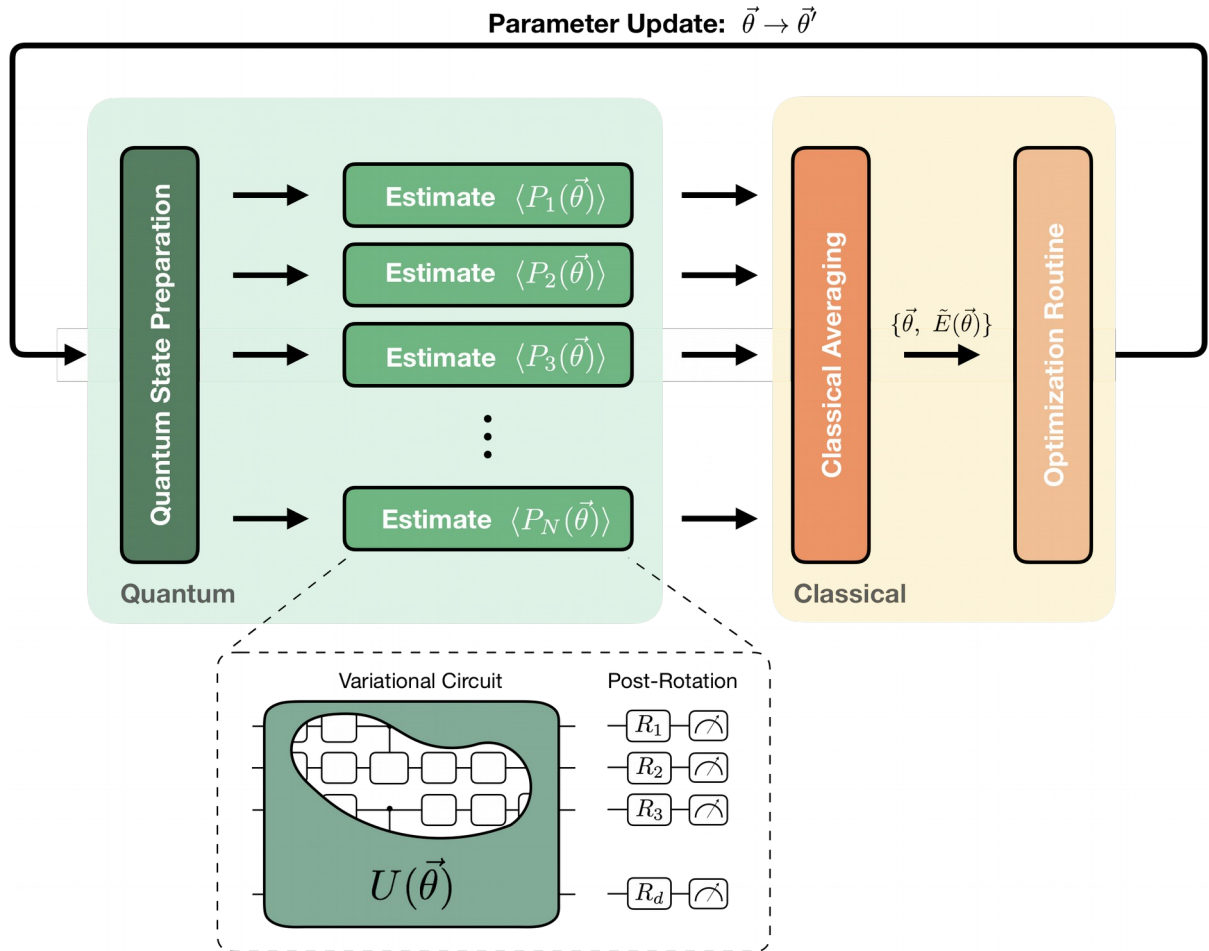


Рисунок 3 – Схема работы алгоритма VQE, источник – [2]

Выбирать вид оператора $U(\vec{\theta})$ можно по-разному, далее приведены некоторые возможные варианты.

Unitary coupled-cluster – способ выбора оператора U , полученный из соображений квантовой химии [2]. Оператор U задается как

$$U(\vec{\theta}) = e^{T-T^\dagger}, \quad (1.2.3.2)$$

где T задается на основе структуры молекулы, при этом оператор U можно выразить через вентили квантовой схемы. Этот способ был использован при вычислении энергии основного состояния молекулы водорода в [11].

В работе [7] использовалась схема, изображенная на рисунке 4. В ее состав входят следующие части.

1. Повороты R_x - R_z для каждого кубита, каждый поворот характеризуется своим параметром.
2. Повторяемых d раз слой, состоящий из двух частей:

- (1) Запутывающий блок U_{ENT} , представляющий из себя множество операций CNOT, примененных ко всем кубитам.
- (2) Блок поворотов Rz-Rx-Rz, каждый поворот характеризуется своим параметром.

Тем самым, схема содержит всего $N(3d + 2)$ параметров, где N – число кубитов, а d – число повторяемых слоев. С увеличением числа слоев улучшается точность, с которой можно получить наименьшее ожидаемое значение.

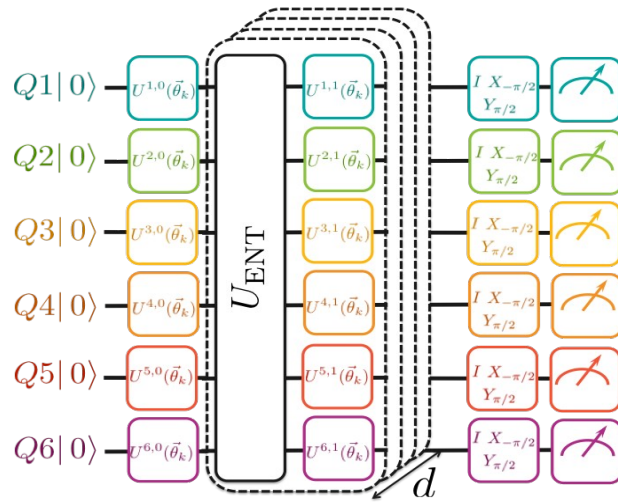


Рисунок 4 – Схема оператора U из [7]. После повторяющихся слоев стоят вентили, служащие для измерения ожидаемого значения гамильтониана. Эти вентили не входят в U

Эволюционный способ. Этот способ является новым подходом, предложенным в этой работе. Предлагается делать схему оператора U не фиксированной, а изменяемой. При этом не перебираются всевозможные схемы, а специальный эволюционный алгоритм пытается подобрать схему, которая минимизирует ожидаемое значение гамильтониана. Достоинство такого способа, что он приводит к более простым квантовым схемам, а чем проще схема, тем меньше ошибка в вычислениях. Различные варианты такого способа рассматриваются в этой работе.

1.2.4 Другие подходы к решению, использующие квантовый компьютер

Существуют и другие подходы к решению задачи без использования вариационных параметров. Один из таких методов, описанный в [8], напоминает классический метод обратных степенных итераций.

1.3 Эволюционные алгоритмы

В данной работе впервые для задания квантовой схемы в алгоритме VQE используются эволюционные алгоритмы. Введем основные понятия. Эволюционные алгоритмы [1] получили свое название из-за их схожести с эволюционными процессами, происходящими в природе. Они решают задачу оптимизации (минимизации или максимизации) функционала $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ на множестве особей X . В дальнейшем считается, что функционал f требуется минимизировать, а f называется функцией стоимости. В эволюционных алгоритмах используются операции, аналогичные природным процессам: мутации особей и отсеивание наиболее приспособленных особей (то есть с наименьшим значением функции стоимости). Функция, случайным образом изменяющая особь, называется оператором мутации.

1.3.1 Эволюционный алгоритм (1 + 1)

Алгоритм (1 + 1) является самым простым из эволюционных алгоритмов [1]. В нем поддерживается наилучшая особь, обладающее наилучшим значением функционала f .

В каждой итерации алгоритма проводится случайная мутация особи. Если для модифицированной особи значение функционала f оказалось меньше, чем у известной до этого лучшей особи, то лучшая особь заменяется на модифицированную. Если же полученное значение f не оказалось меньше, то производится переход к следующей итерации, где тот же объект мутируется еще раз, возможно, уже другим образом.

Иногда алгоритм может застревать на некоторой особи, в этом случае алгоритм можно перезапускать или пытаться применять к особи более крупные мутации, например, состоящие из нескольких обычных мутаций.

Несмотря на свою простоту, алгоритм показывает свою эффективность во многих задачах. Псевдокод алгоритма приведен на листинге 1.

Листинг 1 – Псевдокод эволюционного алгоритма $(1 + 1)$

```
x_best ← начальная особь
while не достигнут критерий останова:
    x ← mutate(x_best)
    if f(x) < f(x_best):
        x_best ← x
return x_best
```

1.3.2 Эволюционный алгоритм $(1 + \lambda)$

Алгоритм $(1 + \lambda)$ является модификацией алгоритма $(1 + 1)$ [3]. В отличие от $(1 + 1)$, к наилучшей особи применяется не одна, а λ мутаций, порождая при этом λ новых особей. Среди этих особей выбирается особь с наименьшим значением функции стоимости. Если это значение меньше, чем у известной до этого наилучшей особи, то наилучшая особь заменяется на эту. Достоинством этого алгоритма является возможность использования параллельных вычислений: вычисления функции стоимости для разных особей могут происходить параллельно, что позволяет ускорить работу на компьютерах с несколькими процессорами или несколькими ядрами в одном процессоре. Псевдокод алгоритма приведен на листинге 2.

Листинг 2 – Псевдокод эволюционного алгоритма $(1 + \lambda)$

```
x_best ← начальная особь
while не достигнут критерий останова:
    x_iteration_best ← x_best
```

```
for i in 1...λ:
    x ← mutate(x_best)
    if f(x) < f(x_iteration_best):
        x_iteration_best ← x
x_best ← x_iteration_best
return x_best
```

Выводы по главе 1

1. Задачу поиска энергии основного состояния молекулы сложно решать классическими способами для достаточно больших молекул, поэтому для этой задачи пытаются использовать квантовый компьютер.
2. Одним из способов решения задачи является метод VQE, настраиваемый квантовой схемой. В существующих подходах эта схема является фиксированной, при этом довольно сложной, что вызывает ошибки вычислений. Предлагается выращивать схему эволюционным подходом, при этом схема должна получаться проще, что уменьшит ошибки вычислений.

2 РАЗРАБОТКА МЕТОДА НАСТРОЙКИ АЛГОРИТМА VQE С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННОГО ПОДХОДА

2.1 Схема работы предложенного метода

Входными данными задачи является эрмитова матрица H (гамильтониан некоторой молекулы), для которой требуется найти наименьшее собственное значение (энергию основного состояния молекулы).

Общая схема предложенного метода изображена на рисунке 5. Предложенный метод состоит из трех частей.

1. Эволюционный алгоритм для генерации квантовой схемы.
2. Алгоритм VQE.
3. Квантовый компьютер (или его симуляция).

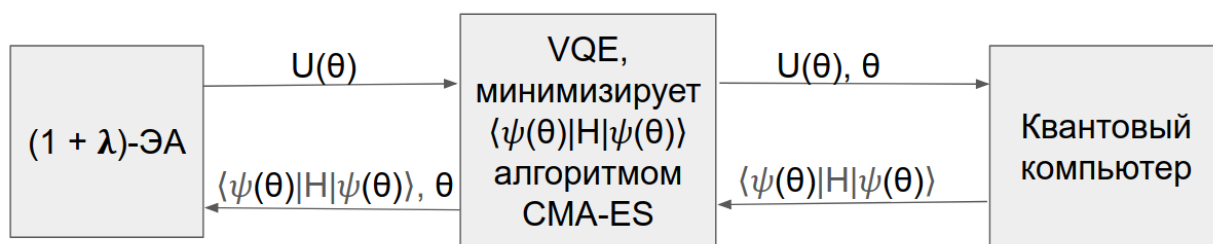


Рисунок 5 – Схема работы предложенного метода

Общей задачей всей конструкции является поиск для заданных H и $|\psi_0\rangle$ оператора $U(\vec{\theta})$ и его параметров, чтобы минимизировать ожидаемое значение H : $\langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle$, где $|\psi(\vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta}) |\psi_0\rangle$. Каждая часть метода для своей работы использует только часть, следующую за ней, запрашивая у нее выполнение какого-либо действия и получая результат.

Квантовый компьютер многократно исполняет квантовые схемы, переданные алгоритмом VQE, и возвращает результаты измерений.

Алгоритм VQE получает от эволюционного алгоритма параметризованную квантовую схему оператора $U(\vec{\theta})$. Он пытается найти такое значение параметров $\vec{\theta}$,

при котором $\langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle$ будет наименьшим, используя при этом какой-либо классический алгоритм минимизации. Были проведены испытания различных алгоритмов минимизации, из них был выбран CMA-ES [6], который является эволюционным алгоритмом. При заданных $\vec{\theta}$ вычисление $\langle \psi | H | \psi \rangle$ проводится при помощи квантового компьютера, как описано в 1.1.3. Результатом работы алгоритма VQE являются оптимальные значения вектора параметров $\vec{\theta}$ и соответствующее значение ожидаемого значения.

Эволюционный алгоритм пытается найти такую параметризованную квантовую схему $U(\vec{\theta})$, чтобы минимизировать ожидаемое значение H при оптимальном значении параметров $\vec{\theta}$:

$$\min_{\vec{\theta}} \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle \quad (2.1.1)$$

Результатом работы всей конструкции являются оптимальная квантовая схема $U(\vec{\theta})$, оптимальный вектор параметров $\vec{\theta}$ и достигаемое на них значение $\langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle$.

2.2 Использование эволюционного алгоритма

Для использования в методе был выбран эволюционный алгоритм $(1 + \lambda)$. Для того, чтобы его использовать, требуется ответить на следующие вопросы.

1. Что представляет из себя особь? Какие структуры данных используются для ее хранения?
2. Что является оператором мутации?
3. Какова функция стоимости?
4. Каков критерий останова алгоритма?

2.2.1 Представление особи и функция стоимости

Особью является квантовая схема, состоящая из различных элементов. Эмпирически было получено, что составлять квантовую схему из простейших вентилей неэффективно, так как добавления одного вентиля как правило недостаточно, чтобы как-либо поменять ожидаемое значение. Тем самым выбор одного вентиля в качестве элемента приводит к тому, что эволюционный алгоритм

застревает в локальном минимуме. Поэтому в качестве элементов используются блоки – комбинации из квантовых вентилях фиксированной структуры. Пример блока приведен на рисунке 6. Вопрос выбора наилучшего вида блока рассматривается ниже.

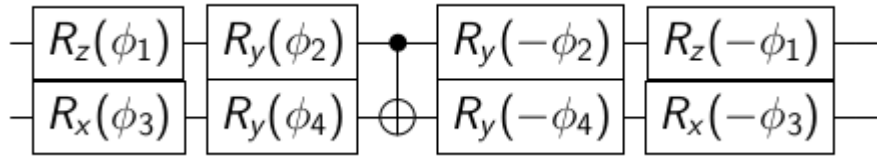


Рисунок 6 – Пример блока, состоящего из нескольких квантовых вентилях

Особь эволюционного алгоритма характеризуется списком элементов, пример особи, состоящей из двух элементов, приведен на рисунке 7. Каждый элемент характеризуется своим типом и тем, к каким кубитам он применен. Тип блока характеризуется списком квантовых вентилях, входящих в него, тем, к каким кубитам применен каждый вентиль, и тем, как параметры блока отображаются на параметры вентилях. Например, в блоке на рисунке 6 блок имеет четыре параметра, которые отображаются на параметры восьми вентилях.

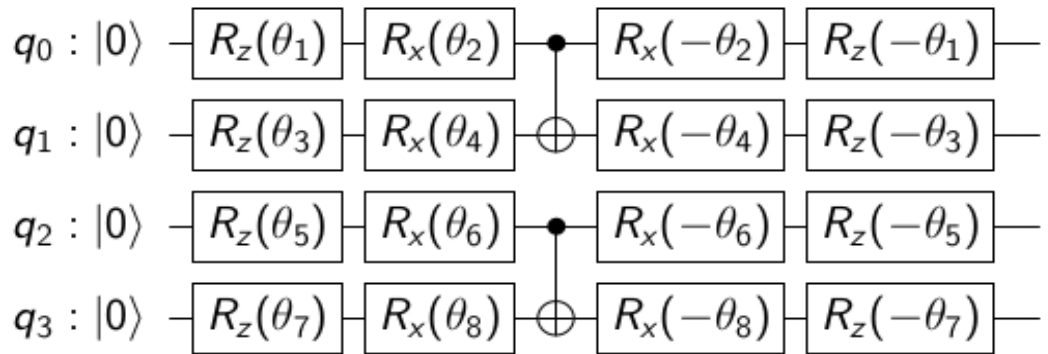


Рисунок 7 – Пример особи, состоящей из двух элементов, первый элемент применен к кубитам q_0 и q_1 , второй к q_2 и q_3

Пусть $U(\vec{\theta})$ – особь и соответствующий ей унитарный оператор. Тогда функция стоимости напрямую следует из решаемой задачи и имеет вид:

$$f(U) = \min_{\vec{\theta}} \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle, \quad (2.2.1.1)$$

где $|\psi(\vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta})|\psi_0\rangle$.

2.2.2 Оператор мутации

Особь можно изменять различными способами.

1. Добавлять в нее блок некоторого типа в некоторую позицию (позиция характеризуется индексом в списке элементов и кубитами, к которым элемент применяется).
2. Удалять элемент из схемы.

Предлагается с вероятностью p (в экспериментах использовалось $p = \frac{2}{3}$) вставлять блок некого типа в случайную позицию схемы и с вероятностью $1 - p$ удалять случайный элемент из схемы. При этом будем составлять всю схему из элементов одного типа. Предлагаемые типы блоков изображены на рисунках 8 – 10.

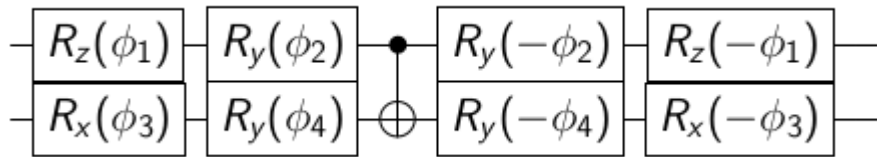


Рисунок 8 – Блок типа А. Основной операцией является CNOT.

Повороты кубитов преобразуют базис, в котором выполняется CNOT. При использовании двух блоков типа А подряд можно сократить по одному повороту R_z , R_x

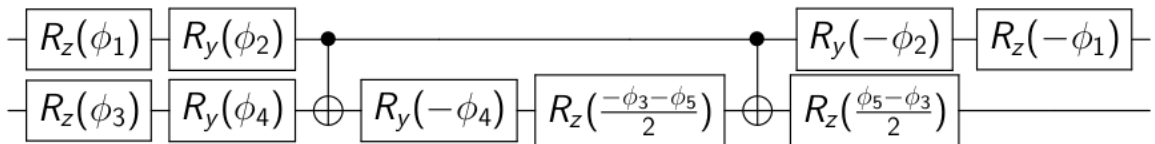


Рисунок 9 – Блок типа В. Особенностью блока является то, что существует набор параметров, при котором блок ничего не изменяет

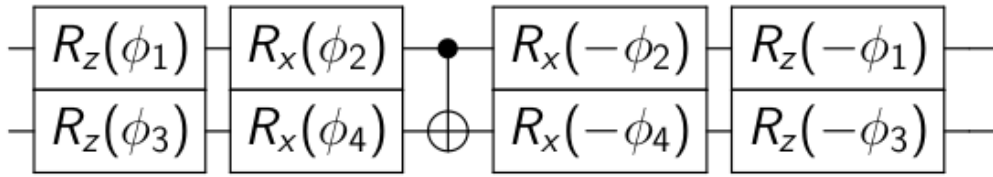


Рисунок 10 – Блок типа С. Основной операцией является CNOT.

Повороты кубитов преобразуют базис, в котором выполняется

CNOT. При использовании двух блоков типа С подряд можно

сократить два поворота R_z

При составлении блоков принимались во внимание следующие принципы. Первый принцип – минимизация числа параметров. Хотелось бы иметь наибольшую мощность блока с точки зрения множества порождаемых им унитарных операторов. При этом слишком большое число параметров – плохо, так как от числа параметров зависит длительность поиска их оптимального значения.

Второй принцип использовался при составлении блока типа В. В его основе лежит идея того, что когда существующая схема достигает состояния $|\psi\rangle$, достаточно близкого к собственному вектору, дальнейшие унитарные операторы, примененные к $|\psi\rangle$, должны быть близки к единице. Существует набор параметров, при котором блок типа В является единичным оператором. Этот набор параметров хорошо взять начальным приближением, с которого начинается поиск оптимальных параметров. Среди рассмотренных блоков надо выбрать оптимальный, принципы сравнения типов блоков и выбор наилучшего блока описаны в главе 3.

2.2.3 Критерий останова

В целях анализа алгоритма и сравнения различных его вариантов имеет смысл измерять среднее число вычислений до тех пор, пока энергия не будет получена с достаточной точностью. В этом случае критерием останова будет близость к известной энергии основного состояния, полученной классическими методами.

Для больших молекул, для которых классическими методами энергию основного состояния посчитать невозможно, критерием останова будет исчерпание заданного бюджета.

2.3 Реализация метода

Основная часть метода была реализована на языке Python 3, часть метода, отвечающая за VQE, с целью повышения производительности была написана на C++ с использованием QuEST [15], интеграция частей на Python и на C++ выполнялась разработанным расширением для Python с использованием библиотеки `boost::python`.

При выборе наиболее производительной реализации метода была оценена производительность различных способов симуляции квантового компьютера, результаты оценки отображены в таблицах 3 и 4. Производительность симуляции приводится в числе вычислений конечного состояния квантового компьютера за единицу времени, производительность VQE приводится в числе находений оптимальных вариационных параметров схемы за единицу времени. Сравнение производилось для случайных четырехкубитных и восьмикубитных схем из четырех блоков типа A, примеры таких схем представлены на рисунках 11 и 12. Заметно, что накладные расходы на вызов функций QuEST из Python значительно превышают время работы самой функции, тем самым по производительности код на Python значительно отстает от кода на C++. По этой причине был выбран способ с реализацией VQE и симуляцией квантового компьютера на C++ несмотря на то, что он более сложен в реализации.

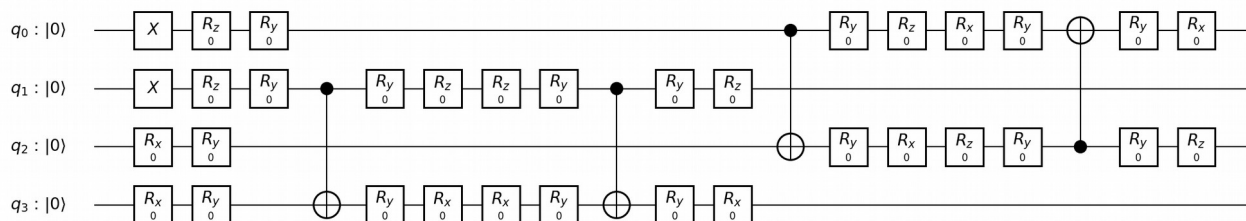


Рисунок 11 – Схема для 4 кубитов, на которой исследуется производительность симуляции

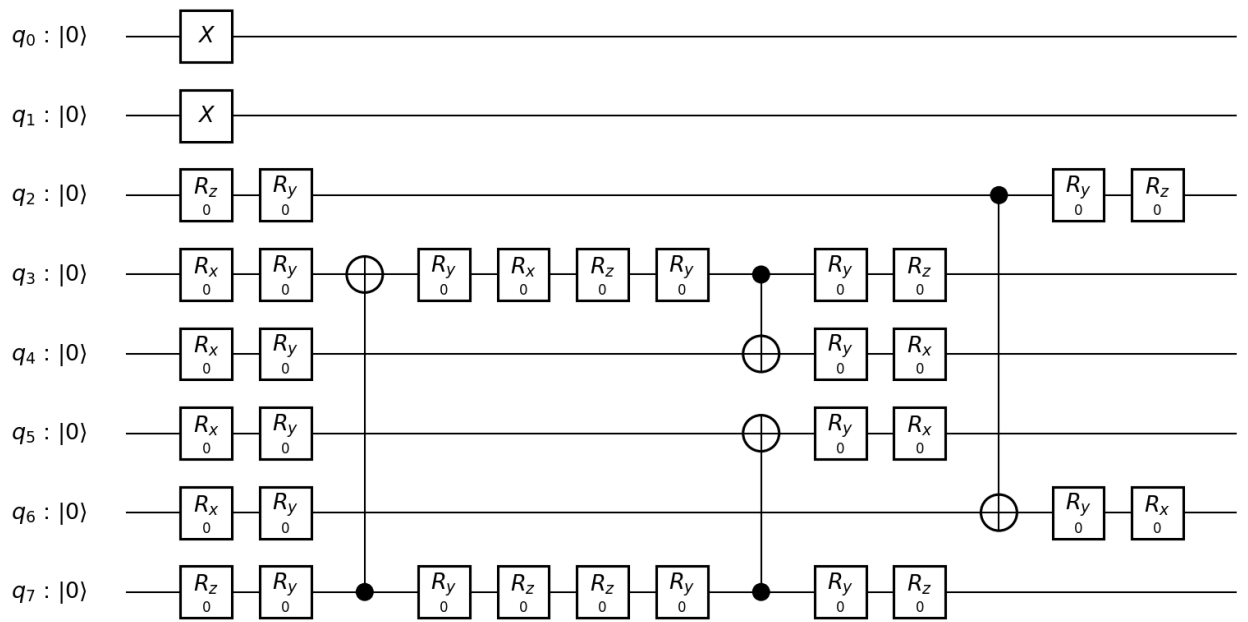


Рисунок 12 – Схема для 8 кубитов, на которой исследуется производительность симуляции

Таблица 3 – Сравнение производительности различных реализаций VQE и способов симуляции квантового компьютера, четыре кубита

Подход		Производительность	Производительность
VQE	Симуляция	симуляции (ед/с)	VQE (ед/с)
СМА-ES на C++	QuEST (C)	140 000	31
СМА-ES на Python	Биндинги QuEST для Python	1300	0,08
СМА-ES на Python	Qutip (Python)	61	0,03
СМА-ES на Python	Qiskit (Python)	35	не оценивалась

Таблица 4 – Сравнение производительности различных реализаций VQE и способов симуляции квантового компьютера, восемь кубитов

Подход		Производительность	Производительность
VQE	Симуляция	симуляции (ед/с)	VQE (ед/с)
СМА-ES на C++	QuEST (C)	18 000	10
СМА-ES на Python	Биндинги QuEST для Python	500	0,09
СМА-ES на Python	Qutip (Python)	60	0,03
СМА-ES на Python	Qiskit (Python)	33	не оценивалась

2.4 Оптимизации метода

Использование нескольких потоков позволяет ускорить метод в несколько раз при работе на многоядерных компьютерах. Эволюционный алгоритм $(1 + \lambda)$ тривиально распараллеливается до λ потоков. Однако заметим, что основное время работы метода занимает вычисление функции стоимости особи, которое предполагается выполнять с помощью квантового компьютера. Поэтому для использования распараллеливания потребуется иметь несколько квантовых компьютеров.

Выводы по главе 2

1. Разработан метод настройки параметризованной квантовой схемы в алгоритме VQE с использованием эволюционного подхода. Метод

отличается от существующих тем, что квантовая схема, используемая в алгоритме VQE имеет не фиксированный вид, а выращивается эволюционным алгоритмом таким образом, чтобы не добавлялись вентили, не дающие приближение к энергии основного состояния молекулы.

2. Предложены блоки вентилей, используемые в выращиваемых схемах.

3 ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРЕДЛОЖЕННОГО МЕТОДА

3.1 Сравнение вариантов метода между собой

Были разработаны разные варианты метода, отличающиеся друг от друга типом используемого блока. Для дальнейшего сравнения разработанного метода с существующими подходами следует выбрать из вариантов метода наилучший. Предлагается оценивать варианты метода по времени работы, требуемому для достижения заданной точности. Для того, чтобы результаты эксперимента не зависели от мощности и загруженности используемого компьютера, время предлагается измерять в условных единицах. А именно, следует сделать следующее.

1. Выбрать молекулу, на которой сравнивать методы между собой. Была выбрана молекула LiH, гамильтониан которой записан для четырех кубитов (то есть представляет собой матрицу $2^4 \times 2^4$).
2. Запустить много раз метод на гамильтониане этой молекулы, критерием останова взять достижение химической точности – $1,6 \cdot 10^{-3}$. Подсчитать затраченное время: каждое вычисление ожидаемого значения для схемы и ее параметров стоит $L + 1$ условных единиц времени, где L – число квантовых вентилей.
3. Сравнить среднее число вычислений для каждого типа блока.

Сравнение среднего времени работы для разработанного метода, использующего разные типы блоков, изображено на рисунке 13.

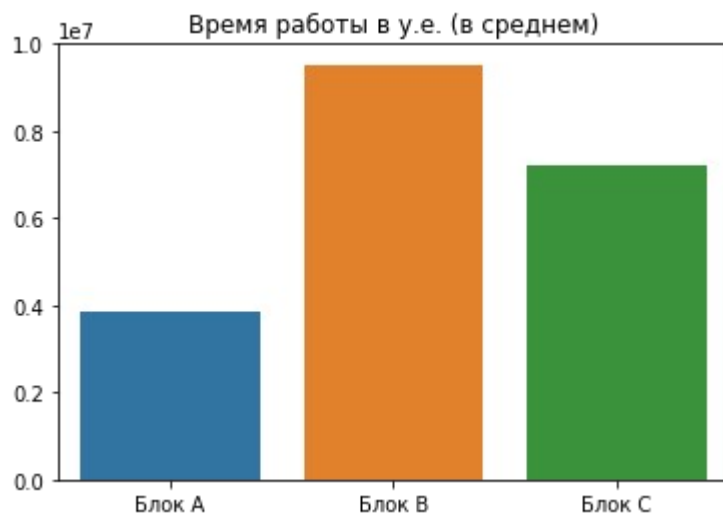


Рисунок 13 – Сравнение времени работы разработанного метода, требуемого для достижения химической точности для молекулы LiH, в зависимости от типа используемого блока

Как видно из диаграммы, наиболее эффективным оказалось использование блока типа А. Заметим, что не рассматривались варианты метода, где используются разные типы блоков одновременно. Может быть полезно сначала использовать блоки типа А, а после получения хорошего приближения к собственному вектору, использовать блоки типа В, так как соответствующий блоку В унитарный оператор может быть близок к единичному. Такие комбинации являются возможным направлением дальнейших исследований.

3.2 Сравнение разработанного метода с другими подходами

Основной целью разработанного метода было уменьшение используемого числа квантовых вентилях, особенно двухкубитных (так как они создают значительно больший шум, чем однокубитные вентили), поэтому сравнение с существующими подходами будет происходить по числу двухкубитных операций, требуемых для достижения заданной точности. Сравнение производилось для четырехкубитного гамильтониана молекулы LiH и восьмикубитного гамильтониана молекулы BeH₂.

Для четырехкубитного гамильтониана метод был запущен 50 раз без ограничения бюджета до достижения точности 10^{-13} . Близость полученных значений к энергии основного состояния в зависимости от числа двухкубитных операций изображена на рисунке 14, на графике изображены все точки, полученные во время работа метода, а не только 50 финальных. Как видно, при использовании разработанного метода при том же числе двухкубитных операций удается лучше приблизиться к энергии основного состояния, чем при использовании фиксированных схем из [7].

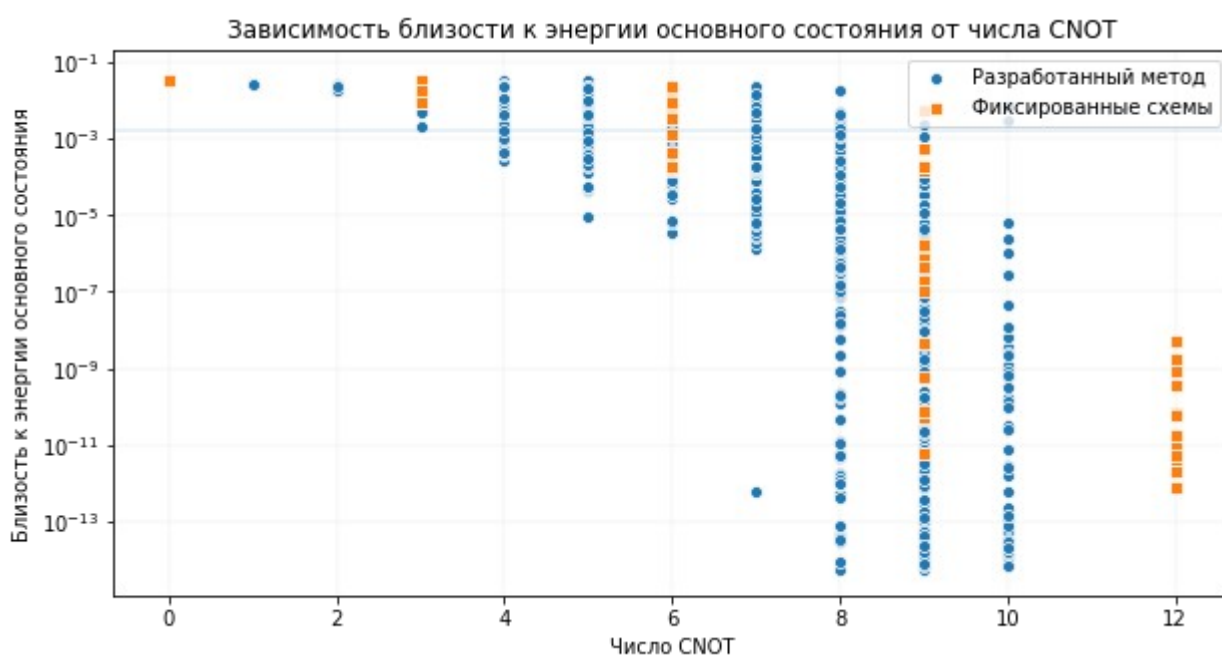


Рисунок 14 – Зависимость близости к энергии основного состояния молекулы LiH от числа двухкубитных операций, синие точки – для предложенного метода, оранжевые – для семейства фиксированных схем с разным числом слоев из [2], описанных в разделе 1.2.3, оранжевых точек несколько по той причине, что VQE иногда застревает в локальном оптимуме

Метод был запущен для восьмикубитного гамильтониана BeH_2 20 раз с ограничением бюджета в 20 000 000 вычислений ожидаемого значения. Близость полученных значений к энергии основного состояния в зависимости от числа двухкубитных операций изображена на рисунке 15, на графике изображены все точки, полученные во время работа метода, а не только 20 финальных. Как видно, при использовании фиксированных схем из [7] для достижения химической

точности ($1,6 \cdot 10^{-3}$) требуется 49 двухкубитных операций (схема изображена на рисунке 17), а при использовании разработанного метода достаточно и 13 (схема изображена на рисунке 16). В разработанном методе используемые квантовые схемы оказались проще, тем самым они генерируют меньший шум.



Рисунок 15 – Зависимость близости к энергии основного состояния молекулы BeH_2 от числа двухкубитных операций, синие точки – для предложенного метода, оранжевые – для семейства фиксированных схем с разным числом слоев из [7]

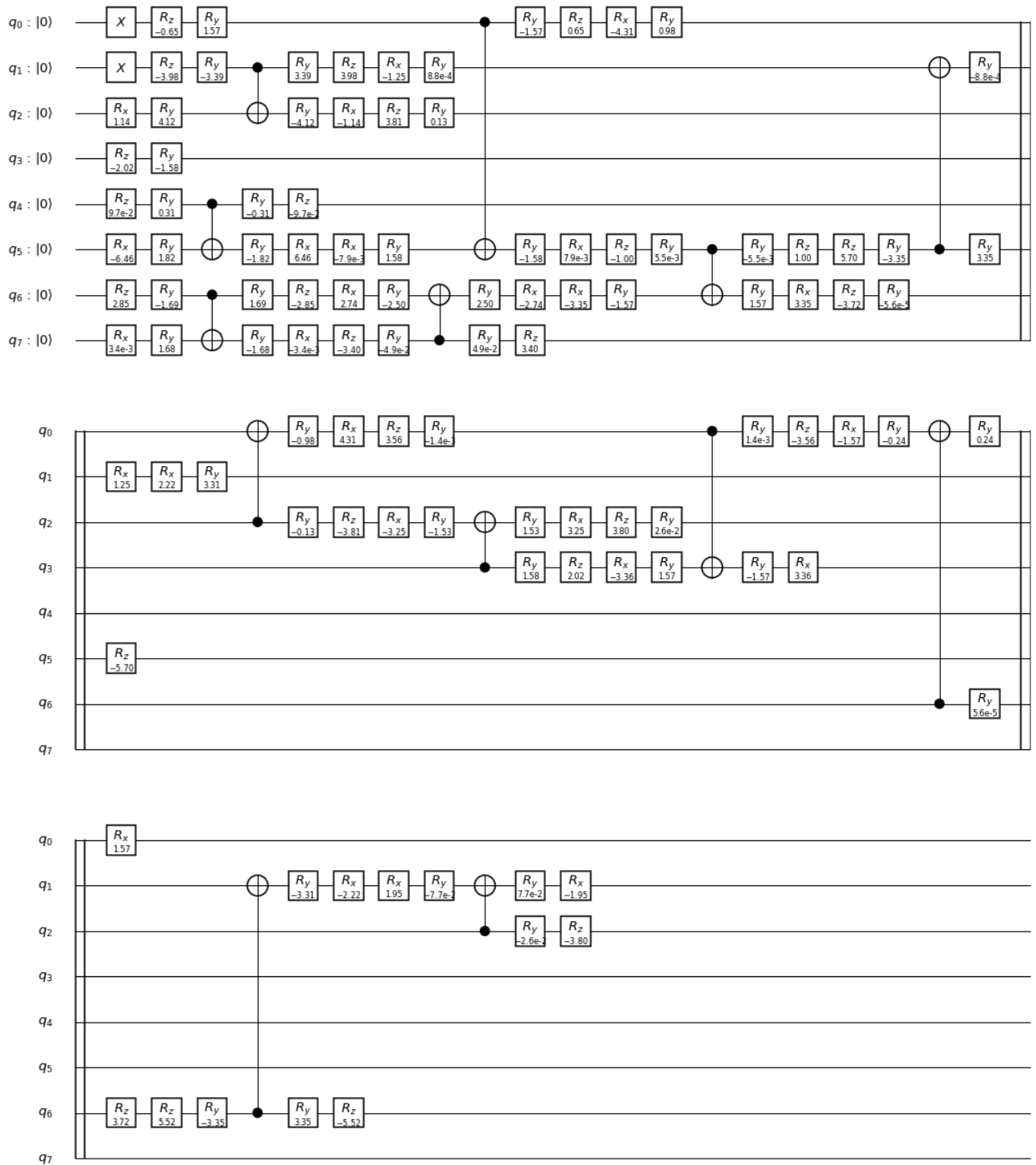


Рисунок 16 – Схема, выращенная разработанным методом, она содержит всего 13 двухкубитных операций, при этом позволяет достичь химической точности

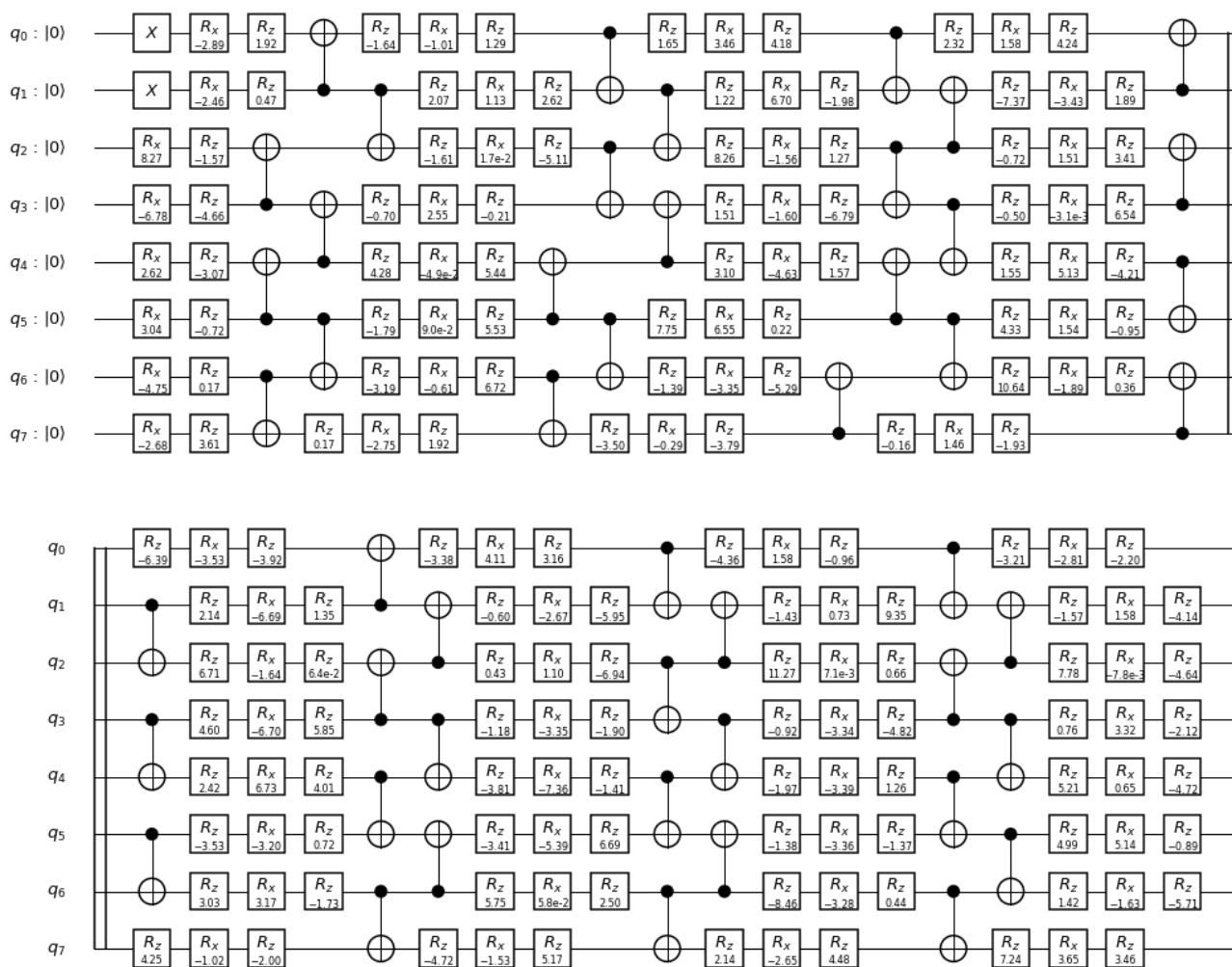


Рисунок 17 – Схема, предложенная в [7], позволяющая достигнуть химической точности, схема содержит 49 двухкубитных вентилей

Выводы по главе 3

1. Проведен эксперимент для выбора наилучшего типа блока вентилей для разработанного метода. Было установлено, что блок типа А оказался наилучшим, так как скорость сходимости к энергии основного состояния для него оказалась наивысшей.
2. Было проведено сравнение разработанного метода с известным [7].
3. Для молекулы BeH_2 используемые квантовые схемы оказались проще, чем в работе [7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработано несколько вариантов метода автоматизированной настройки квантовой схемы в алгоритме VQE, основанной на эволюционном алгоритме. Оценена эффективность методов, из них выбран наилучший по времени, требуемому для получения энергии с некоторой фиксированной точностью. Произведено сравнение наилучшего варианта предложенного метода с подходом, изложенным в [7], по требуемому числу двухкубитных вентилях для достижения заданной точности. Для молекулы BeH_2 , записанной в виде гамильтониана размера $2^8 \times 2^8$ используемые квантовые схемы оказались проще, чем в работе [7], а значит, для них меньше ошибка квантовых вычислений. Таким образом, задачи, поставленные в данной работе, выполнены, а ее цель достигнута.

Остались некоторые нереализованные идеи оптимизации, являющиеся возможным направлением дальнейших исследований. Со временем работы метода используемые квантовые схемы усложняются и сложность вариации параметров возрастает. Чтобы прекратить этот рост предлагается иногда фиксировать часть схемы, после чего не проводить в этой части мутации и вариацию ее параметров. При этом не обязательно фиксировать сразу и структуру схемы, и ее параметры. Можно сначала фиксировать только структуру, а через некоторое время работы метода параметры.

Также хотелось бы не тратить слишком много времени на подбор оптимальных параметров плохих схем. Можно ограничить бюджет поиска оптимальных параметров, но надо это сделать таким образом, чтобы не пропускалось слишком много хороших схем.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

Печатные издания на русском языке

1. Буздалов М.В. Генерация тестов для определения неэффективных решений олимпиадных задач по программированию с использованием эволюционных алгоритмов: диссертация ... кандидата технических наук. Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 2014.

Печатные издания на английском языке

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

3. Doerr B. [и др.]. The $(1+\lambda)$ Evolutionary Algorithm with Self-Adjusting Mutation Rate // arXiv:1704.02191 [cs.NE]. 2017.

3. Ford W. Numerical Linear Algebra with Applications: Using MATLAB / W. Ford, 1-е изд., London, UK ; San Diego, CA, USA: Academic Press, 2014. 628 с.

5. Greene T. Google reclaims quantum computer crown with 72 qubit processor // The Next Web [Электронный ресурс]. URL: <https://thenextweb.com/artificial-intelligence/2018/03/06/google-reclaims-quantum-computer-crown-with-72-qubit-processor/> (дата обращения: 22.04.2019).

6. Hansen N. The CMA Evolution Strategy: A Tutorial // arXiv:1604.00772 [cs.LG]. 2016.

7. Kandala A. [и др.]. Hardware-efficient Variational Quantum Eigensolver for Small Molecules and Quantum Magnets // Nature. 2017. № 7671 (549). С. 242–246.

8. Kyriienko O. Quantum inverse iteration algorithm for near-term quantum devices // arXiv:1901.09988 [cond-mat, physics:quant-ph]. 2019.

9. McClean J.R. [и др.]. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms // New Journal of Physics. 2016. № 2 (18). С. 023023.

7. Nielsen M.A., Chuang I.L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition / M.A. Nielsen, I.L. Chuang, Anniversary edition, Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 2011. 702 с.

11. O'Malley P.J.J. [и др.]. Scalable Quantum Simulation of Molecular Energies // Physical Review X. 2016. № 3 (6). С. 031007.

12. Qiskit | Quantum Information Science Kit [Электронный ресурс]. URL: <https://qiskit.org/> (дата обращения: 05.06.2019).

13. Google is Closer Than Ever to a Quantum Computer Breakthrough // Futurism [Электронный ресурс]. URL: <https://futurism.com/google-is-closer-than-ever-to-a-quantum-computer-breakthrough> (дата обращения: 22.04.2019).
14. Rigetti Computing hopes to have a functioning 128 qubit quantum computer within 12 months – NextBigFuture.com [Электронный ресурс]. URL: <https://www.nextbigfuture.com/2018/08/rigetti-computing-hopes-to-have-a-functioning-128-qubit-quantum-computer-within-12-months.html> (дата обращения: 22.04.2019).
15. QuEST – Quantum Exact Simulation Toolkit [Электронный ресурс]. URL: <https://quest.qtechtheory.org/> (дата обращения: 29.05.2019).