
QMLCourse

ODS Quantum Community

Mar 25, 2023

CONTENTS

Почему именно этот курс? Наш курс отличается от других курсов по квантовым вычислениям, потому что он:

- адаптивный и содержит лекции разных уровней сложности и глубины;
- практический, а все объяснения подкрепляются кодом;
- про реальные методы, которые будут актуальны ближайшие 10-15 лет.

Основатель курса [Синченко Семён](#):

Я очень люблю квантовые технологии и являюсь их большим энтузиастом. При этом моя основная работа связана с машинным обучением, поэтому идею сделать курс по QML я вынашивал очень давно. В сообществе ODS мне удалось найти единомышленников, и вместе мы подготовили для вас набор лекций и домашних заданий, которые проведут вас через удивительный мир кубитов, гейтов и квантовых нейросетей. Мы очень хотели сделать курс одновременно простым и понятным, но также строгим и глубоким с технической точки зрения и, надеюсь, у нас это получилось. В основном мы будем обсуждать темы, которые будут перспективны в ближайшие годы, а также максимально ориентироваться на практической стороне вопроса. Я лично верю, что квантовые технологии по мере их развития произведут не меньшую революцию, чем, например, распространение вычислений на видеокартах, а также позволят по-другому подойти к задачам, которые мы раньше не умели решать. Надеюсь, что после прохождения этого курса поверите и вы! В любом случае, я уверен, что тема QML и квантовых вычислений как минимум стоит того, чтобы с ней познакомиться. Надеюсь, что вам будет интересно!

Why this course? Our course is different from other courses on quantum computing because it is:

- adaptive and contains lectures of different levels of complexity and depth;
- practical, and all explanations are backed up by code;
- about real methods that will be relevant in the next 10-15 years.

Course Founder [Sinchenko Semyon](#):

I love quantum technologies and am a great enthusiast of them. At the same time my main job is associated with machine learning, so the idea to make a course on QML I hatched a long time ago. In the ODS community I've managed to find like-minded people, and together we have prepared a set of lectures and homework assignments that will lead you through the wonderful world of qubits, gates and quantum neural networks. We really wanted to make the course both simple and clear, but also rigorous and deep from a technical point of view, and hopefully we succeeded. Basically, we will discuss topics that will be promising in the coming years, as well as focus on the practical side of the issue as much as possible. I personally believe that quantum technologies, as they develop, will produce no less of a revolution than, for example, the spread of video-card computing, as well as allow us to approach problems that we did not know how to solve before in a different way. I hope that after taking this course, you will too! In any case, I am convinced that the topic of QML and quantum computing at least worth getting acquainted with it. I hope that you will be interesting!

Как устроен курс? Наш курс разделен на логические блоки, каждый из которых содержит лекции разных уровней сложности:

- **ГОЛУБОЙ** – вводные лекции;
- **ЗЕЛЕНЫЙ** – лекции “основного” блока курса;
- **ЖЕЛТЫЙ** – лекции, глубже раскрывающие темы блоков;
- **КРАСНЫЙ** – лекции про физику и математику, которая стоит за всем этим;
- **БЕЛЫЙ** – факультативные лекции.

How does the course work? Our course is divided into logical blocks, each containing lectures of different levels of difficulty:

- **CYAN** – introductory lectures;
- **GREEN** – lectures in the “main” block of the course;
- **YELLOW** – lectures that go deeper into the units;
- **RED** – lectures on the physics and mathematics behind it all;
- **WHITE** – elective lectures.

Как проходить этот курс? Рекомендуется проходить курс в том порядке, который обозначен на схеме. У курса есть *пререквизиты* — программирование на Python, основы линейной алгебры и машинного обучения, советуем с ними ознакомиться и (опционально) проверить себя с помощью [входного теста](#).

Курс обсуждается в [matrix.ods.ai](#) в канале [course] quantum ml.

Желаем успехов!

How to take this course? It is recommended to take the course in the order indicated in the diagram. The course has *prerequisites* — programming in Python, basics of linear algebra and machine learning, we advise to read them and (optionally) check yourself with [input test](#).

The course is discussed in [matrix.ods.ai](#) in the [course] quantum ml channel.

All English version course you can found below start from [here](#).

Good luck!

Как можно помочь? Помочь можно словом и делом. Если знаете людей, интересующихся квантовыми вычислениями — замолвите словечко. Курс разрабатывается сообществом OpenDataScience, такими же “больными”, как и организаторы. Если горите желанием в чем-то помочь, то создавайте Issue, а лучше сразу Pull Request в [репозитории курса](#) ([Contributing guide](#)).

How can you help? You can help in word and deed. If you know people interested in quantum computing, put in a word. The course is developed by the OpenDataScience community, the same “sick” people as the organizers. If you’re eager to help with something, then create an Issue, or better yet a Pull Request in [course repository](#) ([Contributing guide](#)).



Part I

Введение

О КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРАХ, БИТКОИНЕ И ПРЕВОСХОДСТВЕ

Автор(ы):

- Синченко Семен

1.1 Описание лекции

Эта лекция не несет в себе образовательного смысла, а лишь пытается ответить на вопросы, которые обычно возникают у тех, кто впервые сталкивается с темой квантовых вычислений. А именно:

- что это за вычисления такие?
- зачем вообще это все нужно?
- и когда взломают биткоин?
- что за превосходство, о котором все говорят?

1.2 Что это вообще за компьютеры такие?

1.2.1 Количественная эволюция компьютеров

Сегодня классические компьютеры, построенные на идеях Тьюринга, фон Неймана и Шокли, стали неотъемлемой частью нашей жизни. Все мы привыкли к тому, что с каждым годом наши компьютеры становятся все мощнее и мощнее. И то, что сегодня является бюджетным ноутбуком 15 лет назад было аналогом суперкомпьютера!

Так называемый закон Мура, сформулированный Гордоном Муром еще в конце 60-х годов, говорит нам о том, что число транзисторов на кристалле интегральной схемы будет удваиваться каждые два года. И этот закон стабильно выполняется.



Fig. 1.1: Иллюстрация закона Мура — рост числа транзисторов с 1970-х

1.2.2 Качественная эволюция компьютеров

Но, к сожалению, по сугубо физическим причинам, выполнение закона Мура не может длиться вечно — рано или поздно, но прямое увеличение количества транзисторов станет невозможным. Поэтому сегодня все чаще можно услышать слова о том, что современным компьютеры ждет качественная революция. Кто-то говорит о переходе на новые материалы для изготовления транзисторов. Кто-то говорит о создании транзисторов на новых принципах, например, об оптических компьютерах. Но часто можно услышать слова о том, что следующим революционным прорывом станет создание квантовых компьютеров. О них мы и будем говорить.

1.2.3 Идея о квантовом компьютере

Сегодня существует несколько версий о том, кто же первым высказал идею о квантовом компьютере. Как это часто бывает, сразу несколько ученых одновременно и независимо пришли к одной и той же идее. Одним из таких ученых был Ричард Фейнман.



Fig. 1.2: Ричард Фейнман, 1918-1988

В 1981-м году, когда шло очень активное развитие одновременно классических компьютеров и вычислительной квантовой механики, он высказал идею о том, что для решения задач квантовой физики нам нужен квантовый

компьютер.

1.2.4 Что это за компьютер такой?

Этот вопрос на самом деле крайне сложный и именно ему будет посвящена первая половина нашего курса. Кажется странным, если вопрос, которому будет посвящено несколько полноценных лекций с формулами можно было бы раскрыть в одном абзаце. Было бы ошибкой пытаться сказать, что обычные компьютеры работают на законах классической физики, а квантовые на основе квантовой механики — ведь нормально объяснить работу транзистора можно лишь с привлечением уровня Ферми и прочих сложных штук из квантовой физики. Также неправильно было бы говорить о том, что в отличии от классических компьютеров, где есть лишь 0 и 1 в квантовых есть все состояния сразу. Ведь ничего не мешает сделать так называемую вероятностную машину Тьюринга, другими словами, классический компьютер, который оперирует многими состояниями сразу. Особенно не хочется сразу сыпать на читателя кучу непонятных терминов, типа квантовой суперпозиции, кубита или запутанности, ведь для тех, кто не знает что такое квантовые компьютеры эти термины, вероятнее всего, тоже ничего не дадут. Для начала, давайте просто условимся, что квантовые компьютеры это, в отличии от фотонных, графеновых, или других перспективных “новых” компьютеров, не только использование новых материалов или технической базы, а еще и использование новой, отличной от заложенной Тьюрингом концепции вычислений, представления и обработки информации.

1.3 А зачем это вообще нужно?

1.3.1 Факторизация больших чисел

Мне кажется, что именно открытие алгоритма Шора для эффективного решения задачи факторизации послужило наибольшим толчком в популяризации квантовых вычислений. Именно после этого большое число специалистов устремилось в эту область, военные и корпорации начали вкладывать деньги, а журналисты стали писать о будущем крахе банковских платежей и вообще всего мира. Вероятно, алгоритм Шора является самым раскрученным квантовым алгоритмом.

Дело в том, что большая часть всей современной криптографии держится на одном простом предположении о невозможности эффективно решать задачу факторизации больших чисел. Ну или по простому, если у нас есть число, которое является произведением двух относительно больших простых чисел, то мы будем до бесконечности искать эти числа и скорее всего так и не найдем их. Но это для классического компьютера. А вот для квантового компьютера в 1994-м Питером Шором был предложен алгоритм, который решает эту задачу эффективно, за относительно короткий промежуток времени.



Fig. 1.3: Питер Шор, тот, кто переполошил весь мир своим алгоритмом

Именно этот алгоритм в будущем взломает биткоин и обрушит банковскую систему, но не все так плохо – развитие квантовых компьютеров подтолкнуло ученых в области криптографии к созданию новых, так

называемых *пост-квантовых* алгоритмов шифрования, которые нельзя взломать за разумное время и на классическом, и на квантовом компьютере.

1.3.2 Комбинаторные и NP-трудные задачи

Помимо уже озвученных проблем с выполнением закона Мура, есть также и другая проблема. А именно то, что существуют задачи, которые скорее всего никогда не получится эффективно решать на классическом компьютере Тьюринга. Даже на фотонном или графеновом. Хороший пример это задача о рюкзаке. Когда у нас есть рюкзак ограниченного объема, а также есть много предметов разного веса и стоимости. И нам надо наполнить наш рюкзак так, чтобы предметы внутри него имели максимальную суммарную стоимость. Задача кажется легкой, но она относится к так называемым *NP-полным задачам*. Такие задачи, например, в случае большого рюкзака и набора предметов, невозможно точно решить за разумное время. Да и вообще их решить с приемлемой точностью, пусть даже *приближенно* это сегодня большая проблема!

Note: Здесь я не зря написал “скорее всего”. Дело в том, что этот вопрос является одним из [так называемых вопросов тысячелетия](#). Так, для известной задачи о наполнении рюкзака, мы не знаем сегодня эффективного алгоритма решения на классическом компьютере. Но мы также и не можем пока доказать, что такого алгоритма не существует. Ну то есть скорее всего такого алгоритма и правда не существует, а также скорее всего $P \neq NP$, но доказать это пока ни у кого не вышло. Но это скорее лирическое отступление.

Так вот, дело в том, что для квантовых компьютеров уже сегодня известны алгоритмы, которые позволяют потенциально эффективно, пусть и *приближенно* решать такие задачи на квантовом компьютере. Это задача коммивояжера, задача о рюкзаке, задача кластеризации графа и много других задач комбинаторной оптимизации. В нашем курсе будет целый блок, посвященный таким квантовым алгоритмам как *Variational Quantum Eigensolver* и *Quantum Approximate Optimization Algorithm*.

1.3.3 Симуляция квантовой механики

Это то, ради чего Фейнман предложил создать квантовые компьютеры. Это отдельная большая тема, где много квантовой механики. Ей будет посвящено сразу несколько отдельных лекций нашего курса. Но попробуем объяснить в двух словах, не вдаваясь в детали.

Дело в том, что задачи квантовой механики не получается решать аналитически. Казалось бы, в чем проблема, законы Ньютона уже для трех тел тоже аналитически не решаются, но это не мешает нам летать в космос, ведь такую задачу можно решить *численно*. Но тут приходит вторая проблема, а именно, что явно интегрировать уравнение Шредингера по времени, или, по простому, решать квантовую механику *численно* тоже вычислительно почти невозможно более чем для двух частиц.

Казалось бы, что нам с этого. Ведь квантовая механика это удел теоретиков. Но вот проблема, квантовая механика лежит в основе квантовой химии, а та, в свою очередь, лежит в основе вообще всей химии и таких ее прикладных направлений, как создание новых лекарств, разработка новых аккумуляторов для автомобилей Tesla и многоего другого. И сегодня мы вынуждены использовать лишь очень приближенные решения и концепции, точности которых часто не хватает.

Квантовые компьютеры в этом случае могут сделать реальный прорыв. Ведь в силу своей физической природы, квантовый компьютер идеально подходит для симуляции квантовой механики, а значит и решения столь важных сегодня задач из области разработки лекарств и дизайна новых материалов.



Fig. 1.4: Визуализация решения задачи коммивояжера – кратчайший путь, чтобы обехать 12 немецких городов – очень важная задача современной логистики



Fig. 1.5: Эрвин Шредингер, 1887-1961, создатель знаменитого уравнения и мема про кота

1.3.4 Машинное обучение и искусственный интеллект

За последние 10-15 лет машинное обучение достигло поистине небывалых высот в своем развитии. Многие задачи, решение которых силами компьютера, раньше казалось невозможным сегодня успешно решаются при помощи машинного обучения. Примеры таких задач это, например, игра в Go, различение пород чихуахуа по фотографии, распознавание лиц в видеопотоке, составление относительно осмысленных текстов и генерация картин в стиле Пикассо из простых фотографий. Но оно все еще очень далеко от возможностей человеческого мозга. Так, наиболее масштабные искусственные нейронные сети, по примерным оценкам, имеют сегодня размер, эквивалентный 15 миллионам нейронов, в то время как человеческий мозг имеет порядка 85 миллиардов! Вызывает вопросы также и скорость обучения современных нейронных сетей. Так, самые большие языковые модели сегодня обучаются неделями на кластерах из тысяч видеокарт, в то время как человек с его относительно скромными вычислительными возможностями учится говорить всего 2-3 года.

И тут тоже на помощь могут прийти квантовые компьютеры. В данном случае, квантовые аналоги нейронных сетей, а также их комбинации с классическими нейронными сетями уже сегодня показывают впечатляющие результаты. Так, есть работы, где показано, что 4 квантовых нейрона по своей выразительности эквивалентны классической искусственной нейронной сети с ~ 250 нейронами!

Именно квантовому машинному обучению, а также способам его применения и будет посвящена большая часть нашего курса. Мы постараемся рассмотреть все вопросы по этой теме, начиная от теории того, как можно строить квантовые алгоритмы машинного обучения и заканчивая тем, как их можно запрограммировать на современных языках квантового программирования. Если эта тема вам интересна, то этот курс точно для вас!

1.4 Ну и когда взломают биткоин?

Наверное это один из главных вопросов, которые возникают при чтении подобных статей. И ответим сразу: взломают нескоро, времени еще много, 10 лет точно есть.



Fig. 1.6: Биткоин, как и многие другие электронные средства вынуждены будут перейти на пост-квантовую криптографию

1.4.1 Сколько нужно кубитов под разные задачи?

Наверное сразу стоит оценить тот размер, который квантовый компьютер должен иметь для эффективного решения описанных выше задач. Примерно цифры такие:

- алгоритм Шора и взлом современной криптографии (включая биткоин): $\sim 20 \cdot 10^6$ (20 миллионов) кубит
- задачи оптимизации: $\sim 100 \cdot 10^3$ (100 тысяч) кубит
- первые полезные задачи в квантовой химии: $\sim 1 \cdot 10^3$ (1 тысяча) кубит
- квантовое машинное обучение: $\sim 100 - 500$ кубит

Это кстати одна из причин, почему наш курс посвящен по большей части именно квантовому машинному обучению.

1.4.2 Логические vs Физические кубиты

Есть еще такая проблема, что вся квантовая механика вероятностная. А еще, что квантовые компьютеры работают в области микромира и очень чувствительны к любым шумам извне. Это ведет к совершенно недопустимому уровню ошибок в вычислениях и их низкой детерминированности. Например, сегодня хорошим уровнем точности для квантовых компьютеров является 99% на одну операцию. Но ведь каждый алгоритм включает в себя сотни или даже тысячи операций! И тогда уровень ошибок становится совсем печальным.

Но есть и хорошие новости. Сегодня существует очень много классных алгоритмов коррекции ошибок, которые позволяют используя несколько физических кубит с высоким уровнем ошибок создать один логический кубит, имеющий очень низкий уровень ошибок. То есть программист будет писать код, который производит операции над одним кубитом, а на физическом уровне это будет операция над несколькими кубитами. В общем вопрос вполне решаемый. Вот только для создания одного качественного логического кубита может потребоваться до тысячи физических кубит! А те оценки, которые мы привели выше, они как раз про логические кубиты, то есть кубиты с очень высокой точностью операций на уровне классических компьютеров.

1.4.3 Сколько кубит есть сегодня?

Скажем сразу, сегодня уже существуют квантовые компьютеры. Вот только все производители, когда пишут о новом рекорде, имеют в виду чаще всего именно физические кубиты.

Есть квантовые компьютеры с разной архитектурой. Одни имеют больше кубит, но и более высокий уровень ошибок. Другие имеют низкий уровень ошибок, но их трудно масштабировать. Теме квантового железа в этом курсе будет посвящен отдельный блок из нескольких лекций. Но если кратко, то можно назвать примерно такие цифры:

- рекорд в относительно легко масштабируемых, но шумных квантовых компьютерах это ~ 55 кубит
- рекорд в относительно точных, но медленных и плохо масштабируемых компьютерах это ~ 20 кубит
- рекорд в точных и масштабируемых, но очень трудно программируемых компьютерах это ~ 25 кубит

Note: Тут имеем ввиду соответственно:

- сверхпроводящие кубиты, которые сегодня проще всего масштабировать
- ионы в ловушках, которые имеют одну из самых высоких точностей
- фотоны, которые вроде всем хороши, кроме того, что на них программирование это юстировка линз и лазеров на оптическом столе



Fig. 1.7: Квантовый компьютер компании IBM выглядит примерно так

Стоит добавить, что рекорд в точных и масштабируемых, а также программируемых (топологических) кубитах сегодня это ровно 2 кубита. Серьезно, взаимодействие двух логических кубит было опубликовано в *Nature* в этом году (2021).

1.4.4 Какие планы имеют ведущие игроки на этом рынке?

Казалось бы, с такими масштабами биткоину боятся нечего, да и в целом область выглядит не самой перспективной. Но есть один нюанс. Все крупные игроки на рынке создания квантовых компьютеров (*Google Quantum*, *IBM Quantum*, *IonQ*, *Xanadu*) озвучили планы к 2030-му году иметь порядка одного миллиона физических кубит, что эквивалентно порядка тысячи логических кубит. Для криптографии это еще не страшно, но вот многие полезные задачи уже можно будет попробовать решать. Ну и стоит еще раз посмотреть на график закона Мура для классических компьютеров, которые каждые десять лет показывают примерно такой же прогресс!

1.5 О квантовом превосходстве

Очень часто можно услышать разговоры о том, что достигнуто или опровергнуто квантовое превосходство. Попробуем под конец лекции разобраться, что же это такое и почему это важно (или не важно).

1.5.1 Понятие квантового превосходства

Само понятие было сформулировано еще в 2012-м году известным физиком теоретиком Джоном Прескиллом.

Квантовое превосходство это решение на квантовом компьютере задачи, которую нельзя решить на классическом компьютере за разумное время (10 тысяч лет разумным временем не считается). Достижение квантового превосходства это однозначно новый уровень в развитии квантовых вычислений. Но есть один подвох. Дело в том, что речь идет о совершенно любой задаче, независимо от того, насколько она полезна или бесполезна.

Так что когда кто-то заявляет о достижении квантового превосходства, то это важный повод для ученых и разработчиков квантовых компьютеров, но скорее всего это очень малозначимый факт, с точки зрения простого обывателя.

1.5.2 Хронология событий

Ну и в конце приводим краткую хронологию событий.

- 2019 год, компания *Google* заявляет о достижении квантового превосходства. Задача выбрана максимально удобная для квантового компьютера и полностью лишенная практического смысла. По словам разработчиков из *Google* их квантовый компьютер за 4 минуты решил задачу, которую классический суперкомпьютер решал бы 10 тысяч лет. Их квантовый компьютер имел 54 кубита
- 2019 год, компания *IBM* заявляет, что *Google* не учли, что их задачу можно решать на классическом компьютере более оптимально, но без экспериментов
- 2020 год, компания *Alibaba* реализует алгоритм *IBM* на своем суперкомпьютере и решает задачу за ~ 20 дней
- 2021 год, группа китайских ученых оптимизирует классический алгоритм и решает задачу на 60 видеокартах *NVIDIA* за 7 дней



Fig. 1.8: Джон Прескил, который и придумал этот термин. Еще он известен своим знаменитым пари с другим физиком Стивеном Хокингом (которое Хокинг проиграл)

- 2021 год, группа других китайских ученых заявляет, что достигла нового превосходства на квантовом компьютере из 56 кубит

В общем сейчас идет довольно интересный процесс войны меча и щита. Пока одни ученые строят более мощные квантовые компьютеры, другие придумывают более продвинутые алгоритмы их симуляции. Хотя конечно все ученые говорят, что уже где-то на 60-70 кубитах эта история окончательно закончится в пользу квантовых компьютеров.

1.6 А как это вообще выглядит? И сколько стоит?

На сегодня почти все известные технологии создания квантовых компьютеров требуют чего-то из:

- сверхнизкие температуры
- сверхвысокий вакуум
- сверхточная юстировка лазеров на оптическом столе

Или даже всего сразу. Поэтому сегодня почти все квантовые компьютеры продаются через облачные сервисы. Например, относительно недавно ведущий поставщик облачных технологий – компания *Amazon* добавила в свой сервис AWS новый продукт *Amazon Braket*. Этот продукт позволяет взять в аренду самый настоящий компьютер точно также, как мы привыкли брать в аренду процессоры, видеокарты или жесткие диски. Аналогичные продукты сейчас предоставляют и другие крупные игроки на рынке облачных услуг. Хотя это все пока исключительно для целей исследования. Ведь как мы уже поняли, сегодня квантовые компьютеры еще не способны решать реальные задачи. Стоит такое развлечение не очень дорого, например, можно запустить свою квантовую программу на 32-х кубитном компьютере *Aspen-9* всего за \$0.3 (per-task).

Некоторые производители идут дальше и предлагают относительно компактные решения. Так, недавно было представлено 24-х кубитное решение, которое помещается в две стандартных серверных стойки. Но масштабируемость таких устройств вызывает вопросы.

В любом случае, в ближайшие 15-20 лет точно не стоит ждать появление карманного квантового компьютера, или хотя бы квантового сопроцессора в домашнем ПК. Да и в этом нет особого смысла, ведь мало кому дома нужно взламывать биткоин, решать логистическую проблему или разрабатывать высокотемпературный сверхпроводник.

1.7 Заключение

Это вводная лекция, она не даст вам каких-то особых знаний. Скорее, ее цель заинтересовать читателя. Самое интересное будет в основной части курса, где мы будем разбирать квантовые алгоритмы, пытаться симулировать квантовую механику и обучать самые настоящие квантовые нейросети! Ждем вас на курсе!

ПРЕРЕКВИЗИТЫ ДЛЯ ПРОХОЖДЕНИЯ КУРСА QML

Настоящий курс совмещает в себе как теорию для глубинного понимания материала, так и большое количество практики для закрепления навыков и проработки неочевидных ситуаций/проблем. Поэтому предполагается, что некоторые базовые знания у вас уже есть. Проверить себя можно с помощью опционального [входного теста](#), который поможет понять, нужно ли проходить вводные “голубые” лекции — по Python, математике и машинному обучению (15 вопросов всего, по 5 на блок). Тест довольно простой, так что если вы его прошли без ошибок или почти без ошибок — это мало о чём говорит, все равно дальше может быть сложно. А вот если ошибок много, тогда вам стоит обратиться ко вводным “голубым” блокам.

2.1 Python, Poetry и среда разработки

Для успешного прохождения курса вы должны уметь делать и понимать такие вещи, как:

- копирование файлов с GitHub;
- установка Poetry и библиотек Python;
- как запустить Jupyter Notebook;
- основные сочетания клавиш в Jupyter Notebook;
- как запускать код в Jupyter Notebook;
- какие простые типы данных существуют в Python;
- как работать со сложными типами-контейнерами (`list`, `dict`, `tuple`), включая самые популярные методы каждого из них;
- как работает арифметика Python и как переменные разных типов соотносятся друг с другом;
- что такое условные конструкции и ветвление логики;
- что такое блок кода в Python и зачем нужны отступы (табуляции);
- что такое циклы и как их можно использовать применительно к сложным типам данных;
- как писать функции в Python, что такое аргументы функции и какими они бывают;
- что такое декоратор и как его использовать;
- базовый ООП: объявление классов, понятие объекта класса, умение писать методы класса.

Если какая либо из тем вызывает у вас непонимание, то настоятельно рекомендуется освежить знания (или даже их приобрести), пройдя соответствующие уроки в блоке “Основы Python”. Даже если у вас есть опыт работы с ним и написания кода, то предлагается ознакомиться с процессом установки всех необходимых зависимостей и библиотек, а также горячими клавишами и разнообразными функциями в Jupyter Notebook.

2.2 Линейная алгебра и NumPy

Для понимания базовых квантовых алгоритмов и алгоритмов квантового машинного обучения, как и в классическом машинном обучении, не обойтись без линейной алгебры. Если есть время взяться за математику по-серьезному, рекомендуем курс [Gilbert Strang](#) или [Д.В. Беклемишева](#), а также [задачник А.И. Кострикина](#). А если Вы это когда-то изучали линейную алгебру, но подзабыли ее, то поможет блок нашего курса. Хочется, чтобы у Вас не было проблем с такими понятиями как:

- вектор-строка и вектор-столбец;
- линейная зависимость векторов;
- системы линейных уравнений;
- матрицы, определитель и след матрицы;
- линейный оператор;
- комплексное и эрмитово сопряжение;
- скалярное и векторное произведения;
- гильбертово пространство.

Список явно не исчерпывающий и скорее всего явно так и не перечислишь все то, что может встретиться по мере изучения квантовых алгоритмов.

2.3 Машинное обучение

Наконец, чтобы говорить о квантовом машинном обучении, надо иметь неплохое представление о собственно машинном обучении. *Блок этого курса* рассказывает о том, что общего у разных задач машинного обучения и как из основных компонентов, подобно пазлу, складываются различные применения моделей машинного обучения. Этот блок, впрочем, не заменяет хорошей книги или курса по машинному обучению (как курс [Andrew Ng](#), специализация Яндекса и МФТИ, [mlcourse.ai](#), курс “Машинное обучение” на ФКН ВШЭ – Соколов Е. А.) или [учебник по машинному обучению от ШАД](#), покрывающего такие темы как:

- обучение с учителем и без учителя, обучение с подкреплением;
- метрики качества в задачах обучения с учителем;
- функции потерь и сведение задач машинного обучения к задачам оптимизации;
- обработка и построение признаков;
- оценка качества модели и кросс-валидация;
- алгоритмы классификации и регрессии: деревья решений, лес, бустинг, логистическая регрессия и др.;
- алгоритмы ранжирования, метрики качества ранжирования;
- обучение без учителя: снижение размерности, кластеризация, поиск аномалий;
- байесовский взгляд на машинное обучение;
- обучение представлению.

Опять же, это не исчерпывающий список, к тому же покрывающий только “классику”, игнорируя глубокое обучение. Но если что-то из перечисленного вызывает недоумение или если со входным [тестом](#) не задалось, возможно, стоит обратиться к упомянутым курсам.

Part II

Основы Python

CHAPTER
THREE

О БЛОКЕ “PYTHON”

Включает:

- описание процесса установки среды разработки для прохождения курса;
- описание синтаксиса языка программирования Python;
- разбор типовых синтаксических конструкций при программировании на Python;
- примеры анализа возникающих ошибок, помогающие в дальнейшем прохождении курса.

Об этом всём можете почитать в курсе о python от международного сообщества [ods.ai](#) – “основы python”

Part III

Линейная алгебра и numpy

О БЛОКЕ “ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА И NUMPY”

Блок задуман для обсуждения основных понятий и идей линейной алгебры и представляет собой краткое пособие. Данный блок **не является** полноценным учебником по линейной алгебре. Для более детального погружения в тему рекомендуем учебник Тыртышникова Е. Е. “Матричный анализ и линейная алгебра” или “Matrix Analysis” by Roger A. Horn, Charles R. Johnson.

В рамках блока:

- обсудим основные понятия и идеи, такие как **векторы и матрицы**;
- познакомимся с инструментами для работы с векторами и матрицами;
- попробуем что-нибудь посчитать!

Обозначения:

- a – число (скаляр);
- \mathbf{a} – вектор;
- \mathbf{A} – матрица.

Полезные материалы:

- MathProfi: [Аналитическая геометрия](#).
- 3Blue1Brown: [Essence of linear algebra](#).

ВЕКТОРЫ

Автор(ы):

- Эль-Айясс Дани

5.1 Определение

Вектор – это термин, который имеет несколько различных интерпретаций: математическую, геометрическую, физическую и др. Точный смысл данного термина зависит от контекста.

Формально вектор определяется как элемент векторного пространства – множества, на котором определены операции **сложения и умножения вектора на число (скаляр)**, которые должны удовлетворять [8 аксиомам](#).

Для простоты понимания рассмотрим знакомую нам со школьных времен прямоугольную (Декартову) систему координат на плоскости – две перпендикулярные друг другу оси x и y , выбранные на них единичные векторы (орты) \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 и начало координат.

Вектор \mathbf{a} в такой системе координат можно записать следующим образом: $\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$

Замечание 1: Координаты вектора не определяют однозначно его положение на плоскости, а лишь положение конца вектора относительно его начала. Например, вектор $\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ может быть отложен как из точки начала координат $(0, 0)$ с концом в точке $(3, 4)$, так и из произвольной точки, например, $(1, 1)$ с концом в точке $(4, 5)$. Оба этих вектора соответствуют 3 ортам на оси x и 4 на оси y . Обычно, если не сказано иное, предполагается, что вектор отложен из начала координат.

Замечание 2: Вектор можно представить либо как вектор-столбец $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, либо как вектор-строку $(a_1 \ a_2)$. Здесь и далее под вектором будем подразумевать вектор-столбец, если не сказано иного.

Понятие вектора на плоскости можно обобщить на 3-мерное пространство, и, в общем случае, на n -мерное пространство (которое уже не получится визуализировать):

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + \dots + a_n\mathbf{e}_n = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

5.2 Операции с векторами

Как было сказано ранее, в формальном определении существуют две основные операции над векторами:

- сложение:

$$\begin{aligned}\mathbf{a} + \mathbf{b} &= (a_1 + b_1)\mathbf{e}_1 + (a_2 + b_2)\mathbf{e}_2 + \dots + (a_n + b_n)\mathbf{e}_n = \\ &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ \dots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}\end{aligned}$$

- умножения вектора на число (скаляр):

$$\lambda\mathbf{a} = \lambda a_1\mathbf{e}_1 + \lambda a_2\mathbf{e}_2 + \dots + \lambda a_n\mathbf{e}_n = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \dots \\ \lambda a_n \end{pmatrix}$$

Операцию умножения вектора на число можно интерпретировать геометрически, как сжатие / растяжение вектора.

Используя эти две операции, мы можем считать **линейные комбинации векторов**: $\alpha_1\mathbf{a}_1 + \alpha_2\mathbf{a}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{a}_n$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ – векторы, а $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ – числа.

5.3 Норма (длина) вектора

В линейной алгебре для обобщения понятия длины вектора используется термин **норма**. Можно сказать, что понятия длины и нормы эквивалентны.

Формально норма определяется как функционал в векторном пространстве, удовлетворяющий [3 аксиомам](#) и отображающий элементы этого пространства (векторы) в множество неотрицательных вещественных чисел.

Данному определению нормы удовлетворяет множество функционалов, но мы будем рассматривать наиболее часто используемый – **Евклидову норму**.

Для простоты понимания рассмотрим вектор на плоскости. С геометрической точки зрения он представляет собой направленный отрезок. Направленность вектора никак не влияет на его длину, поэтому, при расчете длины, мы можем работать с ним как с отрезком на плоскости и посчитать длину по школьным формулам. Заметим тот факт, что координаты вектора соответствуют числам, умноженным на орты координатных осей, поэтому формула длины вектора выглядит следующим образом: $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$. Соответственно, в общем случае формула выглядит следующим образом: $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2}$

5.4 Скалярное произведение

Одной из самых распространенных операций над двумя векторами является так называемое **скалярное произведение**, результатом которого является число (скаляр) – отсюда и название операции.

Замечание: Кроме скалярного произведения существует также **векторное произведение** над парой векторов, результатом которого являются вектор. Также существует **смешанное произведение** над тройкой векторов, результатом которого является число. Данные операции в рамках курса рассматриваться не будут.

Скалярное произведение используется в определении длины векторов и угла между ними. Данная операция имеет два определения:

- алгебраическое: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_nb_n$

- геометрическое: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta$, где θ – угол между векторами \mathbf{a} и \mathbf{b} .

Используя оба эти определения можно вывести формулу для расчета косинуса угла между векторами:

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|} = \frac{a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2} \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + \dots + b_n^2}}$$

С помощью данной формулы можно прийти к одному из главных свойств скалярного произведения, которое заключается в том, что **два вектора перпендикулярны тогда и только тогда, как их скалярное произведение равно 0**: $\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \Leftrightarrow \cos \theta = 0 \Leftrightarrow \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$

Скалярное произведение можно использовать для расчета нормы вектора следующим образом: $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$

5.5 Линейная независимость

Одним из основополагающих понятий линейной алгебры является **линейная зависимость/независимость**.

Для определения данного понятия рассмотрим набор из нескольких векторов. Набор векторов является **линейно зависимым**, если существует такая ненулевая линейная комбинация векторов данного набора (как минимум один элемент данной комбинации не равен 0) равная нулевому вектору (вектор, состоящий только из 0):

$$\lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \lambda_m \mathbf{a}_m = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\exists j, \lambda_j \neq 0$$

Если набор векторов не является линейно зависимым, то есть не существует ненулевой линейной комбинации векторов данного набора равной нулевому вектору, то такой набор векторов называется **линейно независимым**.

Пример:

- линейно независимый набор векторов (только нулевые коэффициенты линейно комбинации приводят к нулевому вектору):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- линейно зависимый набор векторов (существуют ненулевые коэффициенты линейно комбинации, которые приводят к нулевому вектору):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow 2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 3 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Из определения линейной зависимости можно вывести следующее свойство: Набор векторов линейно зависим тогда и только тогда, когда один из элементов этого набора может быть выражен через оставшиеся.

Замечание: Если векторы рассматривать как какие-то характеристики объектов, то линейную зависимость можно интерпретировать как избыточность данных.

С помощью понятия линейной независимости вводится понятие **размерности** векторного пространства – это максимальное число линейно независимых векторов в нем.

5.6 Базис

В формальном определении вектора не присутствуют никакие его количественные интерпретации, а лишь две операции над векторами и 8 аксиом.

Откуда же появляются количественные измерения? Для того, чтобы это стало понятно, нужно ввести понятия **базиса**.

Базис – это конечный набор векторов в векторном пространстве, такой, что любой вектор этого пространства может быть единственным образом представлен в виде линейной комбинации векторов этого набора.

Вспомним один из примеров выше, где мы представляли прямоугольную систему координат на плоскости и единичные векторы (орты) $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$. $\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ В данном примере мы разложили произвольный вектор \mathbf{a} следующим образом:

$$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

Получается, что орты $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ являются **базисом двумерного векторного пространства**, и с помощью линейной комбинации этих векторов мы можем единственным образом представить любой вектор этого пространства.

Возникает вопрос, данный базис является единственным в двумерном пространстве, или нет?

Ответ на этот вопрос – нет. На самом деле можно взять два любых вектора (**почти любых**), и они тоже будут являться базисом, при условии, что любой вектор можно разложить с помощью их линейной комбинации.

Пример.

Пусть у нас есть вектор $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ в базисе единичных орт, и мы хотим разложить его по другому базису $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix}$:

$$\alpha_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Откуда мы можем найти, что $\alpha_1 = -1, \alpha_2 = -1$:

$$-1 \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} + -1 \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Таким образом, вектор $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ в базисе единичных орт представляется как $\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ в базисе $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix}$.

Но для базиса, как было сказано ранее, подойдет **не любой набор векторов**.

Например через набор векторов $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \end{pmatrix}$ нельзя разложить вектор $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$, поэтому данный набор векторов не является базисом.

В чем же принципиальная разница между этими базисами, и может ли базис двумерного пространства состоять, например, из большего или меньшего числа векторов, чем 2?

У линейной алгебры есть на это ответ: **Любые n линейно независимых векторов n -мерного векторного пространства образуют базис этого пространства**.

Именно из-за линейной зависимости векторов $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \end{pmatrix}$ они не могут являться базисом двумерного пространства.

5.7 Что мы узнали?

- Определение вектора
- Операции с векторами
- Норма (длина) вектора
- Скалярное произведение
- Линейная независимость
- Базис

СКОБКИ

Автор(ы):

- Озерин Алексей
- Пронькин Алексей

Дисклеймер: нам нужен инструментарий для работы с более абстрактными пространствами!

Символ Кронекера и остальные специальные тензоры – это удобные примитивы для низкоуровневой работы с матрицами и векторами. Физики смогли придумать поверх примитивов линейной алгебры отличный синтаксический сахар, т.н. нотацию Дирака. Но давайте начнем с определения гильбертова пространства.

6.1 Гильбертово пространство

Гильбертово пространство – это полное линейное векторное пространство, определяемое:

1. скалярным произведением (u, v) , в простейшем частном случае - $(u, v) = u^\dagger v$;
2. зафиксированной нормой вида $\|v\| = \sqrt{(v, v)}$;
3. метрикой $d(u, v) = \|u - v\| = \sqrt{(u - v, u - v)}$.

6.2 Полное пространство

При нахождении предела некоторой последовательности полное метрическое пространство дает возможность не думать о принадлежности этого предела данному пространству, то есть по своей сути разрешает предельный переход и позволяет доказать множество красивых теорем. Подробнее строгое определение можно посмотреть тут.

6.3 Нотация Дирака, или Bra-Ket нотация

Напомним, что в гильбертовом пространстве для пространства H определено сопряженное пространство H^\dagger . Тогда можно рассмотреть обозначение Ket для элемента v из H как вектор-столбец:

$$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}$$

и обозначение Bra для элемента u из сопряженного пространства H^* как сопряженную вектор-строку

$$u = [u_1^* \quad u_2^* \quad \cdots \quad u_N^*]$$

Bra-ket u и v просто задает скалярное произведение между этими элементами:

$$uv = u_1^*v_1 + u_2^*v_2 + \cdots + u_N^*v_N = [u_1^* \quad u_2^* \quad \cdots \quad u_N^*] \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}$$

Часто, например, требуется показать два граничных состояния кубита 0, 1, тогда мы можем записать их просто как вектор-столбцы: $0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ и $1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. В следующей лекции этот вопрос будет рассмотрен детальнее.

6.4 Внешнее произведение (outer-product)

Также имеет смысл и переставленная запись Ket-Bra, которая называется *внешним произведением*:

$$uv = \begin{bmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_N^* \end{bmatrix} [v_1 \quad v_2 \quad \vdots \quad v_N] = \begin{bmatrix} u_1^*v_1 & u_1^*v_2 & \cdots & u_1^*v_N \\ u_2^*v_1 & u_2^*v_2 & \cdots & u_2^*v_N \\ \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ u_N^*v_1 & \cdots & \cdots & u_N^*v_N \end{bmatrix}$$

По сути это матрица $N \times N$, то есть новый оператор в гильбертовом пространстве. Не все перестановки имеют смысл, например, нельзя записать vv или uv .

Мы вернемся к Ket-Bra чуть ниже, когда будем говорить про операторы проекции.

6.5 Эрмитов оператор

Оператор U называется *эрмитовым*, если он удовлетворяет равенству $(Uv, u) = (v, Uu)$ для всех u, v из H или в матричном виде:

$$U = U^\dagger$$

6.6 Унитарный оператор

Унитарный оператор $\hat{U} : H \rightarrow H$ на гильбертовом пространстве H – это линейный оператор, который удовлетворяет следующему равенству $(Uv, Uu) = (v, u)$ для любых $v \in H, u \in H$. Или в матричной форме:

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = I$$

Напомним, что операция \hat{U}^\dagger (другое частое обозначение в работах – звездочка или $H\hat{U}^* = \hat{U}^H$) в матричных терминах является последовательным применением операции транспонирования и последующего комплексного сопряжения элементов этой матрицы $\hat{U}^\dagger = \overline{\hat{U}}^T$ (порядок этих операций, естественно, не влияет на результат).

```

import numpy as np
import scipy as sp
from scipy import linalg

U_hat = np.array([
    [1 + 0j, 0 + 0j],
    [0 + 0j, 1 + 0j]
])

U_hat_star_byhands = U_hat.conj().T
U_hat_star_long = np.conjugate(np.transpose(U_hat))

print(np.allclose(U_hat_star_long, U_hat_star_byhands))

```

True

Также в Python для многих операций есть соответствующие методы вместо функций и их сокращения, например `U.transpose()` – то же самое, что `U.T`, а `U.conjugate()` – `U.conj()`.

Важное свойство, что любой эрмитов оператор U можно привести к унитарному оператору с помощью взятия матричной экспоненты от матрицы оператора, умноженного на мнимую единицу:

$$\hat{U} = e^{iU}$$

Давайте докажем быстро этот факт: для эрмитовых квадратных матриц можно определить матричные функции через спектральное разложение матрицы, которое в силу свойств эрмитовых матриц имеет вид: $U = S\Lambda S^\dagger$, где S – унитарная матрица перехода к тому базису, где изначальный оператор выражается диагональной матрицей. Тогда матричная функция $f(U) = Sf(\Lambda)S^\dagger$, т.е. мы диагонализируем матрицу и применяем функцию ко всем диагональным элементам, а потом возвращаемся в исходный базис унитарным преобразованием. Соответственно, для экспоненты:

$$e^V = Se^\Lambda S^\dagger.$$

Note: В качестве упражнения для самопроверки можете показать, что такое определение эквивалентно определению через степенной ряд: $e^U = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} U^k$

Доказательство: Проверим определение унитарной матрицы: $\hat{U}^\dagger \hat{U} = (S \exp(i*\Lambda) S^\dagger)^\dagger S \exp(i*\Lambda) S^\dagger$. Пользуясь тем, что эрмитово сопряжение произведения это произведение эрмитовых сопряжений в обратном порядке $((AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger)$ и что эрмитово сопряжение является обратной операцией к себе $((A^\dagger)^\dagger = A)$, а также тем, что S – унитарная матрица (то есть $S \cdot S^\dagger = I$), получаем:

$$(S \exp(i*\Lambda) S^\dagger)^\dagger S \exp(i*\Lambda) S^\dagger = S \exp(-i*\Lambda) S^\dagger S \exp(i*\Lambda) S^\dagger = S \exp(-i*\Lambda) \exp(i*\Lambda) S^\dagger$$

Заметим, что теперь у нас уже скалярная экспонента, которая применяется к элементам диагональной матрицы, и мы можем воспользоваться тем, что произведение экспонент превращается в экспоненту от суммы степеней:

$$S \exp(-i\Lambda + i\Lambda) S^\dagger = S \exp(O) S^\dagger = SIS^\dagger = I$$

В конце мы еще раз воспользовались тем, что S – унитарная. Абсолютно так же доказывается, что $\hat{U}\hat{U}^\dagger = I$.

Note: Кстати, любая матрица вида HH^\dagger является эрмитовой.

Давайте продемонстрируем доказанный факт на примере матрицы дискретного преобразования Фурье без нормировочного коэффициента $\frac{1}{N}$, $N = 3$, преобразованной к DD^\dagger :

```

N = 3
w = np.sqrt(np.exp(-1j * 2 * np.pi / N))

D = np.array([
    [1, 1, 1],
    [1, w, w ** 2],
    [1, w ** 2, w ** 4]
])

U = D @ D.conj().T
print(f"U = {U}")

print(f"D = {D}")
print(f"np.allclose(U @ U.T.conj(), np.eye(N)) = {np.allclose(U @ U.T.conj(), np.eye(N))} # no")

U_hat = linalg.expm(1j * U)
print(f"\n{np.allclose(U_hat @ U_hat.conj().T, np.eye(N)) = {np.allclose(U_hat @ U_hat.conj().T, np.eye(N))}}")
print(f"\n{np.allclose(U_hat.conj().T @ U_hat, np.eye(N)) = {np.allclose(U_hat.conj().T @ U_hat, np.eye(N))}}")

```

```

U = array([[ 3.00000000e+00+0.00000000e+00j,  1.00000000e+00+1.73205081e+00j,
           -1.11022302e-16+7.77156117e-16j],
           [ 1.00000000e+00-1.73205081e+00j,  3.00000000e+00-3.98552134e-18j,
           1.00000000e+00+1.73205081e+00j],
           [-1.11022302e-16-7.77156117e-16j,  1.00000000e+00-1.73205081e+00j,
           3.00000000e+00-1.88596895e-17j]])
D = array([[ 1. +0.j          ,  1. +0.j          ,  1. +0.j          ],
           [ 1. +0.j          ,  0.5-0.8660254j, -0.5-0.8660254j],
           [ 1. +0.j          , -0.5-0.8660254j, -0.5+0.8660254j]])
np.allclose(U @ U.T.conj(), np.eye(N)) = False

np.allclose(U_hat @ U_hat.conj().T, np.eye(N)) = True
np.allclose(U_hat.conj().T @ U_hat, np.eye(N)) = True

```

6.6.1 Пример: оператор-проектор

Оператором проекции является оператор P со свойством $P^2 = P$.

Покажем, что Ket-Bra вида $\Psi\Psi$ обладает этим свойством.

$$(\Psi\Psi)^2 = \Psi\Psi\Psi\Psi = \Psi(\Psi\Psi)\Psi = \Psi\Psi,$$

поскольку вектор состояния – нормированный: $\Psi\Psi = 1$.

Оператор Ket-Bra с вектором состояния Ψ , то есть $\Psi\Psi$ рассматривается во *вводной лекции про кубиты*, а также пригодится позже, когда речь зайдет о *смешанных состояниях*.

6.6.2 Пример: оператор поворота

Оператором поворота по оси вращения $v = (x, y, z)$ на угол θ является

$$M(v, \theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)x^2 & (1 - \cos \theta)xy - (\sin \theta)z & (1 - \cos \theta)xz + (\sin \theta)y \\ (1 - \cos \theta)yx + (\sin \theta)z & \cos \theta + (1 - \cos \theta)y^2 & (1 - \cos \theta)yz - (\sin \theta)x \\ (1 - \cos \theta)zx - (\sin \theta)y & (1 - \cos \theta)zy + (\sin \theta)x & \cos \theta + (1 - \cos \theta)z^2 \end{bmatrix}$$

Например, матрица поворота относительно оси x на 90: $x = 1, y = 0, z = 0, \theta = \frac{\pi}{2}$, будет иметь вид:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \frac{\pi}{2} & -\sin \frac{\pi}{2} \\ 0 & \sin \frac{\pi}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

Если у нас больше измерений, то по тем измерениям, которые не затрагиваются этим поворотом, у нас в строке и столбце стоят нули, кроме пересечения строки и столбца, отвечающих за это измерение - там стоит единица.

Операторы поворота очень важны в квантовых вычислениях. Они рассматриваются отдельно в *лекции про квантовые гейты* и далее используются в *вариационных квантовых схемах* для кодирования классических данных в квантовые операторы.

6.6.3 Пример: оператор дифференцирования

В пространстве многочленов P с базисом $\{1, t, t^2, \dots, t^n\}$ можно задать оператор дифференцирования $\mathcal{D}: P_n \rightarrow P_{n-1}$ в виде матрицы:

$$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & n \end{bmatrix}$$

Тогда производная многочлена $p = a_0 + a_1t + \dots + a_nt^n = [a_0 \ a_1 \ \dots \ a_n] \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ t \\ \vdots \\ t^n \end{bmatrix}$

$$\mathcal{D}(p) = [a_0 \ a_1 \ \dots \ a_n] D \begin{bmatrix} 1 \\ t \\ \vdots \\ t^{n-1} \end{bmatrix} = a_1 + 2a_2t + \dots + na_nt^{n-1}.$$

Про разницу между оператором и матрицей преобразования

Мы с вами рассматривали операторы через конечные матрицы, но на самом деле гильбертово пространство было придумано как раз, чтобы можно было работать с бесконечномерными векторами и применять непрерывные операторы. Можно считать, что есть некоторый дуализм между непрерывным оператором и пределом бесконечной матрицы. Иногда удобнее работать с матрицей, а иногда – с абстрактным оператором.

6.7 Произведение Кронекера

Давайте рассмотрим еще одну интересную операцию, которая называется матричным тензорным произведением (является тензорным произведением для линейных операторов) или произведением Кронекера.

Проще всего его необходимость можно продемонстрировать на примере двух игр: Орел/Решка и бросок кубика. Мы можем записать состояния этих игр через вероятности событий и давайте возьмем монетку со смешанным центром тяжести и такой же кубик:

$$\text{coin} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \text{ для нашей монетки и } \text{dice} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{4}{4791} \\ \frac{20020}{20020} \end{bmatrix} \text{ для нашей игральной kosti.}$$

Тогда если мы захотим сыграть в игру, когда сначала подкидывается монетка, а потом - игральный кубик, нам будет удобно записать это в виде либо очень длинного вектора:

$$\text{game}_{\text{vec}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{5} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{13} \\ \frac{1}{3} \times \frac{4791}{20020} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{5} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} \\ \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} & \frac{2}{3} \times \frac{4791}{20020} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} \end{bmatrix}$$

Либо в виде матрицы, где по строкам будут события монетки, а по столбцам – кубика:

$$\text{game}_{\text{matrix}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \times \frac{1}{4} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{5} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{1}{3} \times \frac{1}{13} \\ \frac{1}{3} \times \frac{4791}{20020} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{5} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} \\ \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} & \frac{2}{3} \times \frac{4791}{20020} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{7} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{11} & \frac{2}{3} \times \frac{1}{13} \end{bmatrix}$$

С помощью произведения Кронекера (или, повторимся, – матричного тензорного произведения) похожие огромные вектора и матрицы можно очень компактно записать:

$$\begin{aligned} \text{game}_{\text{vec}} &= \text{coin} \otimes \text{dice} \\ \text{game}_{\text{matrix}} &= \text{coin}^T \otimes \text{dice} \end{aligned}$$

В общем случае,

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & \cdots & a_{11}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{11} & a_{1n}b_{12} & \cdots & a_{1n}b_{1q} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & \cdots & a_{11}b_{2q} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{21} & a_{1n}b_{22} & \cdots & a_{1n}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11}b_{p1} & a_{11}b_{p2} & \cdots & a_{11}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{p1} & a_{1n}b_{p2} & \cdots & a_{1n}b_{pq} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}b_{11} & a_{m1}b_{12} & \cdots & a_{m1}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{11} & a_{mn}b_{12} & \cdots & a_{mn}b_{1q} \\ a_{m1}b_{21} & a_{m1}b_{22} & \cdots & a_{m1}b_{2q} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{21} & a_{mn}b_{22} & \cdots & a_{mn}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{p1} & a_{m1}b_{p2} & \cdots & a_{m1}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{p1} & a_{mn}b_{p2} & \cdots & a_{mn}b_{pq} \end{bmatrix}$$

Основные его свойства вы можете прочитать в статье: [Произведение Кронекера](#)

Есть и другие нужные тензорные операции, например, чуть больший список вы можете найти в [этой статье](#) или в рекомендованной литературе по квантовой механике.

6.8 Рекомендованная литература

- Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum Illustrated Edition by Leonard Susskind, Art Friedman [SF14] или его русский перевод [15b]. Книга сочетает в себе довольно строгий формализм вместе с интуицией квантовой механики. Главы построены в виде конкретных примеров или задач, которые понимают, зачем та или иная теория необходима.
- Mathematics for machine learning by Marc Peter Deisenroth, A. Aldo Faisal, and Cheng Soon Ong [DFO20]
 - отличная книжка чтобы освежить воспоминания о базовых алгоритмах в машинном обучении и о математике, которая применяется в них. [Доступна бесплатная электронная версия](#).
- Deep Learning by Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville [GBC16] - отличная книжка, чтобы разобраться в основах глубокого обучения, чем-то может заменить предыдущую книгу, отличный старт, если вы хотите разобраться в автоэнкодерах или в других нейросетевых моделях. [Доступна бесплатная электронная версия](#).

6.9 Что мы узнали

- произвол со скобками
- Гильбертовы пространства
- Эрмитовый оператор
- Унитарный оператор
- Примеры различных операторов

МАТРИЦЫ

Автор(ы):

- Эль-Айсс Дани

7.1 Определение

Матрица – это математический объект, представляющий собой прямоугольную таблицу чисел.

У каждой матрицы есть размер, который характеризуется двумя числами – количеством строк и количеством столбцов. Матрицу, состоящую из n строк m столбцов будем называть матрицей размера $n \times m$. Пространство вещественных матриц $n \times m$ обозначается $\mathbf{R}^{n \times m}$. Мы будем рассматривать матрицу либо как набор n вектор-строк, либо как набор m вектор-столбцов.

Замечание: Вектор-строку из n элементов можно рассматривать как матрицу размера $1 \times n$, а аналогичного размера вектор-столбец – как матрицу размера $n \times 1$.

Рассмотрим произвольную матрицу \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

Элемент матрицы \mathbf{A} , стоящий на пересечение строки i и столбца j будем обозначать a_{ij} .

В машинном обучении часто приходится иметь дело с матрицей объекты-признаки. Объекты, как и признаки – это набор числовых характеристик (точки в многомерном пространстве), которые обычно рассматриваются как векторы.

7.2 Операции с матрицами

Аналогично векторным операциям, для матриц определены операции **сложения и умножения на число**:

- сложение:

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \dots & a_{1m} + b_{1m} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \dots & a_{2m} + b_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} + b_{n1} & a_{n2} + b_{n2} & \dots & a_{nm} + b_{nm} \end{pmatrix}$$

- умножения матрицы на число (скаляр):

$$\lambda \cdot \mathbf{A} = \lambda \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda \cdot a_{11} & \lambda \cdot a_{12} & \dots & \lambda \cdot a_{1m} \\ \lambda \cdot a_{21} & \lambda \cdot a_{22} & \dots & \lambda \cdot a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda \cdot a_{n1} & \lambda \cdot a_{n2} & \dots & \lambda \cdot a_{nm} \end{pmatrix}$$

- транспонирование (строки и столбцы меняются местами):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \rightarrow \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Но наибольший интерес представляет операция умножения матриц, которая определяется не самым интуитивным способом.

Рассмотрим операцию скалярного произведения как умножение матрицы размера $1 \times n$ (вектор-строка) на матрицу размера $n \times 1$ (вектор-столбец). Результатом данной операции получается матрица размера 1×1 (скаляр).

Таким образом для получения значения c_{11} результирующей матрицы \mathbf{C} мы скалярно умножили 1-ю строку \mathbf{a}_1 матрицы \mathbf{A} (вектор) на 1-й столбец $\mathbf{b}_{:1}$ матрицы \mathbf{B} (вектор).

Из примере выше мы можем прийти к следующим заключениям:

- для умножения матриц необходимо, чтобы количество столбцов первой матрицы было равно количеству строк второй, иначе нельзя посчитать скалярное произведение
- операция умножения матриц не является коммутативной, то есть $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$

Развивая логику примера выше мы можем перейти к определению операции умножения матриц. Рассмотрим матрицы $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ и $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{p \times m}$. Результатом произведения этих матриц будем матрица $\mathbf{AB} = \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, где значение c_{ij} получится путем скалярного произведения i -й строки $\mathbf{a}_{:i}$ матрицы \mathbf{A} (вектор) на j -й столбец $\mathbf{b}_{:j}$ матрицы \mathbf{B} (вектор):

$$c_{ij} = \mathbf{a}_{:i} \cdot \mathbf{b}_{:j} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{ip}b_{pj}$$

Замечание 1: В результате умножения квадратных матриц размера $n \times n$ получается квадратная матрица того же размера.

Замечание 2: Частными случаями матричного умножения являются операции умножения вектор-строки на матрицу и матрицы на вектор-столбец, в результате которых получаются вектор-строка и вектор-столбец соответственно.

Рассмотрим пример, почему удобно представлять операцию умножения матриц именно таким образом. Пусть имеется система линейных уравнений:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1m}x_m = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2m}x_m = b_2 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nm}x_m = b_n \end{cases}$$

Представим данную систему в матричном виде:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix}$$

7.3 Норма матрицы

Понятие матричной нормы несколько сложнее, чем векторной. Обычно принято рассматривать так называемые **операторные нормы**. Такая норма показывает насколько максимально растягивается произвольный вектор \mathbf{x} при отображении $y = \mathbf{A}\mathbf{x}$. Формально операторная норма определяется следующим образом:

$$\|\mathbf{A}\|_p = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p}$$

Существует множество матричных норм, но наиболее полезной является **спектральная норма**. Опуская математические выкладки, можно показать, что спектральная норма равна максимальному собственному числу матрицы $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$:

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$$

Про собственные числа поговорим позже, а пока вернемся к нормам. Иногда также рассматривают **поэлементные нормы** матриц. Такая норма определяется тем же образом, что и для векторов. Наиболее распространенной из данного вида является **Евклидова норма**, она же **норма Фробениуса**:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_i \sum_j a_{ij}^2}$$

7.4 Ранг матрицы

Вспомним, что матрицу можно рассматривать либо как набор вектор-строк, либо как набор вектор-столбцов, а для набора векторов определено понятие линейной независимости.

Таким образом мы приходим двум следующим понятиям:

- **строчный ранг** матрицы – это максимальное число линейно независимых строк (вектор-строк)
- **столбцовый ранг** матрицы – это максимальное число линейно независимых столбцов (вектор-столбцов)

Тут мы можем задаться вопросом о том, равны ли эти ранги между собой, и если равны, то при каких условиях, и на помощь нам приходит **фундаментальная теорема “о ранге матрицы”**, которая говорит, что ранг, посчитанный по строкам всегда равен рангу, посчитанному по столбцам. Поэтому обычно говорят просто о ранге матрицы.

7.5 Линейные преобразования

В рамках школьной программы все знакомы с понятием функции. Функция – это соответствием между элементами двух множеств.

Например, линейная функция вида $y = f(x) = kx + b$ отображает элементы множества вещественных чисел $x \in \mathbf{R}$ в себя $y \in \mathbf{R}$:

$$f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$$

Парабола $y = f(x) = x^2$ отображает элементы множества вещественных чисел $x \in \mathbf{R}$ во множество неотрицательных вещественных чисел $y \in \mathbf{R}^+ \cup \{0\}$:

$$f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^+ \cup \{0\}$$

Среди всего множества функций есть определенный класс функций, называемых линейными. Этот класс является самым простым среди множества всех функций. Основным свойством линейных функций является пропорциональность x и y : изменение значения функции y пропорционально изменению значения аргумента x . Графиком линейной функции является прямая.

Обобщая идею линейных функций на матрицы и вектора мы можем прийти к понятиям **линейных отображений и линейных преобразований**.

Линейное отображение – это обобщение линейной функции, которое принимает на вход вектор и возвращает вектор. Вектор может быть как той же размерности, так и другой.

Формально, линейное отображение – это отображение множества элементов одного векторного пространства V в другое W

$$f : V \rightarrow W,$$

удовлетворяющее так называемым **условиям линейности**.

Если V и W — это одно и то же векторное пространство, то f называют не просто линейным отображением, а **линейным преобразованием**.

Отображения и преобразования удобно рассматривать как движение в векторном пространстве.

Ранее упоминалось, что при умножении вектора на матрицу мы получаем вектор, поэтому матрица задает преобразование, которое, если проверить условия линейности, является линейным. Соответственно, **матрица задает линейное отображение**.

Например, матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ задает преобразование из векторного пространства размерности n в векторное пространство размерности m .

Замечание 1: Для того, чтобы матрица задавала линейное преобразование, она должна быть квадратной, т.к. в результате умножение вектора на квадратную матрицу его размерность не меняется. Таким образом вектор, как элемент векторного пространства, отображается в то же векторное пространство.

Замечание 2: Пусть имеются две матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$ и $B \in \mathbb{R}^{p \times m}$. Умножив матрицу A на матрицу B мы получим матрицу $C \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Матрица C задает линейное отображение, равное последовательному применению отображений, задаваемых матрицами A и B . Таким образом операция умножения матриц имеет простую интерпретацию - последовательное применение линейных отображений.

Рассмотрим некоторые примеры линейных преобразований на плоскости, задаваемых матрицами размера 2×2 :

- Вращение / поворот:
 - на 90 градусов против часовой стрелки: $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
 - на угол θ против часовой стрелки: $A = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$
- Отражение:
 - относительно оси x : $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
 - относительно оси y : $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
 - относительно линии, образующей угол θ с началом координат: $A = \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix}$
- Масштабирование:
 - в 2 раза по всем направлениям: $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

- Проекция:

– на ось y : $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

7.6 Обратная матрица

Рассмотрим особую матрицу линейного преобразования, которая переводит каждый вектор сам в себя, т.е. никак его не изменяет. Данное преобразование задается так называемой **единичной матрицей**:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Произведение любой матрицы / вектора и единичной матрицы подходящего размера равно самой матрице / вектору (аналог единицы для операции умножения чисел):

$$\mathbf{AE} = \mathbf{EA} = \mathbf{A}$$

Появление такого элемента в пространстве вещественных матриц наводит на мысль о том, что для каждой матрицы должен существовать обратный элемент:

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{E}$$

Замечание: Аналогично операции умножения чисел, если $a \cdot 1 = 1 \cdot a = a$, то существует a^{-1} , такой, что $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = 1$.

Теория линейной алгебры говорит о том, что обратная матрица существует только для **невырожденных квадратных матриц**, строки и столбцы которых линейно независимы.

Те линейные преобразования, которые были приведены в примерах выше задаются невырожденными квадратными матрицами, поэтому для них существуют обратные преобразования, которые тоже будут линейными.

Например, обратными к преобразованиям вращения / поворота, отражения и масштабирования являются эти же преобразования: вращение / поворот, отражение и масштабирование соответственно.

Замечание: Существуют разные алгоритмы нахождения обратной матрицы, которые не будут нами рассматриваться, но с ними можно ознакомиться [здесь](#).

Будем называть линейное преобразование **вырожденным**, если оно задается вырожденной матрицей.

Соответственно, возникает вопрос, чем же так особенны вырожденные линейные преобразования, если для них не существует обратного преобразования?

Невырожденное линейное преобразование устанавливает взаимно-однозначное соответствие между входными и выходными векторами. Вырожденное преобразование этим свойством не обладает.

Это связано с тем, вырожденные линейные преобразования переводят некоторые ненулевые вектора в нулевые (для невырожденных линейных преобразований только нулевой вектор переходит в нулевой):

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{0}, \mathbf{x} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$$

В связи с этим одному выходному вектору (нулевому) соответствует несколько входных векторов, поэтому не существует обратного преобразования.

7.7 Определитель

Введем еще одно из ключевых понятий линейной алгебры – **определитель**.

Определитель – это скалярный показатель (число) **квадратной матрицы** $f : \mathbf{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbf{R}$, который позволяет охарактеризовать некоторые свойства этой матрицы и линейного преобразования, заданного этой матрицей.

Определитель матрицы \mathbf{x} обозначается как: $\det(\mathbf{A}) = |\mathbf{A}| = \Delta(\mathbf{A})$

Формально понятие определителя может быть введено несколькими способами:

- через перестановки
- через свойства определителя
- геометрически

Замечание: В данной лекции не будет рассказано, как посчитать определитель. Ознакомиться с алгоритмом расчета и формальным выводом определителя можно по [ссылке](#).

Определитель обладает следующими важными свойствами – он **равен нулю** тогда и только тогда, когда **строки (столбцы) матрицы линейно зависимы**.

Из этого можно сделать следующие выводы:

- матрица вырожденная тогда и только тогда, когда ее определитель равен 0
- линейное преобразование вырожденное тогда и только тогда, когда определитель матрицы, задающей данное преобразование, равен 0
- если определитель матрицы равен 0, то для данной матрицы не существует обратной

Существуют эффективные алгоритмы вычисления определителя квадратной матрицы, которые позволяют проверять, является матрица вырожденной.

7.8 Собственные числа и векторы

Для некоторых линейных преобразований существуют такие векторы, которые после данного преобразования либо растягиваются, либо сжимаются (тот же вектор, умноженный на некоторое число). Такие векторы называются **собственными векторами** линейного преобразования, а числа, на которые данные векторы умножаются – **собственными значениями**.

Рассмотрим произвольную матрицу линейного преобразования \mathbf{A} . Формально понятия собственных векторов и собственных значений вводятся через следующее равенство: $\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{x}$

Векторы \mathbf{x} , удовлетворяющие данному равенству являются собственными векторами линейного преобразования \mathbf{A} , а соответствующие данным векторам значения λ – собственными числами.

Линейное преобразование может как не иметь собственных векторов (например, поворот в двумерном пространстве), или иметь n собственных векторов с различными собственными значениями.

Собственные числа и собственные значения играют большую роль в линейной алгебре, так как многие соотношения, связанные с линейными преобразованиями, существенно упрощаются в системе координат, построенной на базисе из собственных векторов линейного преобразованиями.

Множество собственных значений линейного преобразованиями (**спектр оператора**) характеризует важные свойства оператора без привязки к какой-либо конкретной системе координат.

Также собственные векторы используются в Методе Главных Компонент, который предназначен для уменьшения размерности данных с потерей наименьшего количества информации.

7.9 Что мы узнали?

- Определение матрицы
- Операции с матрицами
- Норма матрицы
- Ранг матрицы
- Линейные преобразования
- Обратная матрица
- Определитель матрицы
- Собственные числа и векторы матрицы

NUMPY

Автор(ы):

- Лукьяненко Андрей

Numpy – это широко используемая библиотека для вычислений с многомерными массивами. API большей частью вдохновлен MATLAB (великая и ужасная среда, язык и IDE для матричных вычислений), а теперь сам является примером для подражания API различных вычислительных пакетов. Более последовательный гайд стоит посмотреть на [сайте библиотеки](#).

8.1 Массивы

```
import numpy as np

a = np.array([1, 2, 3]) # создадим вектор
print(f"{a = }")

b = np.zeros((2, 2))
print(f"{b = }")

c = np.eye(3)
print(f"{c = }")

q = np.random.random((1, 20))
print(f"{q = }")
```

```
a = array([1, 2, 3])
b = array([[0., 0.],
           [0., 0.]])
c = array([[1., 0., 0.],
           [0., 1., 0.],
           [0., 0., 1.]])
q = array([[0.01294128, 0.20348293, 0.73120059, 0.62173244, 0.83579355,
           0.80912646, 0.71931174, 0.63787129, 0.63977701, 0.92360351,
           0.56482039, 0.8587798 , 0.1918219 , 0.00312923, 0.36884701,
           0.28462991, 0.30170901, 0.20638228, 0.42868277, 0.5924639 ]])
```

8.2 Арифметические операции

Для удобства использования np.ndarray арифметические операторы определены так, чтобы соответствовать ожиданиям:

```
a = np.array([1, 2, 3])
b = np.array([-1, 3, 4])

diff = a - b
print(f"diff = {diff}")

mult = a * b
print(f"mult = {mult}")

scalar_mult = a @ b
print(f"scalar_mult = {scalar_mult}")
```

```
diff = array([ 2, -1, -1])
mult = array([-1,  6, 12])
scalar_mult = 17
```

8.3 Indexing, slicing and sugar

Numpy поддерживает, кажется, все разумные варианты индексации:

```
a = np.arange(16).reshape(4, 4)
print(f"a = {a}")

# просто по индексам
print(f"\n{a[0, 1] = }")
print(f"\n{a[0][1] = }")

# по слайсам
print(f"\n{a[0, 1:3] = }")
print(f"\n{a[2] = }")
print(f"\n{a[2, :] = }")
print(f"\n{a[2, ...] = }")

# по маске
mask = (a % 3 == 0)
print(f"\n{mask = }")
print(f"\n{a[mask] = }")

first_rows = np.array([True, True, False, False])
print(f"\n{a[first_rows] = }")
```

```
a = array([[ 0,  1,  2,  3],
           [ 4,  5,  6,  7],
           [ 8,  9, 10, 11],
           [12, 13, 14, 15]])
```

```
a[0, 1] = 1
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
a[0][1] = 1

a[0, 1:3] = array([1, 2])
a[2] = array([ 8, 9, 10, 11])
a[2, :] = array([ 8, 9, 10, 11])
a[2, ...] = array([ 8, 9, 10, 11])

mask = array([[ True, False, False,  True],
              [False, False,  True, False],
              [False,  True, False, False],
              [ True, False, False,  True]])
a[mask] = array([ 0, 3, 6, 9, 12, 15])

a[first_rows] = array([[0, 1, 2, 3],
                       [4, 5, 6, 7]])
```

Для работы с размерностями часто используются еще три конструкции: `None`, `...` (ellipsis, многоточие) и `:` (двоеточие).

```
a = np.arange(16).reshape(4, 4)
print(f"{a = }")

# None добавляет ось размерности 1
print(f"\n{a[None].shape = }")
print(f"{a[:, :, None].shape = }")

# : превращается в slice (None), берет все элементы вдоль размерности
print(f"\n{a[2, :] = }")
print(f"{a[2, 0:None] = }")

# ... ellipsis, превращается в необходимое число двоеточий ::, ::, :
print(f"\n{a[...] = }")

# также ... удобен когда мы не знаем настоящий шейп массива или нужно не трогать
# несколько подряд идущих размерностей
z = np.arange(27).reshape(3, 3, 3)
print(f"\n{z[0, ..., 1] = }")
print(f"{z[0, :, 1] = }")
```

```
a = array([[ 0, 1, 2, 3],
           [ 4, 5, 6, 7],
           [ 8, 9, 10, 11],
           [12, 13, 14, 15]])

a[None].shape = (1, 4, 4)
a[:, :, None].shape = (4, 4, 1)

a[2, :] = array([ 8, 9, 10, 11])
a[2, 0:None] = array([ 8, 9, 10, 11])

a[...] = array([[ 0, 1, 2, 3],
               [ 4, 5, 6, 7],
               [ 8, 9, 10, 11],
               [12, 13, 14, 15]])
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
z[0, ..., 1] = array([1, 4, 7])
z[0, :, 1] = array([1, 4, 7])
```

В целом в NumPy очень здорово реализованы методы `__getitem__`/`__setitem__`.

```
a = np.array([1, 2, 3])
element = a[2]
print(f"element = {element}")

a[2] = 5
print(f"a = {a}")
```

```
element = 3
a = array([1, 2, 5])
```

Кроме того, мы можем делать индексацию по заданному условию с помощью `np.where`.

```
# создадим вектор
a = np.array([2, 4, 6, 8])

selection = np.where(a < 5)
print(f"selection = {selection}")

# дополнительно можем передать два значения или вектора, при выполнении условия
# выбираются элементы из первого значения/вектора, при невыполнении -- из второго
a2 = np.where(a < 5, 2, a * 2)
print(f"a2 = {a2}")

# np.where работает и с многомерными массивами
b = np.array([[8, 8, 2, 6], [0, 5, 3, 4]])
b_mult = np.where(b < 4, b, 1)
print(f"b_mult = {b_mult}")
```

```
selection = (array([0, 1]),)
a2 = array([ 2,  2, 12, 16])
b_mult = array([[1, 1, 2, 1],
               [0, 1, 3, 1]])
```

8.4 Broadcasting

Что происходит, если мы хотим производить арифметические операции с массивами разных размеров?

```
a = np.array([1, 2, 3])
k = 2
broad = a * k
print(f"broad = {broad}")
```

```
broad = array([2, 4, 6])
```

С точки зрения математики, ничего интересного тут не происходит: мы подразумевали умножение всего вектора на скаляр. Однако матричные операции в numpy справляются и с менее очевидными случаями, например, при

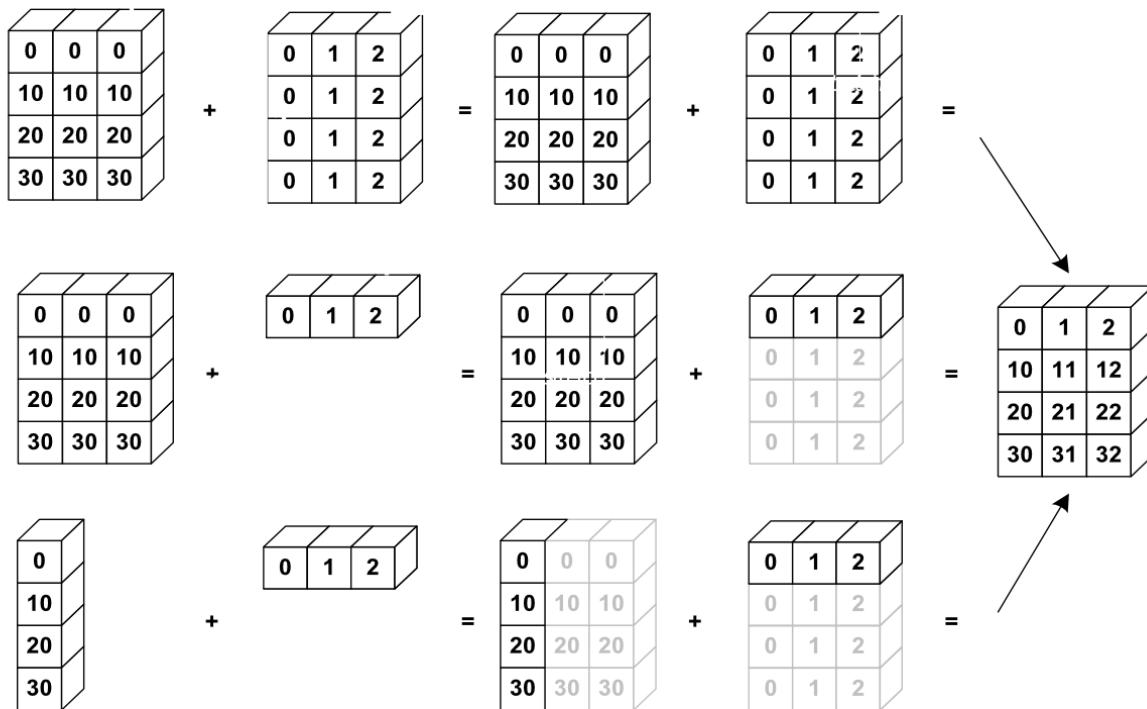
сложении или вычитании вектора и скаляра:

```
a = np.array([1, 2, 3])
k = 2
broad = a - k
print(broad)
```

$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

В numpy приняты следующие правила работы с массивами разного размера:

1. размерности сравниваются справа налево;
2. два массива совместимы в размерности, если она одинаковая, либо у одного из массивов единичная;
3. вдоль отсутствующих размерностей происходит расширение повторением (np.repeat).



Attention: Be aware Автоматический броадкастинг легко приводит к ошибкам, так что лучше делать его самостоятельно в явной форме.

8.5 Операции с плавающей точкой

Отдельно стоит поговорить про числа с плавающей точкой. Число с плавающей точкой (или число с плавающей запятой) – экспоненциальная форма представления вещественных (действительных) чисел, в которой число хранится в виде мантиссы и порядка (показателя степени). При этом число с плавающей точкой имеет фиксированную относительную точность и изменяющуюся абсолютную. В результате одно и то же значение может выглядеть по-разному, если хранить его с разной точностью.

```
f16 = np.float16("0.1")
f32 = np.float32(f16)
f64 = np.float64(f32)
print(f" {f16} , {f32} , {f64} ")
print(f" {f16 == f32 == f64} ")

f16 = np.float16("0.1")
f32 = np.float32("0.1")
f64 = np.float64("0.1")
print(f" {f16} , {f32} , {f64} ")
print(f" {f16 == f32 == f64} ")
```

```
f16 = 0.1, f32 = 0.099975586, f64 = 0.0999755859375
f16 == f32 == f64 = True
f16 = 0.1, f32 = 0.1, f64 = 0.1
f16 == f32 == f64 = False
```

Из-за этого для сравнения массивов с типом float используют `np.allclose`.

```
print(f" {np.allclose([1e10,1e-7], [1.00001e10,1e-8])} ")
print(f" {np.allclose([1e10,1e-8], [1.00001e10,1e-9])} ")
```

```
np.allclose([1e10,1e-7], [1.00001e10,1e-8]) = False
np.allclose([1e10,1e-8], [1.00001e10,1e-9]) = True
```

8.6 NumPy и линейная алгебра

В NumPy много удобных функций, которые позволяют упростить код. Приведем несколько примеров:

```
# матрица с единицами по диагонали и с нулями в остальных ячейках
print(f" {np.eye(2, dtype=int)} ")
# есть возможность указать индекс диагонали
print(f" {np.eye(3, k=-1, dtype=int)} ")

# в NumPy есть свой генератор случайных чисел и векторов
print(f" {np.random.beta(1, 2)} ")
print(f" {np.random.randint(1, 5, (2, 3))} ")
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
# NumPy позволяет заменить значений основной диагонали матрицы.
# внимание, эта функция работает in-place
a = np.random.randint(1, 5, (3, 3))
print(f"{a = }")
np.fill_diagonal(a, 4)
print(f"{a = }")

# Можно сделать и наоборот -- получить вектор значений диагонали матрица
print(f"{np.diag(a) = }")
```

```
np.eye(2, dtype=int) = array([[1, 0],
                             [0, 1]])
np.eye(3, k=-1, dtype=int) = array([[0, 0, 0],
                                    [1, 0, 0],
                                    [0, 1, 0]])
np.random.beta(1, 2) = 0.23750653708444655
np.random.randint(1, 5, (2, 3)) = array([[3, 4, 2],
                                         [1, 3, 2]])
a = array([[4, 4, 3],
           [1, 1, 4],
           [4, 3, 1]])
a = array([[4, 4, 3],
           [1, 4, 4],
           [4, 3, 4]])
np.diag(a) = array([4, 4, 4])
```

8.6.1 Решение систем линейных уравнений

NumPy позволяет решить систему линейных уравнений.

```
a = np.array([[7, 4], [9, 8]])
b = np.array([5, 3])
solution = np.linalg.solve(a, b)
print(solution)
```

```
[ 1.4 -1.2]
```

8.6.2 Обращение матриц

NumPy дает возможность выполнить операцию обращения матриц.

```
a = np.array([[1., 2.], [3., 4.]])
inv = np.linalg.inv(a)
print(inv)
```

```
[[ -2.    1. ]
 [ 1.5  -0.5]]
```

8.6.3 Собственные вектора и числа

Вычисление собственных векторов и чисел.

```
print(np.linalg.eig(np.diag((1, 2, 3))))
```

```
(array([1., 2., 3.]), array([[1., 0., 0.],
 [0., 1., 0.],
 [0., 0., 1.])))
```

8.7 Мы вкратце рассмотрели

- основы работы с NumPy;
- индексацию в массивах;
- broadcasting массивов NumPy;
- операции с плавающей точкой;
- NumPy и примитивы линейной алгебры.

Part IV

Основы машинного обучения

О БЛОКЕ “МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ”

Этот блок рассказывает о том, что общего у разных задач машинного обучения и как из основных компонентов, подобно паззлу, складываются различные применения моделей машинного обучения. Основная наша задача – чтобы у читателя даже не знакомого с машинным обучением возникло понимание того, как это все работает и как “сложить паззл” в новой задаче, будь то кластеризация новостей, детекция лиц на фотографиях или различные сложные применения вариационных квантовых схем, о которых пойдет речь далее в курсе.



Fig. 9.1: Нейронные сети “глазами” других нейросетей – VQGAN и CLIP, сгенерировано в Google Colab

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ КАК ПАЗЛ

Автор(ы):

- Кашницкий Юрий

10.1 Введение

Мы продолжаем вводную часть нашего курса и переходим к машинному обучению. Если тема для вас хорошо знакома, можете пропустить этот блок, при желании можно пройти [этот тест](#), для определения достаточности уровня знаний (там 5 вопросов по Python, 5 – по машинному обучению и столько же – по линейной алгебре). Тест можно проигнорировать, если вы не знакомы с машинным обучением и для вас выглядят магией такие вещи как автоматическая детекция лиц на фото или определение тональности отзыва на товар.

Про машинное обучение, конечно, уже много всего написано, есть и немало неплохих курсов, сочетающих как теорию, так и практику. Но все же теория в этой области еще не догоняет практику, мы пока не понимаем, “почему оно работает”, а гарантии обобщающей способности алгоритмов (т.е. гарантии того, что модель машинного обучения будет работать на новых данных) в теории даются только для очень простых моделей. Таким образом, работа со сложными моделями остается своего рода искусством с примесью математики, инженерии и просто следования хорошим практикам, выработанным, как правило, в корпорациях или академическом сообществе.

В этой лекции мы примем сторону практики и расскажем про задачи машинного обучения как некоторый пазл (или лего, кому что ближе) – меняя разные кусочки, мы будем получать разные прикладные задачи/сценарии/модели применения машинного обучения. Для иллюстрации такое описание мы сопроводим 3-мя примерами:

- задача рекомендации контента и градиентный бустинг
- автоматическая оценка читаемости научной статьи и BERT
- детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах и YOLO

В этой лекции мы не опишем подробно, что это за модели машинного обучения (градиентный бустинг, BERT, YOLO), но зато покажем, что сценарии их применения в разных задачах (анализ табличных данных, текстов, изображений) похожи.

Note: Здесь мы почти не будем говорить о математике. Изложенный взгляд на машинное обучение как ремесло, вполне вероятно, вызовет критику со стороны специалистов в области статистики, эконометрики и теории машинного/статического обучения. Мы осознаем эти риски и тем не менее рассказываем о машинном обучении именно как о ремесле. Акцент в курсе делается на квантовые вычисления и квантовое машинное обучение, и в этой лекции мы опишем задачи “классического” машинного обучения на том уровне, чтобы просто было понятно,

как это переносится на квантово-классические вариационные схемы и прочие алгоритмы, о которых пойдет речь далее в курсе. При этом строгость изложения материала тоже может немного пострадать.

10.2 Составляющие части задачи машинного обучения

Выделим следующие компоненты (“пазлы”), которые просматриваются во многих разных задачах машинного обучения:

- Целевой признак
- Модель
- Данные
- Функция потерь
- Решатель
- Схема валидации и метрика качества

По ходу изложения будем обсуждать упомянутые примеры задач машинного обучения.

10.2.1 Целевой признак

Есть задачи, в которых машинное обучение не нужно, а достаточно экспертных знаний. По закону Ома, известно что напряжение пропорционально силе тока и электрическому сопротивлению, и вряд ли захочется предсказывать напряжение в сети каким-то другим образом, кроме как применением закона Ома. То же самое можно сказать про многие другие физические явления.

Однако, для очень многих явлений вокруг нет хорошего теоретического объяснения или достаточных экспертных знаний. У нас нет “формулы”, которая описала бы, как поставленный лайк к посту в соцсети, возврат кредита, клик по рекомендации товара или локализация заразы в конкретной части легких зависят от прочих факторов. В таких случаях мы можем приблизить такую неизвестную нам формулу с помощью машинного обучения.

В идеале с помощью машинного обучения мы хотели бы предсказывать какое-то событие, явление или процесс так, чтобы от этого была польза: прибыль компании/клиентов, если речь о бизнес-проекте, или новые знания, если это исследовательский проект. При этом напрямую это сделать вряд ли получится, и надо определить целевой признак, который, как мы считаем, будет связан с целевым событием/явлением. Звучит абстрактно, и дать строгое определение таких событий, явлений или процессов вряд ли получится. Поэтому сразу перейдем к примерам.

Note: Перед этим только небольшое замечание, что потребовав наличие целевого признака, мы ограничились рассмотрением задач обучения с учителем ([supervised learning](#)). Это все еще включает очень большой перечень типов задач машинного обучения, но не все.

Пример 1. Рекомендация новостного контента

Новостному порталу хочется понять, какой контент нравится пользователям и по каким ссылкам они будут кликать. Здесь *событием* будет то, что пользователю нравится рекомендуемый контент.

Понятно, что нет возможности установить строгую зависимость такого события от прочих факторов. Поэтому мы определяем целевой признак: факт клика пользователя по показанной рекомендованной ссылке. Мы верим, что клик по ссылке связан с *событием*: если пользователю нравится рекомендуемый контент, он/она перейдет по ссылке.



Fig. 10.1: Блок “Читайте также” на новостном портале

Пример 2. Автоматическая оценка читаемости научной статьи

Допустим, научному журналу хочется автоматически оценивать читаемость текста, чтобы знать, какие статьи можно сразу подавать на рецензию, а какие лучше предварительно направить в сервис proofreading, где статья будет вычитана и поправлена носителем языка.

В идеале мы бы хотели предсказывать, “хорошо” ли написана статья или “плохо”. Но это очень сложно определить формально, и потому есть много метрик читаемости текста, таких как [Automated readability index](#) или [Flesch reading ease](#), которые являются эвристиками и “приближают” то что мы имеем в виду под “хорошо” или “плохо” написанным текстом. Кстати, на момент написания это лекции на платформе Kaggle проходит соревнование по этой теме.

Небольшое лирическое отступление: во многом опыт специалиста по машинному обучению оказывается в способности понять, когда это машинное обучение **не** требуется. Описанную задачу можно решить и без всякого машинного обучения. Можно замерить 5-10 метрик читаемости текста, разметить 100-200 статей вручную (желательно, чтоб это делали эксперты уровня редактора журнала, а еще лучше иметь по 3 оценки на статью) и заключить, хорошо ли метрики читаемости коррелируют с оценками экспертов. Другой вариант – попытаться малой ценой использовать готовые решения, например, Grammarly.

Но если этого окажется недостаточно, придется подумать. Пока остановимся тут и еще раз подчеркнем, что определить читаемость текста напрямую – невозможно, и мы это заменим на другой *Целевой признак*, например, на агрегированную метрику читаемости текста.

Пример 3. Детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах

Последние пару лет мы видели бурное развитие методов глубокого обучения в приложениях к анализу медицинских данных, а в особенности это стало актуальным в симптомах COVID-эпохи.

Допустим, стоит задача определения аномалий на рентгенограммах грудной клетки. В идеале мы хотели мы сразу по таким изображениям обнаруживать симптомы симптомов COVID-19 у пациента. Но заголовок этого примера выдает желаемое за действительное, и, конечно, сразу по снимкам диагностировать не получится.

Поэтому в такой задаче надо аккуратно определить *Целевой признак*. В данном случае их несколько. Согласно [описанию источника данных](#) соревнования, комитет врачей-радиологов проанализировал 6334 рентгенограмм и пометил их метками: ‘Negative for Pneumonia’ (нет пневмонии), ‘Typical Appearance’ (нормально), ‘Indeterminate Appearance’ (неразборчиво) и ‘Atypical Appearance’ (ненормально). Надо четко понимать, что возможности обученной модели будут ограничены имеющейся разметкой и поэтому заголовок “детекция симптомов COVID-19” слегка “желтоват”, в реальности модель детекции сможет выделять участок изображения (bounding box) и помечать это вектором из 4-х значений, соответствующих описанным целевым признакам в обучающей выборке.



Fig. 10.2: Пример данных соревнования по определению аномалий на рентгенограммах грудной клетки. Источник

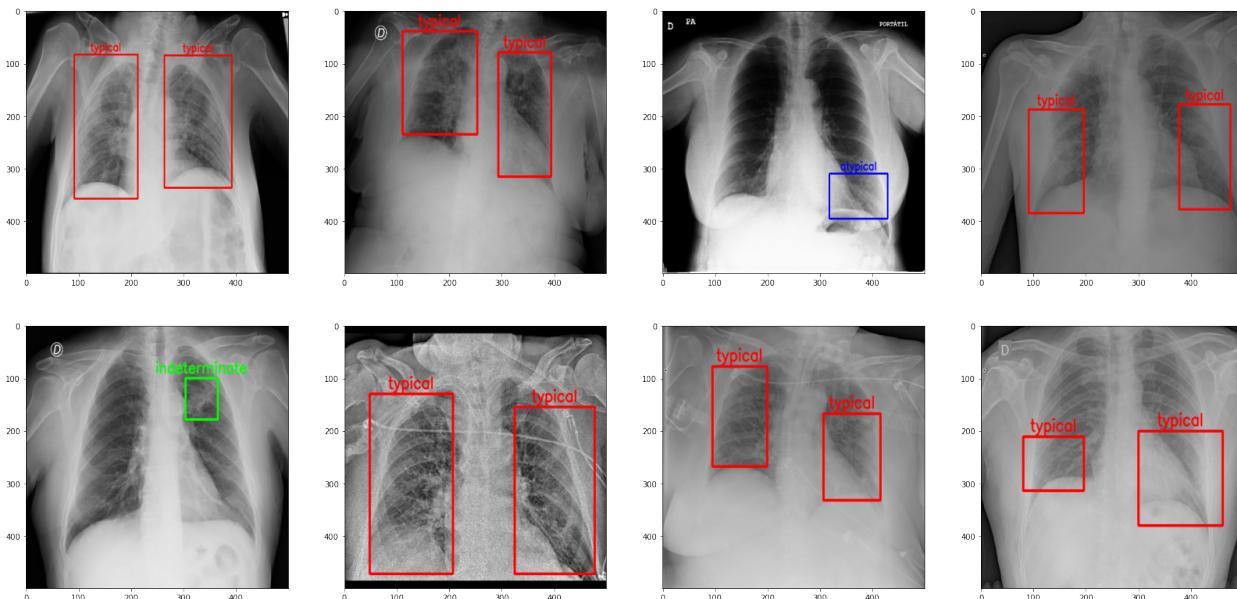


Fig. 10.3: Прогноз модели детекции, обученной на данных соревнования по определению аномалий на рентгенограммах грудной клетки. Источник

10.2.2 Данные

Определение *Целевого признака* неразрывно связано с имеющимися данными. Нет смысла определять целевой признак, который мы не можем измерить или по которому мы не можем собрать данные. Например, если новостной портал не логирует клики пользователей, нет смысла задавать вопрос о том, нравятся ли пользователям показанные рекомендации – для начала надо настроить сервисы для хранения кликов. Другой пример: вряд ли стоит пытаться предсказывать движения денежных активов в микросекундном диапазоне, если нет дорогостоящей инфраструктуры для сбора и обработки таких данных.

Но *Данные* – это, конечно, не только *Целевой признак*. Но и просто *признаки*, также в эконометрике называемые предикторами или независимыми переменными. С помощью *признаков* как раз и получится предсказать *Целевой признак*, а хорошо или плохо – об этом чуть далее.

Продумывание, сбор, и обработка *признаков* – один из наиболее творческих аспектов работы специалистов по машинному обучению. Эта работа может включать в себя общение с представителями предметной области или бизнеса, клиентами, чтение научных статей, применение и более технических приемов, таких как порождение признаков из других признаков (feature engineering) или использование моделей для получения признаков (например, признаки изображения, полученные предобученной искусственной нейросетью).

Пример 1. Рекомендация новостного контента

В этой задаче, как правило, хорошо работают данные о поведении пользователей, попросту – “клики”. Обычно алгоритмы рекомендации хорошо работают при обучении на больших объемах данных, и поэтому большая часть проекта посвящена настройка хранилища данных и обработке потоковых событий (показ рекомендации, клик по рекомендации).

Если есть возможность собрать какие-то признаки пользователей (пол, возраст, указанные интересы) или рекомендуемого контента (темы новостей, представление текста новости “эмбеддингами”), эту информацию можно добавить в модель.

При достаточно хорошей подготовке данных задачу можно решить и без машинного обучения. Довольно сильным прототипом (baseline-решением), опять же, при достаточных объемах данных, может быть просто сортировка контента по Click-through-Rate (CTR). Для каждой новости мы просто собираем статистику, сколько раз она была показана пользователю в качестве рекомендации и сколько раз по ней в итоге кликнули. Отношение кликов к показам и есть Click-through-Rate. Есть, конечно, детали – что делать с “холодными” новостями, без накопленной статистики для расчета CTR, что делать с clickbait-новостями, как фильтровать то, что нельзя показывать в качестве рекомендации. Но после решения этих проблем может оказаться, что просто сортировка по CTR – уже неплохое решение.

Пример 2. Автоматическая оценка читаемости научной статьи

Допустим, научному журналу удалось договориться с сервисом proofreading и получить данные о том, какие статьи хорошо написаны и не требуют множества правок, а какие пришлось переписывать почти что с нуля. Эту информацию можно пытаться использовать для обучения модели, которая для заданного куска текста будет предсказывать, как сильно его нужно поправить.

Тут мы будем иметь дело с задачей из области NLP (Natural Language Processing) – на входе будет просто текст (полный текст статьи или разбитый на параграфы) и по сути мы можем не придумывать *признаки* вручную, а модель сама их извлечет, то есть выучит представление текста. *Целевым признаком* при этом будет, например, какое-либо расстояние (скажем, Левенштейна) между оригинальным текстом и поправленным редактором. Таким образом, это будет задачей регрессии, в которой для текста предсказывается, как сильно его следует изменить.

Опять стоит отметить, что в такой задаче скорее всего нужно много обучающих данных, чтобы описанный алгоритм хорошо заработал.

И еще стоит отметить, что задачи NLP зачастую пересекаются с лингвистикой, и это как раз такой пример. Вполне вероятно, что задачу можно решить без тоже машинного обучения и по-другому – на основе правил-эвристик, разработанных в сотрудничестве с лингвистами. Эдакая версия Grammarly для работы с научными

текстами.

Но дальше в примере будем считать, что лингвистов в команде нет, простые метрики читаемости текста, описанные выше, работают плохо, и мы решаем задачу регрессии, то есть используем машинное обучение.

Пример 3. Детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах

В этой задаче ключевые данные для обучения модели – это собственно изображение, рентгенограмма области грудной клетки и разметка, которая состоит из координат интересующей области изображения и типа области, в данном случае это одна из 4-х меток: ‘Negative for Pneumonia’ (нет пневмонии), ‘Typical Appearance’ (нормально), ‘Indeterminate Appearance’ (неразборчиво) и ‘Atypical Appearance’ (ненормально).

Конечно, у снимков есть разные метаданные, да и форматы медицинских данных обычно специфические, но нам для примера подойдет такое упрощение.

10.2.3 Модель

С моделированием знаком любой исследователь. Чтобы рассчитать минимальную толщину стекла вагона метро для защиты от птиц во время движения по открытым участкам, достаточно представить птицу цилиндром той же массы, и для данной задачи цилиндр будет подходящей моделью птицы.

Подобным же образом, в задачах машинного обучения с учителем *Модель* приближает *Целевой признак* и делает это с помощью *Данных и Параметров*. (Параметры – это неотъемлемая часть модели, и поэтому мы их не выносим как отдельный компонент задач машинного обучения).

Надо понимать, что предлагая модель, мы совершаём уже второе упрощение. Сначала, как мы говорили, *Целевой признак* заменяет нам то, что мы реально хотим знать. А теперь, к тому же, мы заменяем целевой признак на его прогноз с помощью модели.

Пример 1. Рекомендация новостного контента

В задачах рекомендации есть классический алгоритм ALS (Alternative Least Squares), но можно задачу решить и как задачу ранжирования. Это может быть предпочтительно, поскольку можно использовать боевую лошадку машинного обучения на табличных данных – градиентный бустинг (доступно, на русском про эту модель написано [тут](#) на Хабре в рамках курса [mlcourse.ai](#)). Бустинг подходит для задач классификации, регрессии и ранжирования, и его можно использовать также и в описанной задаче.

Также, если бустинг уже используется в компании в других задачах, скорее всего получится безболезненно переиспользовать опыт поддержки модели и соответствующей инфраструктуры в “продакшене” вместо того, чтобы отдельно все это разрабатывать для ALS.

Пример 2. Автоматическая оценка читаемости научной статьи

Описанную задачу, опять же с оговорками про возможность альтернативного подхода без всякого машинного обучения, скорее всего хочется решать с помощью языковых моделей, основанных на трансформерах. В частности, в этой задаче имеет смысл использовать [SciBERT](#), предобученный как раз на научных текстах. Это модель типа BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers, [arXiv](#)), которая основана на архитектуре трансформеров, ставшей настоящей революцией в NLP (оригинальная статья – [Attention is all you need](#), NIPS 2017). BERT используется для представления текста на основе трансформеров и дообучения параметров под многие стандартные задачи NLP – классификация текстов, пар текстов, вопросно-ответные системы, распознавание именованных сущностей и т.д. Подробнее про BERT можно почитать в [постах Jay Alammar](#) (англ.) или в их переводах на русский: “[Transformer в картинках](#)” и “[Ваш первый BERT: иллюстрированное руководство](#)”.

Пример 3. Детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах

Подходов к детекции объектов на изображениях немало, но по соотношению скорости и качества работы особенно хорошо себя зарекомендовала модель [YOLOv5](#). Про принцип работы этой модели можно узнать из лекции “[Detection and segmentation](#)” курса cs231n, также на Хабре можно найти [статью](#) про YOLOv4.



Fig. 10.4: Пример обнаружения объектов на изображении. Источник

10.2.4 Функция потерь

Выбор функции потерь (loss function) зависит от конкретной задачи, и это вопрос, изучаемый в курсах машинного обучения. Функция потерь определена для объектов обучающей выборки и по сути говорит, насколько прогноз хорошо соответствует значению целевого признака.

Тут тонкий момент: примерно для того же нужны метрики качества, о которых речь пойдет ниже. Но функция потерь на практике чаще всего используется именно для того, чтобы задать цель обучения модели (для чего именно ей менять свои параметры) и также оценить, насколько хорошо модель обучилась, попросту, насколько хорошо она “сошлась”.

В отличие от метрик качества, функции потерь вполне могут быть плохо интерпретируемыми, например как логистическая функция потерь (logloss, на русском про нее можно прочитать в [посте](#) А.Г. Дьяконова), и на практике при разработке модели Data Scientist посмотрит на значение функции потерь всего несколько раз:

- при отладке модели стоит проверить, может ли она “переобучиться под мини-батч”, то есть может ли она при обучении всего с парой десятком примеров добиться почти нулевого значения функции потерь. Это важно, чтобы понять, нет ли где-то ошибки в коде описания модели и хватает ли модели сложности (capacity), чтобы подстроиться под данные
- чтобы избежать переобучения, стоит проверять (вручную или автоматически) значение функции потерь на отложенной выборке
- еще значения функции потерь можно сравнивать для разных версий модели, чтобы понять, какая из них лучше обучилась

Заметим, что дизайн функции потерь под задачу, как и придумывание признаков – порой интересный творческий процесс, а итоговая функция потерь, используемая для обучения модели может быть сложной, состоящей из нескольких более простых функций потерь.

Для примера, в задаче переноса стиля (style transfer), в классическом варианте задаются два изображения – “контентное” и “стилевое” – и генерируется третье изображение, которое похоже в целом на “контентное” изображение, но по стилю – на “стилевое”. При этом функция потерь складывается из двух других:

- одна – content loss – передает, насколько отличаются карты признаков (feature maps) генерируемого и “контентного” изображений
- вторая – style loss – соответственно передает, насколько похожи стили генерируемого и “стилевого” изображений. Делается это хитро, и за деталями лучше обратиться, например, к [лекции “Visualizing and Understanding”](#) стэнфордского курса cs231n.



Fig. 10.5: Пример решения задачи Neural Style Transfer из [задания 3](#) стэнфордского курса cs231n.

Функция потерь может включать и много составляющих, больше двух, если мы хотим чтобы модель выучила разные аспекты задачи. К примеру, в [этой статье на Хабре](#) (уровень - продвинутый NLP) Давид Дале описывает дистилляцию нескольких больших NLP моделей для получения маленькой версии русскоязычной модели BERT. Маленький BERT по сути “учится” у больших моделей RuBERT, LaBSE, USE и T5, а описание того, что маленькая модель должна уметь (предсказывать замаскированные токены по контексту, строить представления токенов подобно тому, как это делают большие модели, предсказывать правильный порядок токенов в предложении) – это и есть составление сложной функции потерь.

Пример 1. Рекомендация новостного контента

Задача свелась к задаче ранжирования на табличных данных, и тут можно использовать функцию потерь, которую можно оптимизировать с помощью градиентного бустинга (т.е. дифференцируемую, это важно), для задачи ранжирования. Например, [LambdaMART](#).

Пример 2. Автоматическая оценка читаемости научной статьи

Тут задача свелась к задаче регрессии с текстовым входными данными, и можно использовать простую функцию потерь – среднеквадратичную ошибку (Mean Squared Error). Подробнее о функциях потерь в задаче регрессии можно прочитать в [посте](#) А.Г. Дьяконова.

Пример 3. Детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах

В задаче детекции объектов на изображениях, как правило, для каждого объекта модель выдает 4 числа – координаты окна (bounding box) и его длину и ширину, а также вектор с числами – оценки принадлежности данного региона к каждому из классов. Поэтому функция потерь, как правило, складывается из двух других:

- Для сравнения предсказанного региона с реальным (согласно разметке в обучающей выборке) используется среднеквадратичная ошибка (Mean Squared Error).
- Для сравнения вектора оценок принадлежности региона к каждому из классов с реальным (согласно разметке в обучающей выборке) используется стандартная для задачи классификации функция потерь – логистическая, (также известная под термином “кросс-энтропия”), которую мы упоминали выше.

Object Detection: Single Object

(Classification + Localization)



Fei-Fei Li, Ranjay Krishna, Danfei Xu

Lecture 12 - 41

May 19, 2020

Fig. 10.6: Слайд стэнфордского курса cs231n про функцию потерь в задаче детекции объектов. [Источник](#).

10.2.5 Решатель

Когда мы определились с целевым признаком, обучающими данными, моделью и функцией потерь, мы наконец можем собственно обучать модель – то есть менять ее параметры так, чтобы все лучше и лучше предсказывать целевой признак, что меряется с помощью функции потерь.

Наиболее часто используемых вариантов два:

- явное решение (closed-form solution), в котором просто применяется формула для получения оптимальных параметров модели. Тут *Решателем* будет фреймворк, вычисляющий эту явно выписанную формулу, т.е. скорее всего производящий матричные умножения – например, NumPy.
- оптимизация параметров модели градиентными методами оптимизации. Тут *Решателем* будет алгоритм оптимизации и его конкретная реализация, например, в PyTorch

Самый известный пример первого варианта – это явное решение задачи наименьших квадратов. Существует прямо конкретная формула, включающая в себя перемножение матриц и векторов и взятие обратной матрицы, и дающая оптимальный (по минимизации среднеквадратичной ошибки) вектор весов линейной модели при наличии, конечно, обучающей выборки.

Получилось, что эта лекция вводная, без математических выкладок, поэтому не будем здесь приводить формулы без контекста, детали можно найти в любом классическом учебнике по статистике или машинному обучению или вкратце [в этой статье](#) на Хабре в разделе “Линейная регрессия”.

Во всех трех примерах задач, которые мы попутно рассматриваем и которые сводятся к обучению градиентного бустинга, SciBERT и YOLO соответственно, нет явного решения, которое простой формулой выдало бы оптимальные параметры модели, поэтому параметры подбираются с помощью методов оптимизации. В примере с градиентным бустингом “под капотом” – алгоритм обучения деревьев решений, с ним можно познакомиться [в этой статье](#). А в двух других примерах обучаются искусственные нейронные сети, и сегодня это делается как правило с помощью оптимизаторов, реализованных во фреймворках (PyTorch/TensorFlow/etc), причем аппаратная реализация, в которой работает *Решатель*, – это скорее видеокарта или TPU.

Ко второму из рассмотренных вариантов *Решателя* можно также отнести и автоматическое дифференцирование. Чтобы оптимизировать параметры модели градиентными методами, нужно знать собственно градиенты функции потерь – вектора частных производных функции потерь по параметрам. Попросту говоря, это ответ на вопрос, какие параметры модели стоит изменять и как это скажется на функции потерь, которую мы хотим минимизировать.

Иногда градиенты функции потерь можно найти аналитически, например, в случае линейной или логистической регрессии. Но как правило, в случае более сложных моделей с большим числом параметров аналитическое выражение для градиента функции потерь выглядит слишком громоздко, лучше вычислять его численно. Это задача методов автоматического дифференцирования. В частности, возможно, величайший алгоритм машинного обучения всех времен – алгоритм обратного распространения ошибки (backpropagation) – не что иное как численный метод нахождения производных функции потерь по параметрам модели.

10.2.6 Схема валидации и метрика качества

Наконец, когда мы определились с целевым признаком, обучающими данными, моделью, функцией потерь, а также научились подбирать параметры модели так, чтобы функция потерь уменьшалась, остался последний шаг – решить, как мы действительно поймем, что решаем задачу хорошо.

Выбор метрики качества напрямую связан с тем, чего мы хотим от модели машинного обучения в более широком контексте. Например, в бизнес-процессе могут быть ключевые показатели, которые мы *опосредованно* можем улучшать с помощью машинного обучения. Ключевыми показателями могут быть такие вещи как дневная аудитория приложения, Life-Time Value, показатели, связанные с удержанием (retention) клиентов/сотрудников, удовлетворенность клиентов и т.д. Многие из этих показателей нельзя замерять напрямую и оптимизировать, и тогда искусство Data Scientist-а заключается в том, чтобы выбрать простую метрику качества, которая бы задавалась понятной формулой (например, доля верных ответов или полнота) и при этом неплохо “коррелировала” с тем показателем бизнес-процесса, который хочется оптимизировать и таким образом приносить деньги компании или уменьшать операционные расходы.

Определение схемы валидации нужно, чтобы ответить на следующие вопросы:

- как понять, что модель сработает неплохо на новых, ранее не виденных данных
- как понять, что мы улучшили решение, поменяв модель, ее гиперпараметры или добавив новые признаки
- как понять, что одна модель лучше другой модели, один набор признаков лучше другого при фиксированной модели и т.д.

Во многом это связано с переобучением. Недостаточно просто замерить метрику качества на обучающей выборке. Надо хотя бы разбить выборку на 2 части: на одной обучать модель, на второй – проверить метрику качества. И чаще всего при больших объемах данных и больших моделях ровно так и делают. Но в мире “малых данных” и легковесных моделей более предпочтительна кросс-валидация. В этой схеме выборка делится на несколько частей, а модель обучается столько же раз. При этом каждая из подвыборок один раз является тестовой частью, на которой измеряется качество прогнозов, а все остальные разы она участвует в обучении модели. Таким образом, кросс-валидация дает более надежную оценку того, как модель сработает на новых данных, в сравнении с простым разбиением обучающей выборки на две части.

Вы вряд ли ошибетесь, если на практике будете применять 5-кратную стратифицированную (такую что распределение целевого признака примерно одинаковое в каждой подвыборке) кросс-валидацию, но надо понимать, что кросс-валидация – не панацея. И схема валидации, которую мы тут описываем, – это больше, чем просто кросс-валидация.

Часто выделяют “оффлайн” и “онлайн” режимы валидации. И метрики, полученные на кросс-валидации относятся к первому режиму, “оффлайн”. То есть мы один раз собрали обучающие данные, они больше не меняются, и вот с таким статическим срезом данных мы работаем, создаем признаки, обучаем модели, измеряем значения метрик на кросс-валидации. Но это не отвечает на вопрос, что получится, когда мы “выкатим модель в прод”, какие значения метрик ожидать на новых данных. И тут, как правило, устраиваются А/В-тесты, которые позволяют

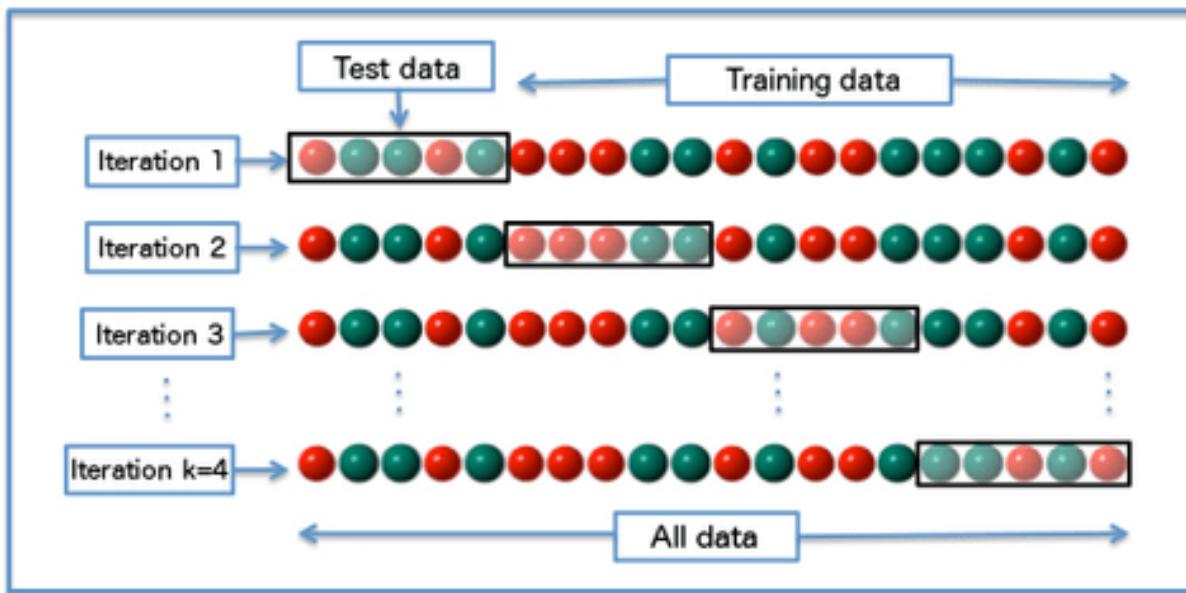


Fig. 10.7: Схема K-fold кросс-валидации.

понять, а действительно ли мы видим эффект от модели, лучше ли вообще с моделью, чем без нее, а если лучше с моделью, то какую модель выбрать. А/В-тестирование – это очень обширная тема, выходящая за рамки данной статьи, и развивать ее тут мы не будем. Только отметим, что определение схемы валидации – зачастую нетривиальный процесс и в зависимости от проекта может быть методологически сложным, в том числе и приводить к ошибкам.

Также заметим, что AutoML, о котором столь многие мечтают, решает некоторые вопросы, но далеко не все. В частности, алгоритмы AutoML не подберут вам правильную схему валидации. Они работают с уже имеющейся схемой валидации, и если валидация неверна, приводит к ошибкам, то тут и AutoML не поможет. Так что Data-Scientist-ов AutoML пока не вытеснит.

Пример 1. Рекомендация новостного контента

В этой задаче для выбора модели и ее гиперпараметров можно использовать обычную кросс-валидацию, но вот чтобы убедиться, что “в бою” модель также работает, лучше настроить А/В-тест (а точнее, для задач ранжирования намного лучше использовать [интерлидинг](#)). Пришло время сказать, что этот пример взят из практики автора этой лекции, Юрия Кашницкого, и в [выступлении на DataFest 2018](#) описывались сложности валидации модели в задаче рекомендации новостей. Вывод такой, что в задачах рекомендации (да и во многих других) надо устроить онлайн-проверку модели (А/В-тест, интерлидинг) помимо офлайн-проверки (кросс-валидации), только таким образом можно удостовериться, что модель действительно полезна, например, что использовать модель – лучше, чем просто показывать самый популярный контент.

Пример 2. Автоматическая оценка читаемости научной статьи

Здесь тоже может использоваться обычная кросс-валидация, хотя на практике из-за объемов данных и размера модели кросс-валидацию проводить будет дорогостоящим и придется удовлетвориться разбиением обучающей выборки на две части и проверкой модели на отложенной части.

Есть, конечно, детали. BERT не очень хорошо работает с длинными текстами, так что скорее всего мы разобьем полный текст статьи на параграфы и будем их подавать в модель по очереди. В таком случае лучше проводить [GroupKFold](#) кросс-валидацию так, чтобы на каждом этапе кросс-валидации в обучающей и проверочной выборке были параграфы из разных статей. Мы вряд ли хотим обучаться на одной половине статьи и проверять модель на второй ее половине – так бы мы получили слишком оптимистичную оценку качества модели.

Но даже при оговоренных тонкостях кросс-валидации самая большая сложность данной задачи – убедиться, что

метрика качества соответствует тому, что мы реально хотим получить в задаче. Это связано со сложностью определения “хорошо” и “плохо” написанного научного текста, о которой мы говорили выше. Поэтому в данной задаче, как и во многих других практических задачах машинного обучения, не обойтись без проверки результатов модели вручную. Такая проверка модели будет делаться уже после кросс-валидации, и в этом смысле она похожа на онлайн-оценку модели.

Пример 3. Детекция симптомов COVID-19 на рентгенограммах

Здесь схема проверки модели очень похожа на предыдущую. Сначала кросс-валидация или проверка модели на отложенной части, а потом – проверка предсказаний модели экспертами. Конечно, никто не будет по одной только кросс-валидации или результатам участников в соревновании Kaggle заключать, что модель прекрасно работает и ее можно нести врачам. В данном случае надо проверить модель на данных, приближенных к тем, которые будут использоваться врачами на практике. Чтобы не было [таких историй](#), как у Google Health, когда Deep Learning модель достигала 90% верных ответов при определении диабетической ретинопатии по фото зрачка, но при обучении на качественных снимках высокого разрешения. А при работе с менее качественными снимками система просто слишком часто отказывалась выносить вердикт из-за того, что была недостаточно уверена в прогнозе.

10.2.7 Заключение

В этой лекции мы описали, из чего складывается постановка задачи машинного обучения и рассмотрели, как общие компоненты проглядываются в разных по своей природе задачах. При этом мы поговорили о моделях-рабочих лошадках в трех разных областях: градиентном бустинге для табличных данных, BERT для текстов и YOLO для детекции изображений.

Немного пожертвовав, возможно, строгостью определения таких понятий как целевой признак или решатель, мы, надеюсь, описали все “пазлы” достаточно абстрактно, чтоб сложилось общее представление о том, как машинное обучение применяется в разных задачах, а также какие подводные камни стоит ожидать при боевом применении машинного обучения. Надеемся, это позволит лучше осознать взаимосвязь разных компонентов в квантово-классических схемах обучения, о которых речь пойдет далее в курсе.

Part V

Квантовые вычисления

О БЛОКЕ “КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ”

Этот блок включает в себя:

- общий рассказ о том, что такое квантовый бит;
- введение в основные квантовые гейты.

Продвинутые темы блока дополнительно рассказывают:

- о квантовой физике, на которой базируется концепция кубита;
- о смешанных состояниях, операторе плотности и энтропии фон Неймана.



Fig. 11.1: Квантовый разум “глазами” VQGAN и CLIP, сгенерировано в Google Colab

КВАНТОВЫЙ БИТ

Автор(ы):

- Синченко Семен

12.1 Описание лекции

Эта лекция расскажет:

- что такое кубит;
- в чем разница между значением и состоянием;
- что такое сфера Блоха;
- какие можно делать операции над кубитами;
- что такое измерение.

12.2 Введение

Это первая лекция основного блока нашего курса. Прежде чем мы начнем детально разбирать понятие кубита, давайте взглянем на общий пайплайн квантовых схем.

Любая квантовая схема включает в себя:

- кубиты, инициализируемые в начальное состояние, обычно 0;
- унитарные и обратимые операции над кубитами;
- измерение кубитов.

Эта лекция посвящена разбору операций для одного кубита. Начнем с понятия кубита и его отличий от бита классических компьютеров.



Fig. 12.1: Схема любого квантового алгоритма

12.3 Что такое кубит

Классический компьютер оперирует двоичными числами – нулем и единицей. Минимальный объем информации для классического компьютера называется битом. Квантовый компьютер оперирует квантовыми битами или кубитами, которые тоже имеют два возможных значения – 0 и 1. Так в чем же разница? В чем особенности квантовых компьютеров, которые дают им преимущества над классическими компьютерами?

Разница в том, что для квантомеханических систем (и кубитов в частности) их *состояния и значения* – это не одно и то же.

12.4 Состояние vs значение

12.4.1 Состояние классического бита

Обычно мы не отличаем состояние классического бита от его значения и считаем, что если бит имеет значение **1**, то и состояние его описывается числом **1**.

12.4.2 Кот Шредингера

Давайте вспомним мысленный эксперимента Шредингера. Кот, который одновременно и жив, и мертв. Понятно, что значение кота точно одно: он либо жив, либо мертв. Но *состояние* его более сложное. Он находится в *суперпозиции* состояний “жив” и “мертв” одновременно.



Fig. 12.2: Кот Шредингера

12.4.3 Состояние кубита

Состояние кубита, если можно так сказать, аналогично состоянию кота Шредингера. Оно отличается от значения кубита и описывается вектором из двух комплексных чисел. Мы будем обозначать состояния (или вектора) символом Ψ (кет – вектор-столбец) – это широко принятая в квантовой механике и квантовых вычислениях нотация Дирака:

$$\Psi = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix}$$

Note: Может возникнуть вопрос, а почему комплексные числа? Короткий ответ на этот вопрос дать сложно. Если в двух словах, то использование комплексных чисел связано с удобством представления матричных групп, используемых в квантовой механике.

Все еще звучит сложно? Тогда нужно вспомнить, что изначально квантовая механика возникла в том числе из-за того, что физики экспериментально обнаружили у фундаментальных частиц свойство корпускулярно-волнового дуализма. Иными словами, электроны, фотоны и другие частицы проявляли как типичные свойства волнового движения (например, интерференцию и дифракцию), и свойства частиц – например, всегда есть минимальная порция (квант!) света или электрического поля. Кстати, часто вместо вектора состояния используется понятие волновой функции, которая описывает плотность вероятности обнаружить частицу в той или иной точке пространства (обычного или специального). Ко времени создания квантовой механики для описания волнового движения ученые уже привыкли использовать комплексные числа, которые позволяют упростить описание многих эффектов за счет разделения амплитуды и фазы процесса. Такое удобство справедливо и для многих задач квантовой физики.

Для более детального ответа авторы курса рекомендуют читать книги по истории квантовой физики (и по самой квантовой физике).

Значение чисел c_0 и c_1 мы обсудим чуть позже, а пока запишем наш кубит Ψ в коде Python. Для начала $c_0 = c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

```
import numpy as np
qubit = np.array([1 / np.sqrt(2) + 0j, 1 / np.sqrt(2) + 0j]).reshape((2, 1))
```

Здесь мы создаем именно вектор-столбец размерности 2×1 .

$$\Psi = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

```
print(qubit.shape)
```

```
(2, 1)
```

12.4.4 Связь состояния и значения кубита

Разберем подробнее вектор Ψ и значение цифр c_0, c_1 . Посмотрим на состояния кубита, значение которого мы знаем точно. То есть “посмотрим на кота Шредингера”, но который точно жив или точно мертв.

Базисные состояния

Посмотрим, как выглядят состояния кубитов с точно определенными значениями:

$$0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad 1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Что мы можем сказать об этих состояниях? Как минимум следующее:

- они ортогональны ($0 \perp 1$);
- они имеют единичную норму;
- они образуют базис.

Что это значит для нас? А то, что любое состояние Ψ можно записать как линейную комбинацию векторов 0 и 1, причем коэффициентами в этой комбинации будут как раз c_0, c_1 :

```
basis_0 = np.array([1 + 0j, 0 + 0j]).reshape((2, 1))
basis_1 = np.array([0 + 0j, 1 + 0j]).reshape((2, 1))

c0 = c1 = 1 / np.sqrt(2)

print(np.allclose(qubit, c0 * basis_0 + c1 * basis_1))
```

```
True
```

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

Амплитуды вероятностей

Квантовая механика устроена таким интересным образом, что если мы будем измерять **значение** кубита, то вероятность каждого из вариантов будет пропорциональна соответствующему коэффициенту в разложении **состояния**. Но так как амплитуды – это в общем случае комплексные числа, а вероятности должны быть строго действительные, нужно домножить амплитуды на комплексно сопряженные значения. В случае наших значений $c_0 = c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ получаем:

```
p0 = np.conj(c0) * c0
p1 = np.conj(c1) * c1

print(np.allclose(p0, p1))
print(np.allclose(p0 + p1, 1.0))
```

```
True
True
```

Видим еще одну важную вещь: сумма вероятностей всех состояний должна быть равна 100%. Это сразу приводит нас к тому, что состояния – это не любые комплексные вектора, а комплексные вектора с единичной нормой:

```
print(np.allclose(np.conj(qubit).T @ qubit, 1.0))
```

```
True
```

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 1.0$$

Мы будем очень часто пользоваться транспонированием и взятием комплексно сопряженного от векторов. В квантовой механике это имеет специальное обозначение $\Psi = \Psi^{T^*} = \Psi^\dagger$ (бра – вектор-строка). Тогда наше правило нормировки из NumPy кода может быть записано в нотации Дирака так:

$$\Psi|\Psi = 1$$

12.5 Сфера Блоха

Описанный выше базис 0, 1 не является единственным возможным. Вектора 0, 1 – это лишь самый часто применимый базис, который называют **Z** базисом. Но есть и другие варианты.

12.5.1 Возможные базисы

Z-базис

Уже описанные нами 0 и 1.

X-базис

Базисные состояния $+$ = $\frac{0+i1}{\sqrt{2}}$ и $-$ = $\frac{0-i1}{\sqrt{2}}$:

```
plus = (basis_0 + basis_1) / np.sqrt(2)
minus = (basis_0 - basis_1) / np.sqrt(2)
```

Y-базис

Базисные состояния R = $\frac{0+i1}{\sqrt{2}}$ и L = $\frac{0-i1}{\sqrt{2}}$:

```
R = (basis_0 + 1j * basis_1) / np.sqrt(2)
L = (basis_0 - 1j * basis_1) / np.sqrt(2)
```

Легко убедиться, что все вектора каждого из этих базисов ортогональны:

```
print(np.allclose(np.conj(basis_0).T @ basis_1, 0))
```

True

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0$$

```
print(np.allclose(np.conj(plus).T @ minus, 0))
```

True

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 0$$

```
print(np.allclose(np.conj(R).T @ L, 0))
```

True

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -i\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -i\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 0$$

Заметьте, что в наших векторных пространствах скалярное произведение – это (в случае действительных векторов) $\vec{a}\vec{b} = \langle a|b\rangle$ (бра-кет). Именно поэтому нужно делать транспонирование и комплексное сопряжение первого вектора в паре.

12.5.2 Сфера Блоха

Обозначения $0, 1, +, -, R, L$ выбраны неслучайно: они имеют геометрический смысл.



Fig. 12.3: Сфера Блоха

Принято считать, что ось **Z** – это основная ось, так как физически квантовые компьютеры измеряют именно по ней. Ось **X** “смотрит на нас” и поэтому обозначается $+$ и $-$. А ось **Y** направлена как бы вдоль, поэтому базис обозначают как “право” (R) и “лево” (L).

Вектор состояния кубита еще называют волновой функцией, и этот вектор может идти в любую точку сферы Блоха. Сама сфера имеет единичный радиус, и это гарантирует нам, что для всех состояний сумма квадратов амплитуд будет равна единице.

Состояние в полярных координатах

Состояние кубита можно выразить через полярные координаты на сфере Блоха:

$$\Psi = c_0 0 + c_1 1 = \cos \theta 0 + e^{i\phi} \sin \theta 1,$$

где θ, ϕ – это угловые координаты на сфере Блоха. В этом смысле сфера Блоха очень удобна для представления состояний одного кубита.

Note: Тут мы воспользовались формулой Эйлера, а также вынесли за скобки локальные фазы множителей c_0 и c_1 . Если у вас возникают трудности с подобными операциями над комплексными числами, то рекомендуем еще раз пересмотреть базовый блок нашего курса по линейной алгебре и комплексным числам, там эти моменты освещаются более подробно.

12.6 Что можно делать с таким кубитом?

12.6.1 Линейные операторы

Любое действие, которое мы совершаем с кубитом в состоянии Ψ , должно переводить его в другое состояние Φ . Что переводит один вектор в другой вектор в том же пространстве? Правильно, матрица. Другими словами, линейный оператор. Мы будем обозначать операторы как \hat{U} .

12.6.2 Унитарность

Как мы уже говорили, квадраты амплитуд – это вероятности. Следовательно, волновая функция должна быть нормирована на единицу. А значит, любой оператор, который переводит одно состояние в другое $\hat{U}\Psi = \Phi$, должен сохранять эту нормировку, то есть должен быть *унитарным*. Более того, свойство унитарности приводит к тому, что любой квантовый оператор еще и сохраняет скалярное произведение:

$$\Psi\hat{U}^\dagger\hat{U}\Psi = \Psi\Psi$$

Другими словами, унитарный оператор удовлетворяет условию $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}$.

12.6.3 Обратимость

Одно из важных следствий унитарности операций над кубитами – это их обратимость. Если вы сделали какую-то последовательность унитарных операций над кубитами \hat{U} , то их можно вернуть в начальное состояние, ведь у унитарного оператора всегда есть обратный оператор $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$.

Note: Квантовый компьютер должен уметь делать несколько не унитарных операций, например, инициализацию кубита в определенное состояние (например, 0) и считывание состояния кубитов. Такие неунитарные операции приводят к потере информации и являются необратимыми.

12.6.4 Пример оператора

В дальнейших лекциях мы разберем много операторов, так как именно операторы (или квантовые гейты) являются основой квантовых вычислений. А пока рассмотрим простой пример: оператор Адамара (**Hadamard gate**), который переводит $0 \rightarrow +$.

Гейт Адамара

Начнем с того, что пока у нас лишь один кубит. Состояние одного кубита – это вектор размерности два. Значит, оператор, который переводит его в другой вектор размерности два – это матрица 2×2 . Запишем оператор Адамара в матричном виде, а потом убедимся, что он унитарный и действительно переводит состояние $0 \rightarrow +$.

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Реализация в Python

```
h = 1 / np.sqrt(2) * np.array([
    [1 + 0j, 1 + 0j],
    [1 + 0j, 0j - 1]
])
```

Унитарность

```
print(np.allclose(np.conj(h).T @ h, np.eye(2)))
```

True

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Проверка

Проверим, что гейт Адамара действительно переводит кубит из состояния 0 в состояние +.

```
print(np.allclose(h @ basis_0, plus))
```

True

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

12.7 Измерение

Измерение в квантовых вычислениях выделяется отдельно именно потому, что оно “открывает” коробку с котом Шредингера: мы точно узнаем, жив он или мертв, и уже никогда не сможем это “забыть” обратно. Вся *суперпозиция* его состояния исчезает. То есть *измерение* – это как раз пример одной из не унитарных операций, которые должен уметь делать квантовый компьютер.

Note: Это интересный факт: исчезновение суперпозиции многим кажется парадоксом, именно поэтому и появляются разные интерпретации квантовой механики, например, многомировая интерпретация Эверетта. Действительно, это кажется немного странным, что полностью обратимая квантовая механика и непрерывная динамика волновых функций вдруг “ломаются” и мы получаем такой коллапс, который еще называют редукцией фон Неймана. Доктору Эверетту тоже это не нравилось и он предложил другую интерпретацию этого процесса. Согласно его теории, когда мы производим измерения, мы как бы “расщепляем” нашу вселенную на две ниточки: в одной кот остается жив, а в другой остается мертв.

Такие теории остаются на уровне спекуляций, так как почти невозможно придумать эксперимент, который бы подтверждал или опровергал такую гипотезу. Скорее это вопрос личного понимания и интерпретации процесса, так как математически подобные теории в итоге дают один и тот же наблюдаемый и измеримый результат.

Как мы уже говорили, состояние кубита может быть записано в разных базисах: $0, 1, +, -, R, L$. *Значение* кубита в каждом из этих базисов может быть измерено. Но что такое измерение с точки зрения математики?

12.7.1 Операторы Паули

На самом деле, любая наблюдаемая величина соответствует какому-то оператору. Например, измерения в разных базисах X, Y, Z соответствуют операторам Паули:

$$\hat{\sigma}^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{\sigma}^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{\sigma}^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

```
 pauli_x = np.array([[0 + 0j, 1 + 0j], [1 + 0j, 0 + 0j]])
 pauli_y = np.array([[0 + 0j, 0 - 1j], [0 + 1j, 0 + 0j]])
 pauli_z = np.array([[1 + 0j, 0 + 0j], [0 + 0j, 0j - 1j]])
```

Эти операторы очень важны, рекомендуется знать их наизусть, так как они встречаются в каждой второй статье по квантовым вычислениям, а также постоянно фигурируют в документации всех основных библиотек для квантового машинного обучения.

12.7.2 Собственные значения

Мы поняли, что есть связь между нашими измерениями и операторами. Но какая именно? Что значит, например, что измерения по оси Z соответствуют оператору $\hat{\sigma}^z$?

Здесь мы приходим к собственным значениям операторов. Оказывается (так устроен наш мир), что *измеряя* какую-то величину в квантовой механике, мы всегда будем получать одно из собственных значений соответствующего оператора, а состояние будет коллапсировать в соответствующий собственный вектор этого оператора. Другими словами, *измеряя* кота Шредингера, мы будем получать значения “жив” или “мертв”, а состояние кота будет переходить в состояние, соответствующее одному из этих значений. А еще *измерение* не является обратимой операцией: однажды открыв коробку с котом и поняв, жив он или мертв, мы уже не сможем закрыть ее обратно и вернуть кота в суперпозицию.

Описанное выше – не абстрактные рассуждения из квантовой физики. Оно пригодится, когда мы будем говорить о решении практических комбинаторных задач, таких как задача о выделении сообществ в графе.

12.7.3 Собственные вектора $\hat{\sigma}^z$

Вернемся к нашему оператору $\hat{\sigma}^z$. Легко убедиться, что его собственные значения равны 1 и -1, а соответствующие им собственные вектора – это $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ и $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$:

```
print(np.linalg.eig(pauli_z))
```

```
(array([ 1.+0.j, -1.+0.j]), array([[1.+0.j, 0.+0.j],
 [0.+0.j, 1.+0.j]]))
```

Таким образом, измерение по оси **Z** всегда будет давать нам одно из этих двух значений и переводить состояние кубита в соответствующий собственный вектор.

Caution: Зачастую кубиты измеряют именно в **Z**-базисе; является неким “стандартом” для квантовых вычислений, так как это измерение “ближе к железу”. Также **Z**-базис удобен для нас из-за диагональности оператора Паули σ^z .

12.7.4 Формальная запись

Формально мы можем записать для любого эрмитова оператора \hat{U} , что собственные состояния этого оператора являются его собственными векторами, а собственные значения в этом случае являются наблюдаемыми значениями:

$$\hat{U}\Psi = u\Psi$$

12.7.5 Другие операторы Паули

Убедимся, что у остальных операторов собственные значения такие же:

```
print(np.linalg.eig(pauli_x))
print(np.linalg.eig(pauli_y))

(array([ 1.+0.j, -1.+0.j]), array([[ 0.70710678-0.j,  0.70710678+0.j],
   [ 0.70710678+0.j, -0.70710678-0.j]]))
(array([ 1.+0.j, -1.+0.j]), array([[[-0.          -0.70710678j,  0.70710678+0.j
   ↪ ],
   [ 0.70710678+0.j         ,  0.          -0.70710678j]]]))
```

Note: Заметим, что собственные вектора могут отличаться на какой-то множитель. В частности, один из собственных векторов оператора $\hat{\sigma}^y$, возвращенный `np.linalg.eig` равен $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -i \\ 1 \end{bmatrix}$, что отличается от $R = \frac{0+i1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$ только домножением на i .

Во-первых, по курсу линейной алгебры мы знаем, что собственные вектора можно домножать на любую константу и они все равно останутся собственными, поскольку если вектор x^* – решение уравнения $Ax^* = \lambda x^*$, то и любой вектор kx^* , $k \in \mathbb{C}$, $k \neq 0$ также будет решением этого уравнения.

Во-вторых, состояния, отличающиеся только множителем, по сути соответствуют одному и тому же состоянию. Любой множитель $c \in \mathbb{C}$, стоящий перед вектором состояния Ψ можно представить в виде $c = e^{i\phi}$, что соответствует повороту на некоторый угол ϕ . При вычислении амплитуды $|\Psi|^2$ этот множитель даст единицу, то есть, другими словами, поворот кубита никак не повлияет на результат измерения кубита. Это известно как *глобальная фаза*, и в научной литературе часто можно встретить фразу “up to a global phase factor”, что означает одинаковые состояния с точностью до поворота (примерно как произвольная константа, добавляемая к интегралу).

Note: Также можно заметить, что у всех операторов Паули нет ни одного общего собственного вектора. Таким образом, мы приходим к ситуации, когда не можем одновременно точно провести измерения двумя разными

операторами, так как наше измерение должно переводить состояние в соответствующий собственный вектор. В квантовой механике это называется **принципом неопределенности**.

12.7.6 Ожидаемое значение при измерении

Мы не будем писать с нуля полный симулятор кубитов, который включает измерения – это требует введения сложного случайного процесса. Но мы можем легко ответить на другой вопрос. А именно: можно ли сказать, какое будет *ожидаемое* значение оператора \hat{U} для состояния Ψ ? Другими словами, какое будет математическое ожидание большого числа измерений? Это можно записать следующим образом:

$$\mathbf{E}(\hat{U}) = \Psi \hat{U} \Psi$$

Например, оператор $\hat{\sigma}^z$ полностью не определен в состоянии $+$, то есть мы будем равновероятно получать значения -1 и 1 , а математическое ожидание, соответственно, будет равно нулю:

```
print(plus.conj().T @ pauli_z @ plus)
```

```
[[-2.23711432e-17+0.j]]
```

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 0$$

С другой стороны, измеряя состояние $+$ в X -базисе мы всегда будем получать 1:

```
print(plus.conj().T @ pauli_x @ plus)
```

```
[[1.+0.j]]
```

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = 1$$

12.7.7 Вероятности битовых строк

Последнее, чего мы коснемся в части измерений – это битовые строки и метод Шредингера. Мы много говорили о вероятностной интерпретации волновой функции и аналогиях с классическим битом, но пока этого никак не касались на практике. Как же получить вероятность определенной битовой строки для произвольного состояния? Если взять все битовые строки размерности вектора состояния и отсортировать их в лексикографическом порядке (например, $0 < 1, 00 < 01 < 10 < 11$, и т.д.), то вероятность каждой битовой строки получается следующим выражением:

$$\mathbf{P} = |\Psi \vec{s}|^2,$$

где \vec{s} – это вектор, каждая компонента которого соответствует порядковой битовой строке или вектор битовых строк. Другими словами, вероятность получить i -ю битовую строку равна квадрату i -го элемента амплитуды волновой функции. Кажется немного запутанным, но на самом деле $|\Psi|^2$ – это идеально и есть плотность вероятности.

12.7.8 Еще пара слов об измерениях

Измерение как проекция на пространство собственных векторов

Мы уже говорили, что при измерении мы как бы “выбираем” один из собственных векторов наблюдаемой. Более строго такой процесс называется проецированием на пространство собственных векторов. Для собственного вектора Φ проекция будет линейным оператором:

$$\hat{P}_\Phi = \Phi\Phi$$

```
super_position = h @ basis_0
eigenvectors = np.linalg.eig(pauli_z) [1]

proj_0 = eigenvectors[0].reshape((-1, 1)) @ eigenvectors[0].reshape((1, -1))
proj_1 = eigenvectors[1].reshape((-1, 1)) @ eigenvectors[1].reshape((1, -1))
```

$$\hat{P}_{\Phi_0} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{P}_{\Phi_1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Правило Борна

Как мы уже говорили, любому эрмитову оператору соответствует какая-либо наблюдаемая величина. А какая наблюдаемая величина соответствует оператору проекции на собственный вектор Φ , про который мы говорили выше? Ответ – вероятность наблюдения собственного значения, которое соответствует этому собственному вектору. Значит, чтобы получить вероятность измерения значения λ_i эрмитова оператора \hat{A} (которое соответствует собственному вектору Φ_i этого оператора) в состоянии Ψ , мы должны измерить величину $\Psi \hat{P}_{\Phi_i} \Psi$. Это называется правилом Борна.

$$\mathbf{P}(\lambda_i) = \Psi \hat{P}_{\Phi_i} \Psi$$

Считать ожидаемое значение оператора мы уже умеем. Давайте убедимся, что для состояния $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ результаты измерений операторов проекций дадут 0.5 и совпадут с результатом упражнения, которое мы проделали ранее:

```
p_0 = super_position.conj().T @ proj_0 @ super_position
print(np.allclose(p_0, 0.5))
```

True

$$\mathbf{P}(\lambda_0) = \left(\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{2}$$

```
p_1 = super_position.conj().T @ proj_1 @ super_position  
print(np.allclose(p_1, 0.5))  
print(np.allclose(p_0 + p_1, 1.0))
```

```
True  
True
```

$$\mathbf{P}(\lambda_1) = \left(\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{2}$$

12.8 Что мы узнали?

- Состояние и значение для кубита – это не одно и то же.
- Состояния представляют собой комплекснозначные вектора.
- Квантовые операторы – унитарные и самосопряженные.
- Измеряемые значения – собственные значения операторов.
- Измерение “ломает” суперпозицию.

КВАНТОВЫЕ ГЕЙТЫ

Автор(ы):

- Синченко Семен
- Беседин Илья

13.1 Описание лекции

Из этой лекции мы узнаем:

- какие есть основные однокубитные и многокубитные гейты;
- как записывать многокубитные состояния;
- как конструировать многокубитные операторы;
- как работать с библиотекой PennyLane.

13.2 Введение

Квантовые гейты являются основными *строительными* блоками для любых квантовых схем, в том числе и тех, что применяются для машинного обучения. Можно сказать, что это своеобразный алфавит квантовых вычислений. Он необходим, чтобы сходу понимать, например, что изображено на подобных схемах:

13.3 Основные однокубитные гейты

В прошлый раз мы познакомились с [операторами Паули](#), а также гейтом Адамара. Как для обычных квантовых алгоритмов, так и для QML-алгоритмов нужны и другие гейты, потому что одни только эти гейты не позволяют перейти во все возможные квантовые состояния. Теперь давайте посмотрим, какие еще однокубитные гейты часто применяются в квантовых вычислениях и квантовом машинном обучении.



FIG. 2: L-VQE ansatz for a 6-qubit quantum state. R_y denotes rotation around the y -axis defined as $R_y(\theta) \equiv e^{-i\frac{\theta}{2}Y}$. Every R_y contains a parameter that is optimized over in the outer loop.

Fig. 13.1: Схема Layered-VQE

13.3.1 Т-гейт

Т-гейт очень популярен в универсальных квантовых вычислениях. Его матрица имеет вид:

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

Любой однокубитный гейт можно аппроксимировать последовательностью гейтов Адамара и Т-гейтов. Чем точнее требуется аппроксимация, тем длиннее будет аппроксимирующая последовательность.

Помимо важной роли в математике квантовых вычислений, гейт Адамара и Т-гейт интересны тем, что именно на них построено большинство предложений по реализации квантовых вычислений с топологической защитой или с коррекцией ошибок. На сегодняшний день эти схемы реально пока не очень работают: никаких топологически защищенных кубитов продемонстрировано не было, а коррекция ошибок не выходит за пределы двух логических кубитов.

13.3.2 Гейты поворота вокруг оси

Поворотные гейты играют центральную роль в квантовом машинном обучении. Вспомним на секунду, как выглядят наши однокубитные состояния на сфере Блоха:

Любой однокубитный гейт можно представить как вращение вектора состояния Ψ на некоторый угол вокруг некоторой оси, проходящей через центр сферы Блоха.

Гейты $\hat{RX}(\phi)$, $\hat{RY}(\phi)$, $\hat{RZ}(\phi)$ осуществляют поворот на определенный угол ϕ вокруг соответствующей оси на сфере Блоха.

Давайте внимательно рассмотрим это на примере гейта \hat{RY} .



Fig. 13.2: Сфера Блоха

Гейт \hat{RY}

Сам гейт определяется следующим образом:

$$\hat{RY}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\phi}{2}) & -\sin(\frac{\phi}{2}) \\ \sin(\frac{\phi}{2}) & \cos(\frac{\phi}{2}) \end{bmatrix}$$

```
import numpy as np

def ry(state, phi):
    return np.array([
        [np.cos(phi / 2), -np.sin(phi / 2)],
        [np.sin(phi / 2), np.cos(phi / 2)]
    ]) @ state
```

Запишем наше состояние 0:

```
basis = np.array([1 + 0j, 0 + 0j]).reshape((2, 1))
```

Внимательно посмотрим на сферу Блоха. Можно заметить, что если повернуть состояние из 0 на $\frac{\pi}{2}$ и измерить значение $\hat{\sigma}^x$, то получится 1. А если повернуть на $-\frac{\pi}{2}$, то получится -1:

```
def expval(state, op):
    return state.conj().T @ op @ state
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

pauli_x = np.array([[0 + 0j, 1 + 0j], [1 + 0j, 0 + 0j]])

print(np.allclose(expval(ry(basis, np.pi / 2), pauli_x), 1.0))
print(np.allclose(expval(ry(basis, -np.pi / 2), pauli_x), -1.0))

```

```

True
True

```

Убедимся также, что вращение на угол, пропорциональный 2π , не меняет результат измерения. Возьмем случайное состояние:

$$\Psi = \begin{bmatrix} 0.42 \\ \sqrt{1 - 0.42^2} \end{bmatrix}$$

```
random_state = np.array([0.42 + 0j, np.sqrt(1 - 0.42**2) + 0j]).reshape((2, 1))
```

Измерим его по осям **X** и **Z**, затем повернем на угол 2π и измерим снова:

```

pauli_z = np.array([[1 + 0j, 0 + 0j], [0 + 0j, 0j - 1]])

print("Z:\n" + str(expval(random_state, pauli_z)) + "\n")
print("X:\n" + str(expval(random_state, pauli_x)) + "\n")

print("Z after RY:\n" + str(expval(ry(random_state, 2 * np.pi), pauli_z)) + "\n")
print("X after RY:\n" + str(expval(ry(random_state, 2 * np.pi), pauli_x)) + "\n")

```

```

Z:
[[-0.6472+0.j]]

X:
[[0.76232025+0.j]]

Z after RY:
[[-0.6472+0.j]]

X after RY:
[[0.76232025+0.j]]

```

Другие гейты вращений

Аналогичным образом определяются гейты \hat{RX} и \hat{RZ} :

$$\hat{RX}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\phi}{2}) & -i \sin(\frac{\phi}{2}) \\ -i \sin(\frac{\phi}{2}) & \cos(\frac{\phi}{2}) \end{bmatrix} \quad \hat{RZ}(\phi) = \begin{bmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\phi}{2}} \end{bmatrix}$$

Общая форма записи однокубитных гейтов

В общем случае однокубитные гейты могут быть также записаны следующим образом:

$$\hat{R}^{\vec{n}}(\alpha) = e^{-\frac{i\alpha \hat{\sigma} \cdot \vec{n}}{2}},$$

где α – это угол поворота, \vec{n} – единичный вектор в направлении оси поворота, а $\hat{\sigma} = \{\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z\}$ – это вектор, составленный из операторов Паули. Если использовать покоординатную запись и $\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ задает ось вращения, то

$$\hat{R}^{\vec{n}}(\alpha) = e^{-i\frac{\alpha}{2}(\hat{\sigma}^x n_x + \hat{\sigma}^y n_y + \hat{\sigma}^z n_z)}.$$

Забегая вперед, можно сказать, что именно гейты вращений – это основа *квантовых вариационных схем*, главного инструмента этого курса.

13.3.3 Phase-shift гейт

Другой важный гейт – это так называемый phase-shift гейт, или \hat{U}_1 гейт. Его матричная форма имеет следующий вид:

$$\hat{U}_1(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix}$$

```
def u1(state, phi):
    return np.array([[1, 0], [0, np.exp(1j * phi)]]) @ state
```

Легко видеть, что с точностью до глобального фазового множителя, который ни на что не влияет, Phase-shift-гейт – это тот же $\hat{R}Z(\phi)$. Он играет важную роль в квантовых ядерных методах.

13.3.4 Гейты \hat{U}_2 и \hat{U}_3

Более редкие в QML гейты, которые однако все равно встречаются в статьях.

$$\hat{U}_2(\phi, \lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -e^{i\lambda} \\ e^{i\phi} & e^{i(\phi+\lambda)} \end{bmatrix} = \hat{U}_1(\phi + \lambda) \hat{R}Z(-\lambda) \hat{R}Y\left(\frac{\pi}{2}\right) \hat{R}Z(\lambda)$$

Давайте убедимся в справедливости этого выражения:

```
def rz(state, phi):
    return np.array([[np.exp(-1j * phi / 2), 0], [0, np.exp(1j * phi / 2)]]) @ state

def u2_direct(phi, l):
    return (
        1
        / np.sqrt(2)
        * np.array([[1, -np.exp(1j * l)], [np.exp(1j * phi), np.exp(1j * (phi + l))]])
    )

def u2_inferenced(phi, l):
    return (
        u1(np.eye(2), phi + l)
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

    @ rz(np.eye(2), -1)
    @ ry(np.eye(2), np.pi / 2)
    @ rz(np.eye(2), 1)
)

print(np.allclose(u2_direct(np.pi / 6, np.pi / 3), u2_inferenced(np.pi / 6, np.pi /_
→3)))

```

True

Схожим образом определяется $\hat{U}_3(\theta, \phi, \lambda)$:

$$\hat{U}_3(\theta, \phi, \lambda) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -e^{1j\lambda} \sin(\frac{\theta}{2}) \\ e^{1j\phi} \sin(\frac{\theta}{2}) & e^{1j(\phi+\lambda)} \cos(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix} = \hat{U}_1(\phi + \lambda) \hat{R}Z(-\lambda) \hat{R}Y(\theta) \hat{R}Z(\lambda)$$

Читатель может сам легко убедиться, что эти формы записи эквивалентны. Для этого надо написать примерно такой же код, что мы писали раньше для \hat{U}_2 .

13.3.5 Еще пара слов об однокубитных гейтах

На этом мы завершаем обзор основных однокубитных гейтов. Маленькое замечание: гейты, связанные со сдвигом фазы, никак не меняют состояние кубита, если оно сейчас 0. Так как мы всегда предполагаем, что начальное состояние кубитов – это именно 0, то перед применением, например, \hat{U}_1 , рекомендуется применить гейт Адамара:

```

print(np.allclose(u1(basis, np.pi / 6), basis))

h = 1 / np.sqrt(2) * np.array([[1 + 0j, 1 + 0j], [1 + 0j, 0j - 1]])
print(np.allclose(u1(h @ basis, np.pi / 6), h @ basis))

```

True

False

Единичный гейт

Самое последнее об однокубитных гейтах – это единичный гейт \hat{I} :

$$\hat{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

```

identity_gate = np.eye(2, dtype=np.complex128)
print(identity_gate)

```

```

[[1.+0.j 0.+0.j]
 [0.+0.j 1.+0.j]]

```

Он не делает с кубитом ровным счетом ничего. Но единичный гейт понадобится нам позже, когда мы будем конструировать многокубитные операторы.

13.4 Многокубитные состояния и гейты

Очевидно, что с одним кубитом ничего интересного, кроме разве что генератора истинно-случайных чисел, мы не сделаем. Для начала разберемся, как выглядят состояния для многокубитных систем.

13.4.1 Многокубитные состояния

В классическом компьютере один бит имеет два значения – 0 и 1. Два бита имеют четыре значения – 00, 01, 10, 11. Три бита имеют восемь значений и так далее. Аналогично состояние двух кубитов – это вектор в пространстве \mathbf{C}^4 , состояние трех кубитов – вектор в пространстве \mathbf{C}^8 , то есть состояние N кубитов описывается вектором размерности 2^N в комплексном пространстве. Вероятности каждой из возможных битовых строк (0000...00, 0000...01, 0000...10, и так далее) получаются по методу Шредингера, который мы обсуждали в конце прошлой лекции:

$$\mathbf{P}(\vec{s}) = |\Psi_{\vec{s}}|^2$$

Нужно отсортировать наши битовые строки в лексикографическом порядке – и вероятность i -й битовой строки будет равна квадрату i -го элемента вектора Ψ .

Формально, многокубитные состояния описываются с помощью математического концепта так называемого *тензорного произведения*, которое в случае линейных операторов идентично *произведению Кронекера*, обозначаемого значком \otimes . Так, если $\Psi_A \in \mathbf{H}_A$ и $\Psi_B \in \mathbf{H}_B$, то $\Psi_{AB} = \Psi_A \otimes \Psi_B \in \mathbf{H}_{AB} = \mathbf{H}_A \otimes \mathbf{H}_B$. О том, как элементы вектора Ψ_{AB} выражаются через элементы векторов Ψ_A и Ψ_B , можно прочитать на Википедии в статье “Произведение Кронекера”.

13.4.2 Многокубитные операторы

Как мы уже обсуждали ранее, квантовые операторы должны переводить текущее состояние в новое в том же пространстве и сохранять нормировку, а еще должны быть обратимыми. Значит, оператор для состояния из N кубитов – это унитарная комплексная матрица размерности $2^N \times 2^N$.

13.4.3 Конструирование многокубитных операторов

Прежде чем мы начнем обсуждать двухкубитные операторы, рассмотрим ситуацию. Представим, что у нас есть состояние из двух кубитов и мы хотим подействовать на первый кубит оператором Адамара. Как же тогда нам написать такой двухкубитный оператор? Мы знаем, что действуем на первый кубит оператором, а что происходит со вторым кубитом? Ничего не происходит – и это эквивалентно тому, что мы действуем на второй кубит единичным оператором. А финальный оператор $2^2 \times 2^2$ записывается через произведение Кронекера:

$$\hat{H} \otimes \hat{I} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \hat{I} & \hat{I} \\ \hat{I} & -\hat{I} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Учитывая, что многокубитные состояния конструируются аналогичным образом через произведение Кронекера, мы можем убедиться в верности нашего вывода:

```
print(np.allclose(np.kron(h @ basis, basis), np.kron(h, identity_gate) @ np.
    ↪kron(basis, basis)))
```

True

13.4.4 Наблюдаемые для многокубитных гейтов

Аналогичным образом можно сконструировать и наблюдаемые. Например, если мы хотим измерять одновременно два спина по оси **Z**, то наблюдаемая будет выглядеть так:

$$\mathbf{ZZ} = \hat{\sigma^z} \otimes \hat{\sigma^z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

```
print(np.kron(basis, basis).conj().T @ np.kron(pauli_z, pauli_z) @ np.kron(basis, basis))
```

[[1.+0.j]]

13.5 Основные двухкубитные гейты

Основные многокубитные гейты, которые предоставляют современные квантовые компьютеры, – это двухкубитные гейты.

13.5.1 CNOT (CX)

Квантовый гейт контролируемого инвертирования – это гейт, который действует на два кубита: *рабочий* и *контрольный*. В зависимости от того, имеет ли контрольный кубит значение 1 или 0, этот гейт инвертирует или не инвертирует рабочий кубит.



Fig. 13.3: Гейт CNOT

Иногда этот гейт также называют гейтом CX. В матричном виде этот оператор можно записать так:

$$\hat{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

```

cnot = (1 + 0j) * np.array(
    [
        [1, 0, 0, 0],
        [0, 1, 0, 0],
        [0, 0, 0, 1],
        [0, 0, 1, 0],
    ]
)

print(np.allclose(cnot @ np.kron(basis, basis), np.kron(basis, basis)))
print(np.allclose(
    cnot @ np.kron(pauli_x @ basis, basis), np.kron(pauli_x @ basis, pauli_x @ basis)
))

```

```

True
True

```

Заметьте, тут мы воспользовались тем, что $\hat{\sigma}^x$ работает так же, как инвертор кубитов: он превращает 0 в 1 и наоборот.

13.5.2 Гейты CY и CZ

Схожие по принципу гейты – это гейты \hat{CY} и \hat{CZ} . В зависимости от значения управляющего кубита к рабочему кубиту применяют соответствующий оператор Паули:

$$\hat{CY} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{CZ} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

13.5.3 Гейт iSWAP

Гейты \hat{CX} , \hat{CY} и \hat{CZ} эквивалентны с точностью до однокубитных гейтов. Это означает, что любой из них можно получить, добавив необходимые однокубитные гейты до и после другого гейта. Например:

$$\hat{CZ} = (\hat{I} \times \hat{H}) \hat{CX} (\hat{I} \times \hat{H}).$$

Этим свойством обладают отнюдь не все двухкубитные гейты. Например, таковым является гейт iSWAP:

$$\text{iSWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

13.5.4 Гейт fSim

Для разных архитектур квантовых процессоров “естественный” гейт может выглядеть по-разному. Например, в квантовом процессоре Google Sycamore естественным является так называемый fermionic simulation gate или fSim. Это двухпараметрическое семейство гейтов вида:

$$\text{fSim}(\theta, \phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -i \sin \theta & 0 \\ 0 & -i \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\phi} \end{bmatrix}.$$

Впрочем, и fSim-гейт не является эквивалентным всему множеству двухкубитных гейтов. В общем случае, чем больше кубитов, тем сложнее будет выглядеть декомпозиция произвольного гейта на физически реализуемые в “железе”.

13.6 Первое знакомство с PennyLane

На сегодняшний день существует достаточно много фреймворков для программирования квантовых компьютеров. Для целей этого курса мы будем использовать [PennyLane](#). Эта библиотека предоставляет высокоуровневый Python API и создана специально для решения задач квантового машинного обучения.

```
import pennylane as qml
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
↳ hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
  warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

13.6.1 Device

Для объявления квантового устройства используется класс `Device`. PennyLane поддерживает работу с большинством существующих квантовых компьютеров, но для целей курса мы будем запускать все наши программы лишь на самом простом симуляторе идеального квантового компьютера:

Note: Разработка и отладка квантовых алгоритмов, как правило, происходит на симуляторах. Но надо понимать, что это работает только пока алгоритмы – “игрушечные” и задействуют пару-тройку или пару десятков кубитов. Надо понимать, что при добавлении каждого следующего кубита требуется вдвое больше ресурсов, чтобы просимулировать квантовый компьютер. Поэтому симуляторы –принципиально плохо масштабируемые аналоги реальных квантовых компьютеров.

```
device = qml.device("default.qubit", 2)
```

Первый аргумент тут – указание устройства, а второй – число кубитов.

13.6.2 QNode

Основной *строительный блок* в PennyLane – это `qnode`. Это функция, которая отмечена специальным декоратором и включает в себя несколько операций с кубитами. Результатом такой функции всегда является измерение. Напишем функцию, которая поворачивает первый кубит на 45° , после чего измеряет оба кубита по оси **Z**.

Сначала на NumPy

```
state = np.kron(basis, basis)
op = np.kron(ry(np.eye(2), np.deg2rad(45)), np.eye(2, dtype=np.complex128))
measure = np.kron(pauli_z, pauli_z)

print((op @ state).conj().T @ measure @ (op @ state))
```

```
[[0.70710678+0.j]]
```

Теперь через QNode

```
@qml.qnode(device)
def test(angle):
    qml.RY(angle, wires=0)
    return qml.expval(qml.PauliZ(0) @ qml.PauliZ(1))

print(test(np.deg2rad(45)))
```

```
0.7071067811865472
```

13.7 Заключение

Это последняя вводная лекция, где мы сами писали операторы и операции на чистом NumPy: это должно помочь лучше понять ту математику, которая лежит “под капотом” у квантовых вычислений. Дальше мы будем пользоваться только PennyLane и в отдельной лекции расскажем, как работать с этим фреймворком.

Итого:

- мы знаем, что такое кубит;
- понимаем линейную алгебру, которая описывает квантовые вычисления;
- понимаем, как можно сконструировать нужный нам оператор и как его применить;
- знаем, что такое измерение и наблюдаемые.

Теперь мы готовы к тому, чтобы знакомиться с квантовыми вариационными схемами и переходить непосредственно к построению моделей квантового машинного обучения.

13.8 Задачи

- Как связаны ось и угол вращения на сфере Блоха с собственными значениями и собственными векторами матрицы однокубитного гейта? Для этого найдите собственные векторы и собственные значения гейта $R^{\vec{n}}(\alpha)$.
- Вокруг какой оси и на какой угол вращает состояние гейт Адамара?
- Гейт SWAP меняет кубиты местами. Его унитарная матрица имеет вид:

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Попробуйте составить последовательность гейтов, реализующую SWAP, из гейтов iSWAP, \hat{CZ} и $\hat{RZ}(\phi)$.

СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Автор(ы):

- Карелин Николай
- Синченко Семен
- Беседин Илья

14.1 Описание лекции

Из этой лекции мы узнаем:

- Что такое матрица плотности
- Как ввести в описание квантовых состояний новый уровень случайности
- Как связаны смешанные (mixed) и запутанные (entangled) состояния
- Как можно описать насколько “сильно” квантовое состояние является смешанным

14.2 Смешанные состояния

Эта глава кратко рассматривает довольно сложный, но крайне важный аспект квантового описания мира: как описать квантовую систему, в которой случайнym является не только результат измерения, но и само состояние квантовой системы, иными словами, когда мы не можем описать квантовую систему определенным вектором состояния.

Как могут появиться такие ситуации?

Прежде всего, в любой реалистичной ситуации квантовая система будет испытывать влияние окружающей среды. Это воздействие окружающей среды на квантовый компьютер, как правило, может быть охарактеризовано некоторой температурой этой самой среды и скоростью термализации системы с ней. В отличие от классических компьютеров, где шумы редко приводят к ошибкам в вычислениях, квантовые компьютеры очень плохо защищены от шумов. Любое масштабное квантовое вычисление является гонкой с процессами декогеренции и релаксации: за время выполнения алгоритма шумы не должны испортить результат вычислений настолько, чтобы его нельзя было использовать.

Вторая, более важная причина использования смешанных состояний состоит в их тесной связи с запутанными состояниями, как показано ниже.

14.3 Почему нельзя обойтись волновой функцией

Рассмотрим реальный физический кубит в состоянии равновесия, например, спин ядра атома в магнитном поле. Статистическая физика говорит нам, что вероятность обнаружить этот спин ориентированным вдоль внешнего поля выше, чем в противоположном полю направлении. Для расчета отношений этих вероятностей можно использовать распределение Больцмана: $p_{\uparrow}/p_{\downarrow} = e^{\frac{2\mu\Delta H}{k_B T}}$, где $2\mu\Delta H$ – разность энергий состояний со спином вдоль поля и в противоположном полю направлений, k_B – постоянная Больцмана, а T – температура. Так как состояний у этой системы всего два, сумма их вероятностей давать единицу: $p_{\uparrow} + p_{\downarrow} = 1$. Таким образом, вероятности состояний однозначно определены.

Волновую функцию, отвечающую такому тепловому состоянию, можно записать в виде

$$\psi = \begin{pmatrix} \sqrt{p_{\uparrow}} \\ \sqrt{p_{\downarrow}} e^{i\phi} \end{pmatrix},$$

где значение фазы ϕ не определено. Однако ϕ определяет поведение системы не в меньшей мере, чем вероятности p_{\uparrow} и p_{\downarrow} . ϕ может равновероятно принимать любые значения. Таким образом, уже даже состояние теплового равновесия нельзя описать одной волновой функцией – это будет распределением вероятности по волновым функциям с разным ϕ .

14.4 Матрица плотности

Оказывается, что вместо распределения вероятностей по волновым функциям можно использовать более простую конструкцию – матрицу плотности. Если система находится в состояниях Φ_n с вероятностями p_n , то матрицу плотности можно определить как

$$\rho = \sum_n p_n \Phi_n \Phi_n^*. \quad (14.1)$$

Выражение $\Phi_n \Phi_n^*$ обозначает произведение вектора-столбца на вектор-строку – результатом будет матрица. Важно, что значение любой ожидаемой величины (отвечающей оператору \hat{A}) можно записать через ρ :

$$\mathbb{E}[A] = \sum_n p_n \Phi_n \hat{A} \Phi_n^* = \sum_n p_n \text{Tr} [\Phi_n \Phi_n^* \hat{A}] = \text{Tr} [\rho \hat{A}]$$

Математическое обоснование этой циклической перестановки можно получить, расписав матричные произведения покомпонентно:

$$\Phi_n \hat{A} \Phi_n^* = \sum_{i,j} \Phi_n^{i*} A_{ij} \Phi_n^j = \text{Tr} [\Phi_n \Phi_n^* \hat{A}].$$

Любую наблюдаемую физическую величину можно выразить в виде ожидаемой величины некоторого эрмитова оператора – а значит, описание с помощью матрицы плотности является универсальным для любых случайных квантовых систем.

Стоит заметить, что матрица плотности для подсистем была впервые введена в научный оборот знаменитым советским физиком, лауреатом Нобелевской премии Львом Ландау. [15a]



Fig. 14.1: Лев Ландау, 1908-1968

14.5 Чистые и смешанные состояния

Состояния, которые описываются одной единственной волновой функцией Ψ , называются *чистыми* (англ. *pure states*). Для таких состояний выражение для матрицы плотности получается тривиальным:

$$\rho = \Psi\Psi \quad (14.2)$$

Матрица плотности чистого состояния является *оператором-проектором*: действие оператора на волновую функцию произвольного состояния Φ дает проекцию Φ на Ψ . Состояния, которые нельзя описать одним вектором состояния, а можно лишь матрицей плотности, называются *смешанными* (англ. *mixed states*).

14.5.1 Чистота состояния

Можно легко показать, для оператора-проектора (??) выполняется тождество

$$\rho^2 = \Psi\Psi\Psi\Psi = \Psi\Psi = \rho$$

и следовательно, для чистого состояния

$$\text{Tr}(\rho^2) = 1$$

(напомним, что мы всегда считаем вектора состояния нормированными на единицу).

Аналогичным образом, но после более длинных выкладок можно показать, что в общем случае

$$\text{Tr}(\rho^2) \leq 1,$$

причем знак равенства в последней формуле возможен, только если в формуле (??) сумма имеет лишь одно слагаемое (т.е. состояние является чистым). Последнее свойство матрицы плотности позволяет ввести ряд величин, характеризующих смешанные и запутанные состояния, о чем будет рассказано в заключительном разделе этой лекции. Величина

$$\gamma = \text{Tr}(\rho^2) \quad (14.3)$$

называется *чистотой состояния* (*quantum state purity*).

14.5.2 Энтропия

Энтропия фон Неймана – это другая численная характеристика того, насколько сильно наша система смешанная. Ее выражение очень похоже на выражение для классической [энтропии Шеннона](#). Только в отличие от классики, в квантовой механике мы имеем *матрицу* плотности, поэтому в выражении у нас фигурирует [матричный логарифм](#):

$$S = -\text{Tr}(\rho \cdot \ln(\rho)) \quad (14.4)$$

14.5.3 Спектральная декомпозиция матрицы плотности

Определение матрицы плотности (??) представляет собой сумму матриц плотностей чистых состояний, взятых с некоторыми вероятностями. Интересно, что совершенно разным комбинациям чистых состояний могут соответствовать одинаковые матрицы плотности. Например, состояние кубита, который с вероятностью

50% находится в состоянии 0 и с вероятностью 50% в состоянии 1 совершенно неотличимо от такой же равновероятной смеси состояний + и -:

$$\frac{1}{2} (00 + 11) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (+ + + --)$$

Соотношение (??) также можно рассматривать как спектральную декомпозицию матрицы плотности. В этом случае состояния Ψ_n образуют ортонормированный базис, а вероятности p_n – это собственные значения ρ . Как чистота (??), так и энтропия (??) зависят лишь от этих собственных значений.

14.6 Смешанные состояния и запутанность

Рассмотрим ситуацию, когда описываемую квантовую систему Φ можно разделить на две подсистемы, ϕ и ψ , и состояние этой системы Φ является суперпозицией состояний двух подсистем:

$$\Phi = \sum_{i,j} c_{i,j} \phi_i \psi_j.$$

Здесь два ортонормированных набора векторов состояния ϕ_i и ψ_j описывают две части всей системы. Для такого состояния не всегда можно сказать, в каком именно состоянии находится каждая подсистема.

Note: Вспомним обсуждение кота Шредингера в лекции про кубит – упрощая до предела, можно считать, что радиоактивный атом является одной системой, а несчастный кот – второй.

До измерения ни атом, ни кот не имеют определенного состояния, а находятся в суперпозиции возможных состояний.

Что же мы можем сделать, если у нас есть доступ лишь к одной из двух подсистем, а измерить состояние второй мы уже не можем? В таком случае, все наши наблюдаемые величины будут отвечать операторами A_ψ , которые действует только на вторую подсистему. В примере кота Шредингера можно допустить, что экспериментально пронаблюдать мы можем лишь состояние кота, а состояние радиоактивного атома недоступно нам для измерения. В таком случае состояние второй подсистемы можно полностью описать используя *редуцированную* матрицу плотности. Редуцированная матрица плотности получается из матрицы плотности чистого состояния всей системы суммированием по вероятностям различных состояний первой подсистемы:

$$\rho_\psi = \text{Tr}_\phi(\Phi\Phi) = \sum_{i,j} d_{i,j} \psi_j \psi_i, \quad (14.5)$$

где

$$d_{i,j} = \sum_k c_{j,k} c_{i,k}^*,$$

а Tr_ϕ означает частичный след по второй подсистеме, звездочка – комплексное сопряжение. В таких обозначениях значение для среднего от оператора A вычисляется по формуле

$$A_\psi = \text{Tr}_\psi(A\rho_\psi)$$

Здесь след матрицы уже вычисляется по первой подсистеме.

Чаще всего при обсуждении смешанных состояний рассматривают только одну “подсистему”, считая, что вторая – это некоторый макроскопический объект (“резервуар”, например лаборатория или даже вся Вселенная). В этом случае определение матрицы плотности (??) можно рассматривать как редуцированную матрицу плотности (??), из которой убрали нерелевантные и неконтролируемые степени свободы.

14.6.1 Запутанные и сепарабельные состояния

Давайте вернемся к представлению состояния составной системы и зададимся вопросом: что можно сказать о связи между частями системы с точки зрения квантового описания? Для системы из двух кубитов такая составная система в общем случае может быть записана в явном виде (в этом разделе мы в основном следуем изложению из книги [01]):

$$\Phi = a_0|0_B\rangle\langle 0_B| + b_0|1_B\rangle\langle 1_B| + c_1|0_B\rangle\langle 1_A| + d_1|1_B\rangle\langle 0_A|, \quad (14.6)$$

где индексы A и B здесь обозначают первый и второй кубиты, соответственно, а условие нормировки дает

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1.$$

Теперь, как можно показать, состояние типа (??) может быть представлено в виде произведения состояний двух отдельных кубитов, если $ad = dc$:

$$\Phi_s = (a_A|0_A\rangle\langle 0_A| + b_A|1_A\rangle\langle 1_A|) \otimes (a_B|0_B\rangle\langle 0_B| + b_B|1_B\rangle\langle 1_B|),$$

где для выражения (??)

$$\begin{aligned} a &= a_A a_B & b &= a_A b_B \\ c &= b_A a_B & d &= b_A b_B \end{aligned}$$

В других случаях, когда $ad \neq dc$, состояние составной системы не представимо в виде произведения состояний подсистем, такие состояния называют несепарабельными (nonseparable). Другими словами, результат измерения состояния подсистемы A будет зависеть от состояния подсистемы B . Это означает, что для квантовых систем возможна нелокальная корреляция. Такое свойство квантовых систем называется *запутыванием* (*entanglement*), а сами состояния *запутанными* (*entangled*).

Note: В отличие от английского языка, в русском языке не сложилось единой терминологии в отношении запутанных состояний. На момент написания этой лекции (осень 2021 года) в статье [Квантовая запутанность](#) русскоязычной Википедии указывается восемь (!) отличающихся терминов для этого явления, например, “запутанность”, “перепутанность” или “сцепленность”. Сделать с этим что-то сложно, остается только иметь в виду имеющиеся обстоятельства. Мы будем стараться употреблять термин *запутанность* и, соответственно, *запутанные* состояния.

Приведем пару примеров запутанных состояний:

1. $b = c = 0, a = d = \pm 1/\sqrt{2}$ – состояние “шредингеровского кота”, см. [01] и [07], такая формула для вектора состояния возникает для суперпозиции двух макроскопически различных состояний одной из подсистем, например, живой или мертвый кот.
2. $a = d = 0, b = -c = \pm 1/\sqrt{2}$ – такое состояние называется ЭПР-парой (EPR, от Einstein-Podolsky-Rosen) и это очень важный пример из истории изучения запутанности в квантовой физике.

Note: в 1930-е происходили многочисленные споры об “интерпретации” (сущности) квантовой механики. Именно тогда Эйнштейн, Шредингер и их коллеги обратили внимание на несепарабельные состояния и затем Эйнштейном, Подольским и Розеном был сформулирован “парадокс” – что квантовая механика либо нелокальна (т.е. несовместима с теорией относительности), либо неполна (мы учтем не все параметры при описании состояния квантовых систем). Именно с дискуссией о сути запутанности связана знаменитая цитата Эйнштейна “Бог не играет в кости” и менее известный ответ Нильса Бора, “Альберт, не указывай Богу, что ему делать.”

Довольно долго изучение запутанности и связанных с ней трудностей считались сложным, но не основными вопросами квантовой физики. Но с развитием квантовой информатики стало понятно, что без запутанности

нельзя разрабатывать квантовые компьютеры и системы квантовой связи. В настоящее время существуют устоявшиеся методы создания запутанных состояний в эксперименте. А для целей нашего курса, в симуляциях, достаточно использовать [двуухкубитные гейты](#), которые обсуждались в предыдущей лекции, например CNOT или CZ, который используется в лекции про *Градиенты квантовых схем*.

В качестве примера давайте посмотрим, как можно создать запутанное состояние в PennyLane. Начнем с импортов и создания двухкубитной схемы:

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np

dev = qml.device("default.qubit", wires=2)
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
  ↪hack/_init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
  warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Далее применим к первому кубиту операцию поворота $\hat{R}X$, запутаем кубиты с помощью $C\hat{N}OT$ и далее оценим запутанность с помощью измерения оператора Паули $\hat{\sigma}^z$:

```
@qml.qnode(dev)
def circuit(param):
    qml.RX(param, wires=0)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    return qml.expval(qml.PauliZ(0)), qml.expval(qml.PauliZ(1))
```

В этом примере значение переменной `param` определяет степень запутанности, и для $\pi/2$ запутанности будет максимальна. В результате оба кубита будут максимально смешанными и средний результат измерения будет нулевым:

```
print(circuit(np.pi / 2))
```

```
[1.11022302e-16 1.11022302e-16]
```

(код взят из официальной [демонстрации](#) для библиотеки PennyLane)

14.6.2 Разложение Шмидта

В этом разделе мы познакомимся с важной процедурой – разложением Шмидта, которое тесно связано со спектром редуцированных матриц плотности состояния составной квантовой системы и благодаря которому легко увидеть, является ли состояние системы *запутанным* или нет.

Снова запишем чистое двухчастичное состояние Φ квантовой системы, в пространстве $H_\phi \otimes H_\psi$ двух подсистем ϕ и ψ . Покажем тогда, что *существуют* ортонормированные состояния i_ϕ системы ϕ и ортонормированные состояния i_ψ системы ψ , которые дадут нам разложение:

$$\Phi = \sum_i \lambda_i i_\phi i_\psi, \quad (14.7)$$

где λ_i – неотрицательные числа (коэффициенты Шмидта), удовлетворяющие условию $\sum_i \lambda_i^2 = 1$.

Для доказательства рассмотрим случай, когда обе подсистемы имеют пространство одинаковой размерности. Пусть тогда n и k состояния образуют произвольный ортонормированный базис для подсистем ϕ и ψ .

Соответственно, тогда состояние системы Φ может быть представлено в виде разложения:

$$\Phi = \sum_{n,k} a_{nk} nk, \text{ где } a_{nk} = nk\Phi \quad (14.8)$$

Константы разложения a_{nk} образуют эрмитово-сопряженную комплексную матрицу A , которую можно привести к диагональному виду. Для этого применим к этой матрице сингулярное разложение (или SVD-разложение) вида: $A = U \cdot S \cdot V^*$, где U и V – унитарные матрицы, а S – диагональная матрица с неотрицательными действительными числами на диагонали (эти числа называют сингулярными числами матрицы A , и их набор однозначно определяется матрицей). Тогда разложение (??) можно привести к виду:

$$\Phi = \sum_{i,n,k} u_{in} s_{ii} v_{ik} nk. \quad (14.9)$$

Теперь переопределим базис состояний в подсистемах ϕ и ψ :

$$i_\phi = \sum_n u_{ni} n, i_\psi = \sum_k v_{ik} k \quad (14.10)$$

и обозначим $s_{ii} \equiv \lambda_i$. В результате разложение (??) преобразуется к виду:

$$\Phi = \sum_i \lambda_i i_\phi i_\psi$$

В силу унитарности U и V наборы базисных состояний i_ϕ и i_ψ в (??) образуют полную ортонормированную систему, или базис Шмидта, а само представление (??) называют **разложением Шмидта**. Число ненулевых значений коэффициентов Шмидта λ_i называется числом (или рангом $\text{rank}(A) = \text{dim}s_{ii} : s_{ii} > 0$) Шмидта для состояния Φ . В теории мер квантовой запутанности это число характеризует степень (или меру) запутанности состояний сложной системы. Чистое двухчастичное состояние запутанно тогда и только тогда, когда его число Шмидта > 1 , и чем больше число Шмидта, тем сильнее запутано состояние.

Следствием приведенных выше свойств является важная связь между коэффициентами Шмидта чистого запутанного состояния со спектром его редуцированных матриц плотности $\rho_\phi = \text{Tr}_\psi(\Phi\Phi)$ и $\rho_\psi = \text{Tr}_\phi(\Phi\Phi)$. Несложно убедиться, что собственные значения редуцированных матриц ρ_ϕ и ρ_ψ совпадают и представляют собой квадраты коэффициентов Шмидта, а их собственные вектора представляют собой состояния i_ϕ и i_ψ соответственно. Эти свойства дают нам удобный алгоритм вычисления разложения Шмидта двухчастичного состояния Φ через редуцированные матрицы его подсистем: (1) на первом этапе следует вычислить редуцированные матрицы плотности ρ_ϕ и ρ_ψ ; (2) на втором этапе найти общие собственные значения a_i и соответствующие им собственные векторы i_ϕ и i_ψ для матриц ρ_ϕ и ρ_ψ ; (3) записать разложение Шмидта в виде:

$$\Phi = \sum_i \sqrt{a_i} i_\phi i_\psi.$$

14.7 Описания эволюции смешанного состояния

14.7.1 Квантовая динамика

Напомним, что квантовая динамика в терминах волновых функций Ψ описывается при помощи уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x, t).$$

Аналогичное уравнение можно получить и для матриц плотности. Оно называется уравнением фон Неймана и записывается через коммутатор $[\cdot]$, который определен как $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho].$$

Аналогично, если действие каких-то унитарных операций изменяет вектор состояния Ψ на $\hat{U}\Psi$, то матрицу плотности оно должно изменять как

$$\sum_n p_n \hat{U} \Psi_n \Psi_n^\dagger \hat{U}^\dagger = \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger.$$

Важное свойство унитарных матриц – их собственные значения по модулю равны единице. Действие унитарного оператора не изменяет собственных значений матрицы плотности, но вращает собственный ее базис. Исходя из этого можно сделать вывод о том, что ни чистота, ни энтропия не могут изменяться в результате унитарных операций.

14.7.2 Измерения и томография

Квантовая механика работает так, что любое [измерение](#) приводит к коллапсу волновой функции и является необратимым. А еще измерения, например, состояния + и – не различимы при измерениях по оси **Z** – для обоих состояний мы будем получать 1 и 0 с вероятностью 0.5, то есть нам нужно измерять по *всем* базисам. В общем, получается, что восстановить амплитуду и фазу волновой функции Ψ это большая проблема, если добавить сюда вероятностный характер измерения.

Note: Строго говоря это не просто “большая” проблема, а настоящая NP-полная задача оптимизации!

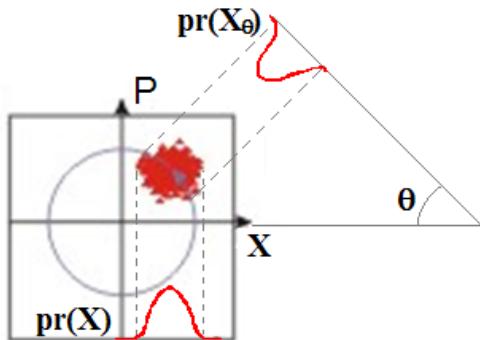


Fig. 14.2: Иллюстрация фазовой проблемы.

Эта задача обычно решается при помощи квантовой томографии, и восстанавливают как раз не волновую функцию Ψ , а матрицу плотности ρ (потому что в реальных экспериментах и задачах почти не бывает чистых состояний). Представим, что наша квантовая система описывается базисом y_i – набором из 2^N векторов, причем каждому из этих базисных векторов соответствует свое собственное значение – результат измерения (подробнее об этом было в [лекции про кубит](#)). Тогда если у нас будет достаточно много результатов измерений, то мы сможем восстановить нашу матрицу плотности ρ методом максимизации правдоподобия. Выражение для правдоподобия в этом случае можно записать как:

$$L(\rho) = \prod_i y_i \rho y_i^{q_i},$$

где q_i – это частота получения собственного значения, соответствующего волновой функции y_i (потому что измерение переводит наше состояние в базисный вектор, соответствующий результату измерения). В итоге увеличивая число измерений мы приближаем частоты q_i к вероятностям $\Psi(y_i)\Psi$, а нашу матрицу ρ к ее истинному виду.

Методы квантовой томографии являются критической частью, в том числе, квантовой связи, так как системы там обычно небольшие, но восстанавливать надо всю матрицу плотности.

14.8 Что мы узнали?

- Формализм матрицы плотности позволяет описывать составные системы (например, один кубит в многокубитной системе)
- Чаще всего в реальных экспериментах у нас ситуация “мы приготовили состояние, но точно не знаем какое” и волновая функция нам не подходит
- Что такое квантовая запутанность и как ее можно описать
- Состояние части запутанного состояния – смешанное
- Отличие смешанного состояния от чистого можно охарактеризовать параметром типа энтропии

Part VI

Фреймворки

CHAPTER
FIFTEEN

О БЛОКЕ “ФРЕЙМВОРКИ”

Этот блок включает в себя обзор фреймворков и библиотек для квантовых вычислений. Основная часть курса будет строиться вокруг библиотеки PennyLane. Этот фреймворк кажется наиболее простым в освоении, а также является платформо-независимым, так как представляет собой высокоуровневый API. Дополнительные лекции этого блока расскажут также про:

- Qiskit от компании IBM;
- cirq и Tensorflow Quantum от компании Google.

ОБЗОР ФРЕЙМВОРКОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Автор(ы):

- Синченко Семен

В этом обзоре мы кратко пробежимся по существующим сегодня фреймворкам для программирования квантовых компьютеров, а также по тем компьютерам, с которыми они совместимы.

Note: Цель этой лекции – исключительно показать как визуально выглядит тот, или иной фреймворк для программирования квантовых компьютеров. Поэтому не стоит пытаться вникнуть и понять, что именно делает тот, или иной пример приведенного тут кода! Также хочется сразу сказать, что разделение на низкоуровневые и высокоуровневые языки квантового относительно субъективно и эта лекция выражает именно точку зрения ее автора.

16.1 Квантовые ассемблеры

16.1.1 OpenQASM

В нашем курсе мы в основном будем пользоваться относительно высокоуровневые фреймворки. Однако это не значит, что квантовый программист не имеет возможности программировать на низком уровне. Например, компания IBM дает доступ к своему квантовому ассемблеру [OpenQASM \[CBSG17\]](#), код на котором выглядит примерно так:

```
/* Measuring the relaxation time of a qubit
 * This example demonstrates the repeated use of fixed delays.
 */
OPENQASM 3.0;
include "stdgates.inc";

duration stride = 1us;           // time resolution of points taken
const int[32] points = 50;        // number of points taken
const int[32] shots = 1000;        // how many shots per point

int[32] counts0;
int[32] counts1 = 0;    // surviving |1> populations of qubits

extern tabulate(int[32], int[32], int[32]);
```

```
bit c0;
bit c1;
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

defcalgrammar "openpulse";

// define a gate calibration for an X gate on any qubit
defcal x $q {
    play drive($q), gaussian(100, 30, 5);
}

for p in [0 : points-1] {
    for i in [1 : shots] {

        // start of a basic block
        reset $0;
        reset $1;

        // excite qubits
        x $0;
        x $1;

        // wait for a fixed time indicated by loop counter
        delay[p * stride] $0;

        // wait for a fixed time indicated by loop counters
        delay[p * durationof({x $1;})];

        // read out qubit states
        c0 = measure $0;
        c1 = measure $1;

        // increment counts memories, if a 1 is seen
        counts0 += int[1](c0);
        counts1 += int[1](c1);
    }

    // log survival probability curve
    tabulate(counts0, shots, p);
    tabulate(counts1, shots, p);
}

```

Пример этого кода взят из официального репозитория.

16.1.2 PyQuil

Другим примером относительно низкоуровневого языка квантового программирования является фреймворк PyQuil [SCZ17]. Он разработан компанией Rigetti Computing, производителем одноименных квантовых компьютеров и включает в себя компилятор и виртуальную машину QVM. Вот так выглядит код на этом фреймворке:

```

from pyquil import get_qc, Program
from pyquil.gates import CNOT, H, MEASURE

qvm = get_qc("2q-qvm")

p = Program()

```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

p += H(0)
p += CNOT(0, 1)
ro = p.declare("ro", "BIT", 2)
p += MEASURE(0, ro[0])
p += MEASURE(1, ro[1])
p.wrap_in_numshots_loop(10)

qvm.run(p).readout_data["ro"].tolist()

```

Пример взят из официального репозитория.

16.2 Высокоуровневое программирование

В таких фреймворках программист имеет возможность уже не только напрямую манипулировать кубитами на низком уровне, но также вызывать высокогенерные функции, например, [квантовое преобразование Фурье](#).

16.2.1 Cirq

Одним из таких фреймворков является [Cirq](#) от компании Google. Код, написанный на нем можно запускать на симуляторах локально или в облаке, а также используя специально разработанные компанией Google симуляторы на базе **Tensor Processing Units** или **TPU** используя [Floq API](#). Для целей квантового машинного обучения в связке с [Cirq](#) можно использовать [Tensorflow Quantum](#) – расширение библиотеки для обычного *Deep Learning*, которое позволяет комбинировать классические и квантовые нейронные сети вместе. Еще в экосистему [Cirq](#) входит также библиотека для квантовой химии [OpenFermion](#).

Вот так выглядит код, написанный на [Cirq](#):

```

import cirq
qubit = cirq.GridQubit(0, 0)

circuit = cirq.Circuit()
circuit.append(cirq.H(qubit))
circuit.append(cirq.measure(qubit))
print(circuit)

```

Еще больше примеров и более детальный обзор этого фреймворка читайте в [нашей статье про Tensorflow Quantum](#). Также очень рекомендуем ознакомиться с [блогом “квантового” подразделения компании Google – Google Quantum AI](#).

16.2.2 Q#

[Q#](#) это полноценный язык квантового программирования от компании Microsoft. Этот техногигант также, как и другие, разрабатывает сейчас свои квантовые компьютеры и облачные симуляторы, а также предоставляет облачный доступ к квантовому железу других производителей. Так что программы, написанные на [Q#](#) можно запускать в облаке [Azure Quantum](#).

В отличии от большинства фреймворков, которые обычно написаны как библиотека для языка Python, [Q#](#) использует C# для запуска и в целом имеет синтаксис, больше похожий на C# или Java:

```

namespace QuantumRNG {
    open Microsoft.Quantum.Intrinsic;
    open Microsoft.Quantum.Measurement;
    open Microsoft.Quantum.Canon;

    @EntryPoint()
    operation GenerateRandomBits() : Result[] {
        use qubits = Qubit[4];
        ApplyToEach(H, qubits);
        return MultiM(qubits);
    }
}

```

Этот пример взят из [официальной документации](#).

На самом деле Q# это не просто язык для программирования квантовых компьютеров, а целая экосистема, в которую кроме самого языка и его стандартной библиотеки также входят:

- Библиотека [Microsoft.Quantum.Chemistry](#) для квантовой химии
- Библиотека [Microsoft.Quantum.MachineLearning](#) для квантового машинного обучения

В качестве отличного источника информации про квантовые вычисления с примерами на Q#-стеке можно использовать потрясающий репозиторий на GitHub, который называется [QuantumKatas](#).

16.2.3 Strawberry-Fields

`Strawberry-Fields` это библиотека для работы с фотонными квантовыми компьютерами компании Xanadu. Эти устройства являются *continuous-variable quantum computers* и в их основе лежат не бинарные состояния – кубиты, а состояния с непрерывными значениями. Учитывая сложность этого концепта, а также специфичность решаемых на таких устройствах задач мы мало будем о них говорить, но любопытный читатель может ознакомиться, например, с [этой статьей](#).

Вот так выглядит код, написанный с использованием этого фреймворка (пример из [официальной документации](#)):

```

import strawberryfields as sf
from strawberryfields import ops

# create a 3-mode quantum program
prog = sf.Program(3)

with prog.context as q:
    ops.Sgate(0.54) | q[0]
    ops.Sgate(0.54) | q[1]
    ops.Sgate(0.54) | q[2]
    ops.BSgate(0.43, 0.1) | (q[0], q[2])
    ops.BSgate(0.43, 0.1) | (q[1], q[2])
    ops.MeasureFock() | q

```

Также к `Strawberry-Fields` идет большое число высокуровневых API для конкретных приложений к задачам реального мира. Например:

- Вычисление схожести графов
- Gaussian Boson Sampling
- Поиск Clique в графах
- Поиск плотных подграфов

И многие другие, с которыми можно ознакомиться на странице официальной документации.

16.2.4 Qiskit

Qiskit – это один из самых популярных в мире фреймворков для квантовых вычислений от компании IBM. На самом деле представляет собой даже не фреймворк, а целую экосистему, в которую входят, например:

- Уже упомянутый нами квантовый ассемблер OpenQASM
- Фреймворк для программирования кубитов, написанный на OpenQASM
- API для применения квантовых вычислений в финансах
- API для применения квантовых вычислений в ML
- API для применения квантовых вычислений в оптимизации
- API для применения квантовых вычислений в квантовой химии
- Открытый CAD для проектирования квантовых компьютеров (!)

И многое другое.

Код, написанный на Qiskit выглядит так (пример из официальной документации):

```
import numpy as np
from qiskit import QuantumCircuit, transpile
from qiskit.providers.aer import QasmSimulator
from qiskit.visualization import plot_histogram

# Use Aer's qasm_simulator
simulator = QasmSimulator()

# Create a Quantum Circuit acting on the q register
circuit = QuantumCircuit(2, 2)

# Add a H gate on qubit 0
circuit.h(0)

# Add a CX (CNOT) gate on control qubit 0 and target qubit 1
circuit.cx(0, 1)

# Map the quantum measurement to the classical bits
circuit.measure([0,1], [0,1])

# compile the circuit down to low-level QASM instructions
# supported by the backend (not needed for simple circuits)
compiled_circuit = transpile(circuit, simulator)

# Execute the circuit on the qasm simulator
job = simulator.run(compiled_circuit, shots=1000)

# Grab results from the job
result = job.result()

# Returns counts
counts = result.get_counts(compiled_circuit)
print(f"\nTotal count for 00 and 11 are: {counts}")
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
# Draw the circuit
circuit.draw()
```

Код, написанный на Qiskit может быть запущен на квантовых компьютерах от компании IBM. Для изучения квантовых вычислений с экосистемой Qiskit можно рекомендовать [прекрасную онлайн книгу](#). Более подробный обзор библиотеки также в *отдельной лекции нашего курса*.

16.2.5 Pennylane

Pennylane это относительно высокоуровневая библиотека для квантовых вычислений и квантового машинного обучения от компании Xanadu. Вот так выглядит написанный на ней код:

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np

dev = qml.device("default.qubit", shots=1000, wires=2)

def make_entanglement():
    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    return qml.probs(wires=[0, 1])

circuit = qml.QNode(make_entanglement, dev)
circuit()
```

```
# Draw the circuit
qml.drawer.use_style("default")
fig, ax = qml.draw_mpl(circuit)()
fig.show()
```

Эта библиотека может использовать в качестве backend любое из:

- Cirq
- Qiskit
- Q#
- Strawberry-Fields
- PyQuil (через расширение PennyLane-Forest)

Но для нас самое главное преимущество этой библиотеки – это огромное количество готовых API для машинного обучения, которые позволяют автоматически считать градиенты и дифференцировать квантовые схемы, или обновлять параметры таких схем градиентным спуском.

В нашем курсе библиотеке Pennylane посвящена *целая отдельная лекция*.

16.3 Заключение

16.3.1 Что мы будем использовать в курсе?

В рамках нашего курса мы в основном будем пользоваться библиотекой `Pennylane`. Некоторые отдельные лекции будут использовать `Qiskit`, но это скорее в порядке исключения.

16.3.2 Почему `Pennylane`?

Но почему `Pennylane`, если самым популярным фреймворком является именно `Qiskit`? Приведем два основных аргумента.

1. Сегодня трудно сказать, какое квантовое железо в итоге победит, а большим преимуществом `Pennylane` является то, что эта библиотека является верхнеуровневой и может использовать различные `backend` для запуска на квантовых компьютерах разных производителей. Включая `Qiskit` и `IBM`.
2. Наш курс больше про квантовое машинное обучение и именно для этих целей `Pennylane` подходит лучше всего. Там есть рутины и API разных уровней, позволяющих где-то самому писать градиенты квантовых схем и обновлять их параметры, а где-то просто вызывать готовый метод из API, чтобы не повторять 10 раз то, что мы уже разбирали в более ранних лекциях.

CHAPTER
SEVENTEEN

PENNYLANE

Автор(ы):

- Ширкин Сергей

PennyLane – библиотека Python для квантового машинного обучения, которую можно использовать для обычных квантовых вычислений. Программы, написанные на PennyLane, можно запускать, используя в качестве бэкенда настоящие квантовые компьютеры от IBM Q, Xanadu, Rigetti и другие, либо квантовые симуляторы.

Кубиты в PennyLane называются по-особому – wires (от англ. wires – провода). Такое название, скорее всего, связано с тем, что на квантовых схемах кубиты изображаются в виде продольных линий.

Последовательность квантовых операций называется *квантовой функцией*. Такая функция может принимать в качестве аргументов только хэшируемые объекты. В качестве возвращаемого значения выступают величины, связанные с результатами измерения: ожидаемое значение, вероятности состояний или результаты сэмплирования.

Квантовая функция существует не сама по себе, она запускается на определенном устройстве – симуляторе либо настоящем квантовом компьютере. Такое устройство в PennyLane называется device.

17.1 QNode

Квантовые вычисления при использовании PennyLane раскладываются на отдельные узлы, которые называются QNode. Для их создания используются квантовые функции совместно с device.

Создавать объекты квантовых узлов можно двумя способами: явно либо с помощью декоратора QNode.

Рассмотрим первый способ – явное создание узла.

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np
qml.drawer.use_style("default")

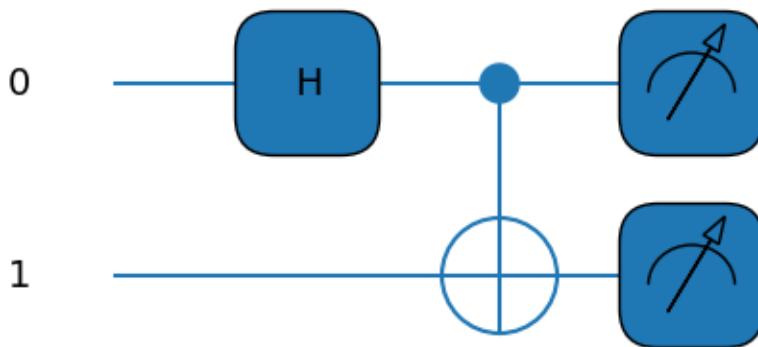
dev = qml.device("default.qubit", shots=1000, wires=2)
def make_entanglement():
    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    return qml.probs(wires=[0, 1])

circuit = qml.QNode(make_entanglement, dev)
circuit()
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

```
tensor([0.519, 0.    , 0.    , 0.481], requires_grad=True)
```

```
fig, ax = qml.draw_mpl(circuit)()
fig.show()
```



Работая с библиотекой PennyLane для математических операций, можно использовать интерфейс NumPy, но при этом также пользоваться преимуществами автоматического дифференцирования, которое обеспечивает autograd. Именно поэтому мы не импортировали NumPy обычным способом: `import numpy as np`, а сделали это так: `from pennylane import numpy as np`.

Второй способ создания квантовых узлов – с помощью декоратора `QNode`. Пропускаем импорт библиотек и создание устройства, так как в начале код тот же самый:

```
@qml.qnode(dev)
def circuit():
    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    return qml.probs(wires=[0, 1])

print(circuit())
```

```
[0.515 0.    0.485]
```

В данном примере мы взяли двухкубитную систему и создали запутанное состояние, а затем с помощью метода `probs` вычислили вероятности получения состояний $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$.

17.2 Операторы

В квантовой функции можно применять операторы X, Y, Z, S, T (`qml.PauliX`, `qml.PauliY`, `qml.PauliZ`, `qml.S`, `qml.T` соответственно), а также операторы, в которых можно задавать угол вращения вокруг одной из осей в радианах: `qml.RX`, `qml.RY`, `qml.RZ`. Здесь и далее будем использовать `qml` как псевдоним библиотеки `PennyLane`.

В этой функции мы вращаем кубит под индексом 0 вокруг оси X на 90 градусов из начального состояния $|0\rangle$ и возвращаем **ожидаемое значение** `qml.PauliZ` для этого кубита с помощью `qml.expval`. Вероятности получения состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ равны, так что мы получаем ожидаемое значение, близкое к нулю, что легко проверить:

$$0.5 \cdot 1 + 0.5 \cdot (-1) = 0$$

```
@qml.qnode(dev)
def circuit(x):
    qml.RX(x, wires=0)
    return qml.expval(qml.PauliZ(0))

circuit(np.pi/2)
```

```
tensor(0.022, requires_grad=True)
```

В следующем примере мы вращаем кубит на тот же угол 90 градусов, но уже вокруг оси Y. Ожидаемое значение в этот раз ищем для `qml.PauliX` и получаем 1, что соответствует вычислениям:

$$1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) = 1$$

```
@qml.qnode(dev)
def circuit(x):
    qml.RY(x, wires=0)
    return qml.expval(qml.PauliX(0))

circuit(np.pi/2)
```

```
tensor(1., requires_grad=True)
```

В начале этого урока мы создали устройство, которое создает и запускает одну и ту же схему 1000 раз, каждый раз производя измерения. Поменяем этот параметр:

```
dev.shots = 5
```

Посмотрим на результат каждого из этих пяти запусков и измерений для `qml.PauliZ`. Квантовая схема будет простой: применим к кубиту с индексом 1 оператор Адамара:

```
@qml.qnode(dev)
def circuit():
    qml.Hadamard(wires=1)
    return qml.sample(qml.PauliZ([1]))

circuit()
```

```
tensor([ 1, -1,  1, -1,  1], requires_grad=True)
```

Мы получаем разные результаты: то 1, что соответствует состоянию $|0\rangle$, то -1, что соответствует состоянию $|1\rangle$. Если вместо `qml.PauliZ` брать сэмплы для `qml.PauliX`, то результат все время будет один и тот же: 1, что соответствует состоянию $|+\rangle$ (вектор базиса Адамара).

```
@qml.qnode(dev)
def circuit():
    qml.Hadamard(wires=1)
    return qml.sample(qml.PauliX([1]))

circuit()
```

```
tensor([1, 1, 1, 1, 1], requires_grad=True)
```

17.3 QubitUnitary

В PennyLane можно использовать готовые операторы, либо задавать операторы явно с помощью матриц.

Для этого можно использовать класс `qml.QubitUnitary`, который принимает два параметра: `U` – квадратную унитарную матрицу и `wires` – кубиты, на которые действует оператор `U`.

В качестве примера создадим оператор, осуществляющий обмен состояний между кубитами (SWAP). Такой оператор уже есть в библиотеке PennyLane (`qml.SWAP`), но мы создадим его с помощью `qml.QubitUnitary`. Сначала мы зададим саму матрицу в виде двумерного массива, используя интерфейс NumPy:

```
U = np.array([[1, 0, 0, 0],
              [0, 0, 1, 0],
              [0, 1, 0, 0],
              [0, 0, 0, 1]])
```

Создадим заново устройство, при этом зададим число запусков схемы как `shots=1`: чтобы убедиться, что все работает правильно, нам будет достаточно одного запуска.

```
dev = qml.device("default.qubit", shots=1, wires=2)
```

Создадим и запустим схему, в которой перед применением операции SWAP, реализованной с помощью `qml.QubitUnitary`, один кубит будет находиться в состоянии 1, а другой – в состоянии 0.

```
@qml.qnode(dev)
def circuit(do_swap):
    qml.PauliX(wires=0)
    if do_swap:
        qml.QubitUnitary(U, wires=[0, 1])
    return qml.sample(qml.PauliZ([0])), qml.sample(qml.PauliZ([1]))
```

Запустим схему сначала без применения операции SWAP:

```
circuit(do_swap=False)
```

```
tensor([[[-1],
         [ 1]], requires_grad=True)
```

А затем – с применением:

```
circuit(do_swap=True)
```

```
tensor([[ 1],
         [-1]], requires_grad=True)
```

Видим, что во втором случае операция SWAP сработала: состояния кубитов поменялись местами. Можно посмотреть, как выглядит такая схема:

```
fig, ax = qml.draw_mpl(circuit)(True)
fig.show();
```



CIRQ & TFQ

Автор(ы):

- Синченко Семен

18.1 Введение

`Cirq` – это библиотека для работы с квантовыми компьютерами и симуляторами компании *Google*. В рамках темы квантового машинного обучения нам также интересен фреймворк `Tensorflow Quantum` или сокращенно `TFQ`. Это высокоуровневая библиотека, которая содержит готовые функции для квантового и гибридного машинного обучения. В качестве системы автоматического дифференцирования, а также для построения гибридных квантово-классических нейронных сетей там используется библиотека `Tensorflow`.

Warning: Во всех дальнейших лекциях мы будем использовать в основном библиотеку `PennyLane`, так что данная лекция исключительно обзорная и факультативная. В ней мы посмотрим несколько примеров *end2end* обучения квантовых схем на `TFQ` без детального объяснения теории и вообще того, что происходит. Основная цель данной лекции – исключительно обзор еще одного инструмента, а не изучение `QML`! Заинтересованный читатель может вернуться к этому обзору после изучения глав про `VQC`, *Градиенты* и **Квантовые нейросети**.

18.2 Работа с кубитами

18.2.1 Импорты и схема

Warning: `Tensorflow Quantum` нельзя установить на `Windows`. Если система `POSIX`-совместимая и хотите попробовать запустить примеры кода из этой лекции, то просто в корне данного репозитория наберите команду (если уже установили `tensorflow`):

```
poetry run pip install tensorflow-quantum==0.5.1
```

Обладателям компьютеров на системе `Windows` можем лишь предложить использовать `WSL2` или `Docker`. В целом эта лекция факультативная и нигде далее `TFQ` не используется.

А так, больше информации по установке можно найти в [разделе про установку](#) в официальной документации или у них же на [GitHub](#).

Для начала импортируем `cirq`.

```
import cirq
```

`Cirq` рассчитан на работу с квантовым компьютером от компании *Google*, который представляет собой решетку кубитов. Например, вот так выглядит решетка кубитов квантового компьютера *Sycamore*:



Fig. 18.1: Изображение из [AAB+19]

Поэтому в нем все строится вокруг работы с решеткой кубитов – объектом `cirq.GridQubit`. Давайте создадим кубит на решетке, который имеет координаты $(0, 0)$:

```
qubit = cirq.GridQubit(0, 0)
```

Следующей важной концепцией в `Cirq` является непосредственно квантовая схема. Давайте создадим схему, которая переводит кубит в суперпозицию состояний 0 и 1 и измеряет его:

```
circuit = cirq.Circuit()
circuit.append(cirq.H(qubit))
circuit.append(cirq.measure(qubit))
print(circuit)
```

```
(0, 0) : —H—M—
```

18.2.2 Запуск и симуляция

Теперь создадим квантовый симулятор, который посчитает нам результат этой простой схемы на классическом компьютере:

```
sim = cirq.Simulator()
```

Как мы знаем, результат измерения такой схемы равен 50% для состояния 0, то есть если мы будем сэмплировать, то должны получать ~ 0.5 . Проверим это с разным числом сэмплов:

```
print(f"5 сэмплов: {sim.sample(circuit, repetitions=5).mean()}")
print(f"\n100 сэмплов: {sim.sample(circuit, repetitions=100).mean()}")
print(f"\n1000 сэмплов: {sim.sample(circuit, repetitions=1000).mean()}")
```

```
5 сэмплов: (0, 0)      0.6
dtype: float64

100 сэмплов: (0, 0)     0.44
dtype: float64

1000 сэмплов: (0, 0)    0.517
dtype: float64
```

Note: Метод `sim.sample` возвращает хорошо знакомый всем специалистам в области Data Science объект `pandas.DataFrame`.

Также у нас есть опция запустить схему через метод `run`. Может показаться, что это то же самое, но на самом деле в отличие от `sample`, метод `run` возвращает результат в несколько ином виде; а еще он позволяет запускать программу на реальном квантовом компьютере Google или их новых квантовых симуляторах на TPU:

```
print(sim.run(circuit, repetitions=25))
```

```
(0, 0)=0100001011101000110001101
```

Тут мы просто видим последовательность наших измерений.

18.3 Квантовое машинное обучение

18.3.1 Импорты

Мы будем использовать `Tensorflow` и `Tensorflow Quantum`.

```
import os
os.environ["TF_CPP_MIN_LOG_LEVEL"] = "3"
import tensorflow as tf
import tensorflow_quantum as tfq
```

18.3.2 Задача

Давайте попробуем решить игрушечную задачку классификации простой гибридной квантово-классической нейронной сетью. У нас будет один квантовый слой и один классический слой. В качестве задачи сгенерируем простенький набор данных, используя рутины `scikit-learn`. Сразу переведем входящие признаки в диапазон от нуля до π .

```
from sklearn.datasets import make_classification
import numpy as np

x, y = make_classification(n_samples=50, n_features=2, n_informative=2, random_
                           state=42, n_redundant=0)

def normalize(x):
    x_min = x.min()
    x_max = x.max()

    return np.pi * (x - x_min) / (x_max - x_min)

x[:, 0] = normalize(x[:, 0])
x[:, 1] = normalize(x[:, 1])
```

Посмотрим на эти данные:

```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.figure(figsize=(6, 4))
cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=y)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



18.3.3 Кубиты

Tensorflow Quantum позволяет “превращать” параметризованные схемы Cirq в слои нейронных сетей Tensorflow. Но для начала нам все равно потребуется схема. Давайте объявим пару кубитов.

```
qubits = [cirq.GridQubit(0, 0), cirq.GridQubit(0, 1)]
print(qubits)
```

```
[cirq.GridQubit(0, 0), cirq.GridQubit(0, 1)]
```

18.3.4 Входной слой нейронной сети

Определим входной слой, который будет кодировать наши классические данные в квантовые. Сразу закодируем данные. Так как Tensorflow работает с тензорами, то нам необходимо будет преобразовать схемы в тензор. Для этого есть специальная функция `convert_to_tensor`.

```
def data2circuit(x):
    input_circuit = cirq.Circuit()

    input_circuit.append(cirq.Ry(rads=x[0]).on(qubits[0]))
    input_circuit.append(cirq.Ry(rads=x[1]).on(qubits[1]))

    return input_circuit

x_input = tfq.convert_to_tensor([data2circuit(xi) for xi in x])
```

18.3.5 Слой из параметризованной схемы

Для создания параметризованных схем в Tensorflow Quantum используются символы из библиотеки символьных вычислений `sympy`. Давайте объявим несколько параметров и создадим схему:

```
from sympy import symbols

params = symbols("w1, w2, w3, w4")

trainable_circuit = cirq.Circuit()

trainable_circuit.append(cirq.H.on(qubits[0]))
trainable_circuit.append(cirq.H.on(qubits[1]))
trainable_circuit.append(cirq.Ry(rads=params[0]).on(qubits[0]))
trainable_circuit.append(cirq.Ry(rads=params[1]).on(qubits[1]))

trainable_circuit.append(cirq.CNOT.on(qubits[0], qubits[1]))

trainable_circuit.append(cirq.H.on(qubits[0]))
trainable_circuit.append(cirq.H.on(qubits[1]))
trainable_circuit.append(cirq.Rx(rads=params[2]).on(qubits[0]))
trainable_circuit.append(cirq.Rx(rads=params[3]).on(qubits[1]))

trainable_circuit.append(cirq.CNOT.on(qubits[0], qubits[1]))

print(trainable_circuit)
```



18.3.6 Наблюдаемые

В качестве операторов, которые мы будем измерять, воспользуемся парой $\hat{X}Y$ и $Y\hat{X}$ для наших кубитов:

```
ops = [cirq.X.on(qubits[0]) * cirq.Y.on(qubits[1]), cirq.Y.on(qubits[0]) * cirq.X.
       on(qubits[1])]
```

18.3.7 Гибридная нейронная сеть

Теперь воспользуемся классическим Tensorflow, чтобы объявить и скомпилировать нашу нейронную сеть, предварительно добавив в нее один классический слой.

- зафиксируем случайный генератор

```
tf.random.set_seed(42)
```

- входной тензор – это в нашем случае тензор типа `string`, так как это квантовые схемы

```
cirq_inputs = tf.keras.Input(shape=(), dtype=tf.dtypes.string)
```

- квантовый слой

```
quantum_layer = tfq.layers.PQC(trainable_circuit, ops)(cirq_inputs)
```

- классический слой и выходной слой

```
dense_layer = tf.keras.layers.Dense(2, activation="relu")(quantum_layer)
output_layer = tf.keras.layers.Dense(1, activation="sigmoid")(dense_layer)
```

- компилируем модель и смотрим, что получилось. И сразу указываем метрики, которые хотим отслеживать

```
model = tf.keras.Model(inputs=cirq_inputs, outputs=output_layer)
model.compile(
    optimizer=tf.keras.optimizers.SGD(learning_rate=0.1),
    loss=tf.keras.losses.BinaryCrossentropy(),
    metrics=[
        tf.keras.metrics.BinaryAccuracy(),
        tf.keras.metrics.BinaryCrossentropy(),
    ]
)
model.summary()
```

```
Model: "model"
```

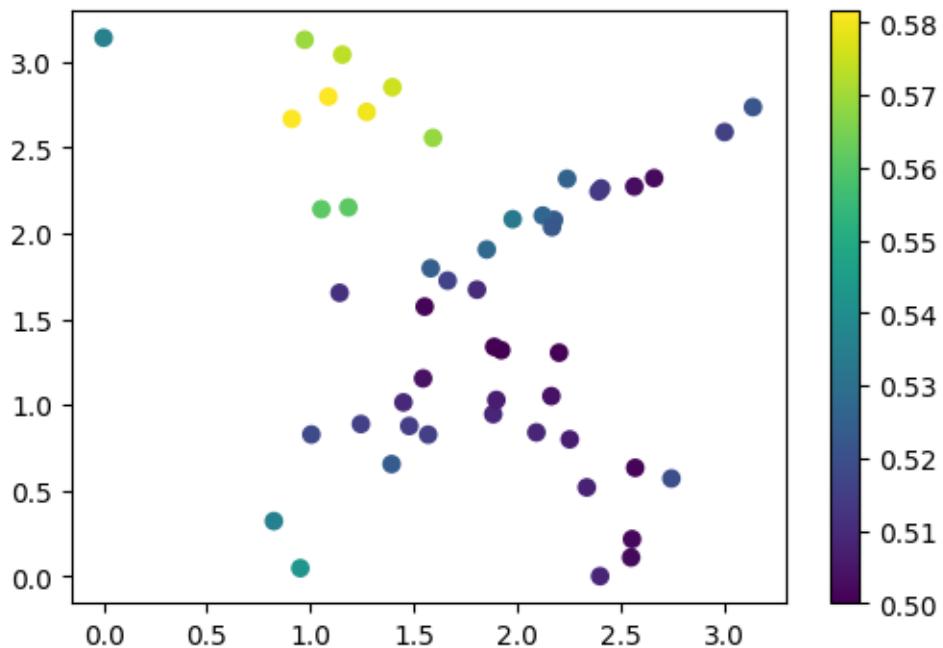
Layer (type)	Output Shape	Param #
<hr/>		
input_1 (InputLayer)	[(None,)]	0
<hr/>		
pqc (PQC)	(None, 2)	4
<hr/>		
dense (Dense)	(None, 2)	6
<hr/>		
dense_1 (Dense)	(None, 1)	3
<hr/>		
Total params: 13		
Trainable params: 13		
Non-trainable params: 0		
<hr/>		

18.3.8 Предсказания со случайной инициализацией

Наша нейросеть имеет случайные начальные параметры. Давайте посмотрим, что она предсказывает до обучения:

```
preds = model(x_input).numpy()

plt.figure(figsize=(6, 4))
cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=preds)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



18.3.9 Обучение сети

- запустим обучение

```
%%time
model.fit(x=x_input, y=y, epochs=200, verbose=0)
```

```
CPU times: user 4.49 s, sys: 79 ms, total: 4.57 s
Wall time: 4.16 s
```

```
<keras.callbacks.History at 0x7fe5cbb74b50>
```

- визуализируем логи обучения

```
f, ax = plt.subplots(2, figsize=(6, 6))
ax[0].plot(model.history.history["binary_accuracy"])
ax[1].plot(model.history.history["binary_crossentropy"])
plt.show()
```



- визуализируем предсказания

```
preds_after_training = model(x_input).numpy()
plt.figure(figsize=(6, 4))

cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=preds_after_training)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



18.4 Заключение

В данной лекции мы познакомились с фреймворком Tensorflow Quantum. Это достаточно мощный инструмент, особенно в связке с Tensorflow, так как позволяет использовать большое число готовых методов Tensorflow и различных расширений. Тем не менее, для целей обучения Tensorflow Quantum кажется не лучшим выбором, так как имеет много неочевидного синтаксиса и предполагает, как минимум, среднего знания Tensorflow. Во всех дальнейших лекциях мы будем использовать в основном библиотеку PennyLane.

Автор(ы):

- Синченко Семен

В этой лекции мы посмотрим, как при помощи библиотеки Qiskit можно работать с кубитами и квантовыми схемами.

Warning: Во всех дальнейших лекциях мы будем, за редким исключением, использовать в основном библиотеку PennyLane, так что данная лекция исключительно обзорная и факультативная. В ней мы поверхностно познакомимся с концептами Qiskit и напишем пару примеров по работе с кубитами. Обзор экосистемы Qiskit, включая qiskit-machine-learning выходит за рамки этой лекции, но в конце мы дадим несколько ссылок для самостоятельного изучения.

19.1 Кубиты

19.1.1 Импорты

```
from qiskit import QuantumCircuit
from qiskit.providers.aer import QasmSimulator

from qiskit import version
print(f"Qiskit version: {version.get_version_info() }")
```

Qiskit version: 0.18.3

19.1.2 Симулятор

Для запуска мы будем использовать симулятор квантового компьютера QasmSimulator:

```
simulator = QasmSimulator()
```

В Qiskit поддерживается несколько симуляторов, например:

- UnitarySimulator – симулятор унитарной динамики идеальной схемы;
- StatevectorSimulator – симулятор волновой функции идеальной схемы;
- QasmSimulator – симулятор, который моделирует шумы;

Мы использовали лишь один из них. В целом, модуль `qiskit.providers` предоставляет базовые абстракции, которые позволяют запускать наш код на разных `backend`, включая реальные квантовые компьютеры, просто поменяв одну строчку в коде.

19.1.3 Квантовая схема

Ключевым элементом в Qiskit является квантовая схема – экземпляр класса `QuantumCircuit`. Создадим такую схему:

```
circuit = QuantumCircuit(2, 2)
```

В Qiskit необходимо явно указывать не только количество кубитов, которые нам необходимы, но также и количество классических битов, которые необходимы будут нам для измерений. В данном случае мы создали квантовую схему с двумя кубитами и двумя битами.

19.2 Квантовые гейты

Давайте попробуем воспроизвести функцию `make_entanglement` из лекции про `Pennylane`. Применим гейт Адамара к первому кубиту, а потом применим гейт **CNOT (CX)**:

```
circuit.h(0)
circuit.cx(0, 1)
```

```
<qiskit.circuit.instructionset.InstructionSet at 0x7f63909aa070>
```

И добавим шаг измерений:

```
circuit.measure([0,1], [0,1])
```

```
<qiskit.circuit.instructionset.InstructionSet at 0x7f63909aaaf0>
```

19.2.1 Компиляция и запуск схемы

Квантовые схемы Qiskit должны быть скомпилированы в инструкции квантового ассемблера. Для этого используется функция `transpile`:

```
from qiskit import transpile

compiled_circuit = transpile(circuit, simulator)
job = simulator.run(compiled_circuit, shots=1000)
result = job.result()
counts = result.get_counts(compiled_circuit)

print(f"Number of '00': {counts['00']}")
print(f"Number of '11': {counts['11']}")
```

```
Number of '00': 498
Number of '11': 502
```

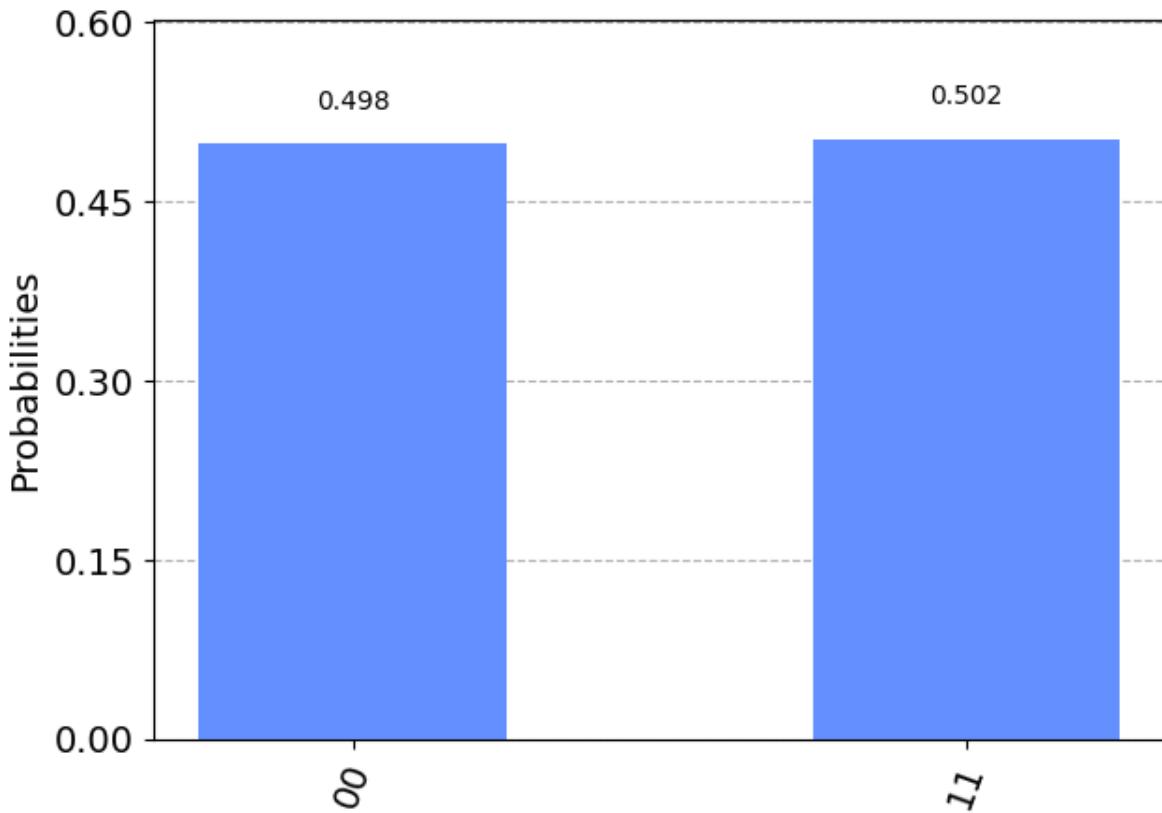
Мы получили результат, аналогичный полученному в лекции про PennyLane: вероятности получения результата 00 и 11 равны ~ 0.5 , а другие результаты мы получить не можем.

19.3 Визуализация

В Qiskit есть очень мощные средства визуализации как результатов измерений, так и самих квантовых схем. Например, мы можем посмотреть результаты измерения counts в виде графика:

```
from qiskit.visualization import plot_histogram
plot_histogram(counts)
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/qiskit/
    ↵visualization/counts_visualization.py:226: MatplotlibDeprecationWarning: The
    ↵label function was deprecated in Matplotlib 3.1 and will be removed in 3.8. Use
    ↵Tick.label1 instead.
    tick.label.set_fontsize(14)
```



А также визуализировать саму квантовую схему:

```
circuit.draw(output="mpl")
```



В данном случае мы использовали MatplotlibDrawe, который позволяет делать очень красивые и легко читаемые визуализации квантовых схем – это одна из причин почему Qiskit часто используют в курсах по основам квантовых вычислений.

19.4 Экосистема Qiskit

Для более подробного изучения всей экосистемы Qiskit мы рекомендуем [онлайн книгу](#), которая также является прекрасным источником для изучения базовых и продвинутых квантовых алгоритмов. Для знакомства со средствами для квантового машинного обучения можно также изучить [документацию библиотеки qiskit-machine-learning](#), в которой представлены высокоуровневые API для таких вещей, как, например, [квантовый SVM](#), или [квантовая Generative Adversarial Network](#).

Part VII

Базовые квантовые алгоритмы

О БЛОКЕ “БАЗОВЫЕ КВАНТОВЫЕ АЛГОРИТМЫ”

Этот блок включает в себя:

- общий обзор наиболее известных квантовых алгоритмов;
- реализации алгоритмов Дойча и квантовой телепортации.

Продвинутые темы блока дополнительно рассказывают об алгоритмах:

- Саймона;
- Гровера.

ОБЗОР КВАНТОВЫХ АЛГОРИТМОВ

Автор(ы):

- Ширкин Сергей

Квантовые вычисления открывают новые возможности решения задач, для которых ранее были известны только классические алгоритмы решения. С появлением идеи квантового компьютера стало понятно, что нахождение ответа для многих задач можно значительно ускорить. При этом некоторым сложным задачам, решить которые классическим способом в разумные сроки невозможно, квантовый компьютер дает реальный шанс быть решенными.

21.1 Классификация задач по временной сложности

Вообще, в соответствии с теорией алгоритмов, задачи можно разбить на классы по временной сложности их решения. Также часто используется классификация задач по объему необходимой памяти (пространственная сложность), но нас в первую очередь волнует, насколько быстро мы сможем найти правильный ответ, так что поговорим о временной сложности. Класс задач P – это те задачи, которые возможно решить на классическом компьютере за полиномиальное время, их сложность можно представить как $O(n^k)$. Соответственно, решение задач этого класса не является драматически затратным по времени (за исключением случаев, когда степень полинома высока, хотя такие алгоритмы и не являются типичными).

Другой класс задач – NP (расшифровывается как “недетерминировано полиномиальные”). Это класс задач, для которых неизвестно полиномиальное классическое решение. При этом проверка решения возможна за полиномиальное время. К примеру, нахождение простых множителей большого числа с помощью известных классических алгоритмов – субэкспоненциально сложная задача (работает за время, большее, чем полиномиальное, но меньшее, чем экспоненциальное). Проверить же найденное решение предельно просто: достаточно перемножить найденные простые числа.

Среди NP -задач есть наиболее сложные задачи, которые выделяют в специальную группу под названием NP -полные задачи (или NP -complete). Если найти для них быстрое решение, то этот способ решения также можно применить и к “обычным” NP -задачам.

Вообще, есть также задачи, которые, хотя и не относятся к классу NP , но несмотря на это, к ним все же можно свести задачи из NP -класса. В совокупности с NP -полными задачами они образуют класс NP -трудных задач (NP -hard).

К примеру, к NP -hard задачам относится задача коммивояжера, в которой требуется установить кратчайший путь. Как решение, так и его проверка в данном случае займут суперполиномиальное время, так что эта задача не входит в класс NP -complete. Если же ее немного упростить, так что решением будет являться путь не дольше заданного, то такая разновидность задачи является примером класса NP -complete, так проверка ее решения не требует времени, большего, чем полиномиальное.

Если дать возможность классическому компьютеру решать задачи с привнесением случайности, так что компьютер получает правильный ответ с высокой вероятностью (стандартно берут порог не менее $\frac{2}{3}$,

хотя достаточно, чтобы вероятность была константой больше 0.5), то можно говорить о классе задач *BPP* (сокращение от англ. bounded-error, probabilistic, polynomial). Такие задачи получается решить за полиномиальное время, причем точность решения можно сколько угодно увеличивать, повторно запуская алгоритм. Квантовый аналог таких задач – класс *BQP* (от англ. bounded error quantum polynomial time). Это задачи, которые получается решить на квантовом компьютере за полиномиальное время, обеспечивая точность решения повторным запуском алгоритма. Наиболее известный пример такой задачи – факторизация чисел, решаемая на квантовом компьютере с помощью алгоритма Шора.



Fig. 21.1: Классы задач по временной сложности

На данный момент можно говорить о том, что класс *BQP* включает в себя в том числе и задачи, для которых неизвестно полиномиальное классическое решение, что позволяет относиться к квантовым вычислениям с оптимизмом.

21.2 Наиболее известные квантовые алгоритмы

Квантовые вычисления, несмотря на новые возможности, которые они предоставляют, все же не являются панацеей: не для всех классических “медленных” (то есть, не решаемых за полиномиальное время) алгоритмов пока удалось найти ускоренный квантовый аналог. Более того, многие даже более простые задачи в настоящий момент выгоднее решать на классических компьютерах. Тем не менее, уже найдены квантовые алгоритмы, работающие быстрее классических. Кратко расскажем о наиболее важных из них.

Алгоритм Шора – алгоритм, наделавший больше всего шума и привлекший внимание научно-популярных СМИ к квантовым вычислениям. Действительно, этот алгоритм дает повод для беспокойства, так как он позволяет узнавать содержание сообщений, зашифрованных с помощью алгоритма шифрования RSA. Для расшифровки требуется разложить большое число на два простых множителя. Для классического компьютера решение этой задачи может занять несколько тысяч лет, а для алгоритма Шора это дело считанных часов или даже минут. Такая скорость вычислений обусловлена тем, что на квантовом компьютере удается ускорить преобразование Фурье (как прямое так и обратное). Благодаря алгоритму Шора начала развиваться квантовая криптография – шифрование, неуязвимое для атак.

Еще один алгоритм, способный преобразить мир ИТ – **алгоритм Гровера**. Благодаря ему возможно ускорить поиск по базе данных. Если на классическом компьютере решить задачу поиска элемента в базе данных

возможно только перебором всех элементов, то на квантовом компьютере можно получить квадратичное уменьшение сложности, так как за счет использования эффектов суперпозиции и квантовой запутанности алгоритм Гровера “просматривает” одновременно все элементы, хотя и делает это много раз, постепенно выявляя правильное решение.

Некоторые квантовые алгоритмы пока не выглядят полезными с практической точки зрения, но даже и в таком случае они уже демонстрируют возможности, которых нет в классических вычислениях. К примеру, **алгоритм Дойча** и **алгоритм Саймона** не несут особой практической пользы в силу своей простоты, но даже такие простые примеры квантовых вычислений демонстрируют значительное ускорение (в данном случае экспоненциальное). Эти алгоритмы позволяют быстро установить свойства функций. Если алгоритм Дойча определяет, является ли функция сбалансированной, то с помощью алгоритма Саймона можно вычислить период некоторой функции.

21.2.1 Перспективы квантовых алгоритмов

С увеличением числа кубитов и уменьшением количества ошибок в квантовых компьютерах известные квантовые алгоритмы смогут показать себя в полной мере, но также станет возможным находить новые, более сложные и практически полезные квантовые алгоритмы. Заниматься их поиском в ближайшее время будут не только физики и математики, но и программисты, освоившие квантовые вычисления.

21.3 Алгоритмы в нашем курсе

Для более глубокого погружения в детали этих квантовых алгоритмов у нас в курсе есть отдельные лекции по:

- Алгоритм Дойча (начальный уровень)
- Квантовая телепортация (начальный уровень) на *Qiskit*
- Алгоритм Гровера (продвинутый уровень)

CHAPTER
TWENTYTWO

АЛГОРИТМ ДОЙЧА

Автор(ы):

- Ширкин Сергей

Алгоритм Дойча (в английском варианте – **Deutsch's algorithm**) – это один из первых алгоритмов, показавших, что квантовый компьютер может решать задачи особым способом, отличающимся как от алгоритмов классического компьютера, так и от интуиции и здравого смысла человека. При этом такое решение может занимать меньшее количество шагов.

Нужно прежде всего сказать, что алгоритм Дойча не имеет практического применения в силу своей предельной простоты, зато является простейшим примером, с помощью которого можно понять, в чем состоит отличие квантовых алгоритмов от классических. Данный алгоритм был предложен в 1985 году, когда квантовых компьютеров еще не было, а практически он был реализован в 1998 году на 2-кубитном квантовом компьютере, работавшем на принципах ядерно-магнитного резонанса.

Дэвид Дойч

Помимо занятий теоретической физикой в Оксфордском университете, Дэвид Дойч – автор книг “Структура реальности” и “Начало бесконечности”, в которых он популярно излагает идеи квантовых вычислений с точки зрения многомировой интерпретации (сторонником которой является) и философствует о будущем науки и человечества. Так что можно сказать, что работа алгоритма, согласно замыслу создателя, производится в параллельных вселенных. Так это или нет, пока проверить невозможно, но вычисления работают, и это главное.

Итак, в чем состоит задача, которую решает алгоритм? Представьте, что у вас есть функция, которая представляет собой “черный ящик”, принимающий на вход число из множества $\{0, 1\}$. Функция неким образом обрабатывает входное значение и возвращает число из этого же множества, то есть либо 0, либо 1. Нам известно, что эта функция принадлежит либо к классу сбалансированных функций, либо к классу константных функций (которые мы также можем называть несбалансированными). Задача алгоритма – установить, к какому классу принадлежит функция.

Рассмотрим все варианты этих двух классов. Всего их четыре, то есть по две функции в каждом классе. Начнем с несбалансированных:

- $f_1(x) = 0$

Это функция, всегда возвращающая 0, независимо от входного значения. Для нее справедливы выражения:

$$f_1(0) = 0$$

$$f_1(1) = 0$$

- $f_2(x) = 1$

Такая функция всегда возвращает 1, то есть верно следующее:

$$f_2(0) = 1$$

$$f_2(1) = 1$$

Ну а теперь посмотрим на сбалансированные функции. Для них характерно то, что они могут возвращать как 0, так и 1. В этом и заключается “баланс”.

- $f_3(x) = x$

Это тождественная функция, которая ничего не делает с входным значением. Для нее справедливо следующее:

$$f_3(0) = 0$$

$$f_3(1) = 1$$

- $f_4(x) = \bar{x}$

А вот эта функция инвертирует входное значение, то есть возвращает не то число, которое было подано на вход, а другой:

$$f_4(0) = 1$$

$$f_4(1) = 0$$

Классический компьютер справляется с задачей за два шага. Например, нам дана некоторая функция—“черный ящик”, и мы должны установить, сбалансирована ли она. На первом шаге мы отправляем в функцию входное значение 0. Допустим, мы получили на выходе также 0. Мы можем сказать, что данная функция – либо f_1 (константная функция, всегда возвращающая 0), либо f_3 (сбалансированная функция, не меняющая входное значение). Для окончательного решения мы должны сделать еще один шаг – отправить в функцию значение 1. Если при этом мы получим опять 0, то это функция f_1 , а если получили на выходе 1, то искомая функция – f_3 .

Способа, с помощью которого на классическом компьютере можно за одно действие установить, сбалансирована функция или нет, не существует. И здесь свое преимущество показывает квантовый компьютер: он может установить класс функции за одно действие.

Для начала рассмотрим простейшую схему, с помощью которой можно отправлять число на вход и получать ответ от черного ящика:

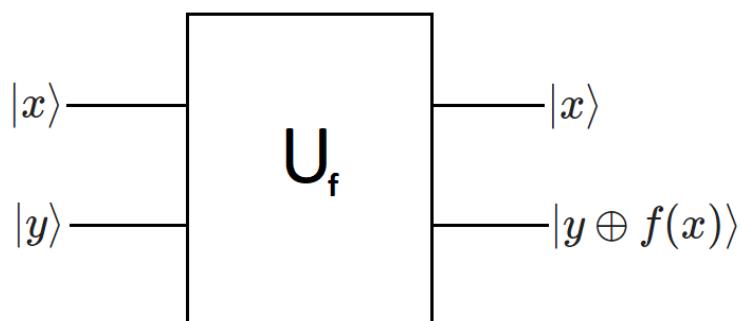


Fig. 22.1: Схема 1

U_f на данной схеме – это неизвестная функция (ее также часто называют “оракул”), являющаяся унитарным оператором. Обратите внимание, что в квантовой схеме используются два кубита. Это нужно для того, чтобы информация, с которой работает квантовый компьютер, не стиралась. В квантовом компьютере важно, чтобы

все действия с кубитами (кроме операции измерения) были обратимыми, а для этого информация должна сохраняться. В верхнем кубите будет записано входное значение, а в нижнем – выходное значение функции. Таким образом, входное значение не будет перезаписано значением, которое вернет функция.

Но нам важно будет не только сохранить значение $|x\rangle$, но также и не разрушить $|y\rangle$. Так как кубит y очевидно имеет некоторое изначальное значение, мы не можем его просто перезаписать тем числом, которое выдаст функция $f(x)$. Здесь на помощь приходит операция исключающее ИЛИ - XOR (также ее можно называть сложением по модулю 2), обозначенная на схеме как \oplus . В процессе работы черный ящик U_f не только находит значение $f(x)$, но и применяет исключающее ИЛИ к значениям y и $f(x)$.

Операции XOR соответствует такая таблица истинности:

a	b	a XOR b
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Операция XOR хороша для нас тем, что она не разрушает значение $|y\rangle$, так как является обратимой. Убедиться в этом можно, проверив тождество:

$$(a \oplus b) \oplus b = a$$

Схема 1 пока что не дает преимущества по сравнению с классическим компьютером, но мы можем ее немного усовершенствовать:

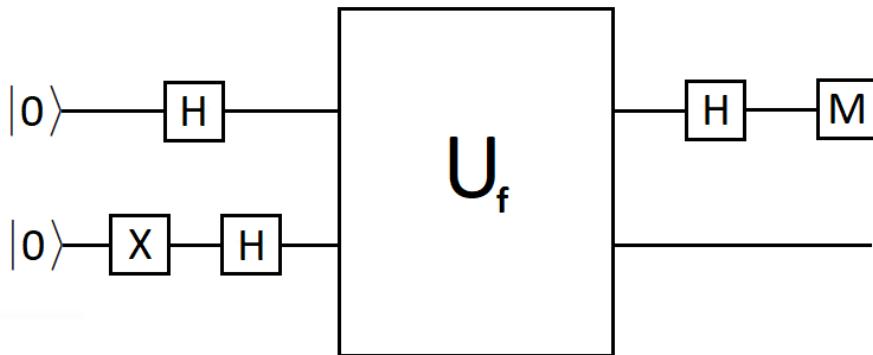


Fig. 22.2: Схема 2

В новой схеме оба кубита вначале будут находиться в состоянии $|0\rangle$. Затем мы применим к верхнему кубиту оператор Адамара, а к нижнему – гейт X , а затем так же, как и к верхнему, оператор Адамара. Тем самым мы приведем оба кубита в состояние суперпозиции перед тем, как они попадут на вход функции U_f . Верхний кубит будет находиться в такой суперпозиции:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle,$$

а нижний – в такой:

$$|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle.$$

Если рассмотреть это как систему $|\psi\rangle$, состоящую из двух кубитов, то она будет выглядеть так:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle)$$

Сразу после U_f система будет находиться в состоянии:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\oplus f(x)\rangle - |1\oplus f(x)\rangle)$$

После того, как U_f отрабатывает, нижний кубит, как это ни странно, уже нас не интересует, так что к нему операции больше не применяются, и его измерение также не производится.

Дело в том, что ответ на вопрос о том, сбалансирована функция $f(x)$ или нет, будет нами получен из верхнего кубита после того, как на него подействует оператор Адамара и будет произведено измерение. В том случае, если функция сбалансирована, результат измерения верхнего кубита будет равен 1, а если несбалансированна – 0.

Разберемся подробнее, почему это происходит. Рассмотрим все возможные $f(x)$, которые могут находиться в черном ящике:

- $f(x) = f_1$

В этом случае $f(x)$ всегда принимает значение 0, и система кубитов будет выглядеть так:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle)$$

- $f(x) = f_2$

$f(x)$ будет равно 1 независимо от аргумента. Используя таблицу истинности XOR, легко убедиться, что во второй скобке $|0\rangle$ и $|1\rangle$ поменяются местами, но если вынести минус за скобку, то мы можем его не учитывать, так общий фазовый множитель (-1 в данном случае) для системы не имеет значения:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|1\rangle - |0\rangle) = -\frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle) = -\frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle)$$

Видно, что при применении функций f_1 и f_2 , являющихся несбалансированными, мы получаем фактически одно и тоже состояние. Если после этого применить к первому кубиту оператор Адамара, то после измерения мы получим значение 0.

Рассмотрим теперь сбалансированные функции f_3 и f_4 .

- $f(x) = f_3$

Здесь ситуация сложнее, так как $f(x)$ будет зависеть от состояния первого кубита. Поэтому мы раскроем скобки, а значения функции подставим позже:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\oplus f(x)\rangle - |1\oplus f(x)\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle|0\oplus f(x)\rangle - |0\rangle|1\oplus f(x)\rangle + |1\rangle|0\oplus f(x)\rangle - |1\rangle|1\oplus f(x)\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle|0\oplus 0\rangle - |0\rangle|1\oplus 0\rangle + |1\rangle|0\oplus 1\rangle - |1\rangle|1\oplus 1\rangle) = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |11\rangle - |10\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}$$

Видно, что первый кубит поменял свое состояние – теперь он в суперпозиции $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, так что далее к нему можно применить оператор Адамара, после которого он перейдет в состояние $|1\rangle$.

- $f(x) = f_4$

Здесь будет похожая ситуация:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\oplus f(x)\rangle - |1\oplus f(x)\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle|0\oplus f(x)\rangle - |0\rangle|1\oplus f(x)\rangle + |1\rangle|0\oplus f(x)\rangle - |1\rangle|1\oplus f(x)\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle|0\oplus 1\rangle - |0\rangle|1\oplus 1\rangle + |1\rangle|0\oplus 0\rangle - |1\rangle|1\oplus 0\rangle) = \frac{1}{2}(|01\rangle - |00\rangle + |10\rangle - |11\rangle) = \\ &= -\frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |11\rangle - |10\rangle) = -\frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}$$

Получили то же состояние $|\psi\rangle$, что и для f_3 , с точностью до фазового множителя. Соответственно, здесь первый кубит после применения оператора Адамара также будет измерен с результатом 1.

Теперь можно получить более компактную формулу, которая подходит для всех четырех функций:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle)$$

Задание

С помощью квантовых операторов попробуйте создать U_f для всех четырех $f(x)$.

Задание рекомендуется сделать до прочтения программистской части по алгоритму Дойча, так как там содержится ответ.

22.1 Алгоритм Дойча в коде

Запрограммируем алгоритм с помощью библиотеки PennyLane. Предполагается, что функция, находящаяся в черном ящике, изначально присутствует, но для учебного примера создадим также и ее, точнее, все ее четыре варианта. Для того, чтобы нам не сразу было известно, какая из этих функций анализируется алгоритмом (иначе будет неинтересно), будем использовать случайный выбор функции.

Импортируем все необходимые библиотеки и модули, а также создадим квантовое устройство-симулятор, рассчитанное на схему из двух кубитов:

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np

dev = qml.device("default.qubit", shots=1, wires=2)
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Теперь создадим функции для черного ящика. Обратите внимание, что здесь уже учтено сложение по модулю 2 результата функции с состоянием второго кубита:

```
def f1():
    pass

def f2():
    qml.PauliX(wires=[1])

def f3():
    qml.CNOT(wires=[0, 1])

def f4():
    qml.PauliX(wires=0)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    qml.PauliX(wires=0)
```

Создадим словарь с функциями и их названиями:

```
black_boxes_dict = {"f1": f1, "f2": f2, "f3": f3, "f4": f4}
```

А вот таким образом мы будем случайно выбирать название функции для черного ящика:

```
def random_black_box(black_boxes_dict):
    black_boxes_dict_list_keys = list(black_boxes_dict.keys())
    n = np.random.randint(0, len(black_boxes_dict_list_keys))

    return black_boxes_dict_list_keys[n]
```

А теперь самое важное – сам алгоритм Дойча:

```
@qml.qnode(dev, interface=None)
def circuit(black_box_name):
    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.PauliX(wires=1)
    qml.Hadamard(wires=1)

    black_boxes_dict[black_box_name]()
    qml.Hadamard(wires=0)

    return qml.sample(qml.PauliZ([0]))
```

Итак, подготовительные действия завершены, можно приступать к демонстрации работы алгоритма.

Выберем случайным образом функцию:

```
black_box_name = random_black_box(black_boxes_dict)
```

А затем запустим алгоритм Дойча и выведем результат его работы. Собственное значение 1 оператора Z будет соответствовать состоянию $|0\rangle$ (функция несбалансированная), а собственное значение -1 – состоянию $|1\rangle$ (функция сбалансирована):

```
result = circuit(black_box_name)
print(result)
```

1

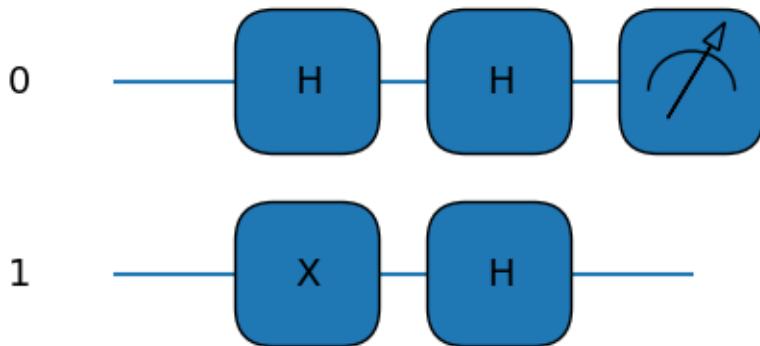
Проверим, насколько правильно сработал алгоритм. Для этого посмотрим на функцию из черного ящика:

```
print(black_box_name)
```

f1

Также посмотрим, как выглядит квантовая схема:

```
qml.drawer.use_style("default")
fig, ax = qml.draw_mpl(circuit)(black_box_name)
fig.show()
```



На примере алгоритма Дойча мы видим, что уже двухкубитная схема дает прирост скорости в два раза. Если же увеличивать количество входных параметров (как в аналогичном алгоритме [Дойча-Йожи](#)), то ускорение будет экспоненциальным.

Для специалистов, занимающихся искусственным интеллектом, алгоритм может быть интересен тем, что не просто решает задачу нахождения некоторого значения, действуя как калькулятор, а дает возможность определить скрытую функцию. Это похоже на задачи машинного обучения, когда data scientist, производя математические манипуляции с данными, в итоге получает модель (фактически – функцию), описывающую связь признаков с целевой переменной. Таким образом, интерес специалистов ИИ к квантовым вычислениям, вполне понятен, как и перспективы квантовых вычислений в этой области.

CHAPTER
TWENTYTHREE

КВАНТОВАЯ ТЕЛЕПОРТАЦИЯ

Автор(ы):

- Решетова Карина
- Токарев Игорь

Пожалуй, пришло время познакомиться с квантовой телепортацией.

Часто вижу в новостях “телепортировали кубит”, “телепортировали электрон”. Но это лишь игра слов... Рассмотрим два запутанных электрона – первый находится у вас, а второй у вашего друга. И под телепортацией подразумевается вот что: вы, используя допустимую операцию, изменяете состояние своего электрона, и второй (запутанный с ним), также изменит свое состояние (в соответствии с примененной операцией). Вам остается лишь выбрать допустимую операцию.

Давайте сейчас посмотрим на [состояния Белла](#) (Bell states). Прошу:

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (23.1)$$

$$|\beta_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

$$|\beta_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$$

$$|\beta_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

Это четыре всадника квантовой запутанности. И у них есть много преимуществ: используют всего два кубита, их легко получить... А что нам еще нужно? Дальше в примере мы воспользуемся одним из этих состояний.

Теперь работаем в терминах квантовой теории информации – это сильно поможет с пониманием остальных тем нашего с вами курса.

Итак, квантовая телепортация будет проводиться двумя персонами – Алисой и Бобом, из которых первые два кубита контролируются Алисой, а третий – Бобом. Алиса хочет передать Бобу закодированное сообщение (отождествляемое с квантовым состоянием): $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

Изначально, вся система из трех кубитов будет иметь следующее состояние: $|\psi_0\rangle = |\psi\rangle|0\rangle|0\rangle$. Т.е. первый кубит находится в состоянии $|\psi\rangle$, которое затем будет передаваться с помощью второго кубита на третий.

Алиса и Боб

Первые два шага являются подготовительными. Поэтому Боб находится рядом и ждет, пока Алиса проведет необходимые операции.

1. Алиса применяет гейт Адамара ко второму кубиту:

$$|\psi_1\rangle = (I \otimes H \otimes I)|\psi_0\rangle = (I \otimes H \otimes I)|\psi\rangle|0\rangle|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi\rangle(|0\rangle + |1\rangle)|0\rangle$$

2. Далее Алиса использует гейт CNOT для того, чтобы запутать второй кубит с третьим:

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= (I \otimes CNOT(2, 3))|\psi_1\rangle = \\ &(I \otimes CNOT(2, 3))\frac{1}{\sqrt{2}}|\psi\rangle(|0\rangle + |1\rangle)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi\rangle(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle) \end{aligned}$$

Алиса и Боб

Теперь состояния готовы. Сейчас Боб, забрав третий кубит с собой, отправляется по своим делам. И Алиса, в случае необходимости, сможет передать ему послание.

3. Алиса применяет CNOT между первым и вторым кубитами. Вспоминая, что $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$:

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= (CNOT(1, 2) \otimes I)|\psi_2\rangle = \\ &(CNOT(1, 2) \otimes I)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(|00\rangle + |11\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(|000\rangle + |011\rangle) + \beta(|110\rangle + |101\rangle)] \end{aligned}$$

4. Алиса применяет гейт Адамара на своем первом кубите:

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle &= (H \otimes I \otimes I)|\psi_3\rangle = \\ &\frac{1}{2}[|00\rangle(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + \\ &|01\rangle(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) + \\ &|10\rangle(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + \\ &|11\rangle(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)] \end{aligned}$$

Внимание

Видно, что в каждой строчке у нас получаются разные состояния, по первым двум кубитам мы можем определить, в каком будет третий. Обратите внимание на общий множитель $\frac{1}{2}$ в первой строчке, не пропустите.

5. Алисе нужно теперь измерить первые 2 кубита и станет ясно, в какое из четырех состояний перейдет кубит Боба:

00	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
01	$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$
10	$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$
11	$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$

6. В зависимости от полученных по классическому каналу данных, Боб должен применить одну из операций для того, чтобы восстановить исходное состояние:

00	I
01	X
10	Z
11	ZX

Одним из ограничений квантовой телепортации является необходимость передать результаты измерений первых двух кубитов от Алисы к Бобу по классическому каналу (5 шаг). Поэтому весь протокол выполняется не быстрее скорости света.

Приведем данную схему:

```
from qiskit import QuantumCircuit, ClassicalRegister, QuantumRegister

# создаем необходимые регистры
qr = QuantumRegister(3, name="q")
crz = ClassicalRegister(1, name="crz")
crx = ClassicalRegister(1, name="crx")

# создаем схему
qc = QuantumCircuit(qr, crz, crx)

# Шаг 1
qc.h(qr[1])
# Шаг 2
qc.cx(qr[1], qr[2])

# Шаг 3
qc.cx(qr[0], qr[1])
# Шаг 4
qc.h(qr[0])

# Шаг 5 - измеряются 2 кубита Алисы, чтобы передать результат Бобу
qc.measure(qr[0], crz)
qc.measure(qr[1], crx)

# Шаг 6 - применяются гейт X и гейт Z в зависимости от того, какое из измерений дает результат 1.
qc.x(qr[2]).c_if(crx, 1)
qc.z(qr[2]).c_if(crz, 1)

qc.draw()
```



Лекция и реализация квантовой телепортации в Qiskit

CHAPTER
TWENTYFOUR

КВАНТОВОЕ СВЕРХПЛОТНОЕ КОДИРОВАНИЕ

Автор(ы):

- Бурдейный Дмитрий

Сверхплотное кодирование (Superdense coding) – простое, но при этом довольно неожиданное приложение квантовой механики. Оно комбинирует определенным нетривиальным образом большинство основных идей этой физической теории, и потому является отличным примером решения задач обработки информации с помощью квантовой механики.

В задаче о сверхплотном кодировании рассматриваются два действующих лица – Алиса и Боб. Они могут находиться, вообще говоря, далеко друг от друга. Цель – передать некоторое количество классической информации от Алисы к Бобу. Пусть у Алисы есть два классических бита информации, которые она хочет передать Бобу, но Алисе разрешено переслать Бобу только один кубит. Достижима ли эта цель?

Задача о сверхплотном кодировании в некотором смысле противоположна задаче о *квантовой телепортации*:

квантовая телепортация	сверхплотное кодирование
передача одного кубита с помощью двух классических бит	передача двух классических бит с помощью одного кубита

Ответ на вопрос выше – утвердительный. Пусть изначально у Алисы и Боба есть пара кубитов в запутанном состоянии

$$\psi = \beta_{00} = \frac{00 + 11}{\sqrt{2}}$$

(это первое состояние Белла (??) из четырёх, перечисленных в предыдущей лекции о квантовой телепортации). Вначале первый кубит находится у Алисы, второй – у Боба. Обратите внимание, что для приготовления состояния ψ Алисе не требовалось присыпать Бобу никаких кубитов. Некое третье действующее лицо могло приготовить запутанное состояние ψ заранее и переслать первый кубит Алисе, второй – Бобу.

Оказывается, Алиса может передать два бита классической информации Бобу, отправив ему свой кубит. Для этого Алиса выполняет следующую процедуру:

1. Если Алиса хочет передать Бобу битовую строку “00”, она ничего не делает со своим кубитом.
2. Если Алиса хочет передать битовую строку “01”, она применяет оператор X (гейт NOT) к своему кубиту.
3. Если Алиса хочет передать битовую строку “10”, она применяет оператор Z к своему кубиту.
4. Если Алиса хочет передать битовую строку “11”, она применяет оператор $ZX = iY$ к своему кубиту.

В результате получаются состояния двухкубитной системы справа от стрелок в следующих формулах (проверьте

это!):

$$\begin{aligned} 00 : \psi &\rightarrow \frac{00 + 11}{\sqrt{2}} = \beta_{00}, \\ 01 : \psi &\rightarrow \frac{10 + 01}{\sqrt{2}} = \beta_{01}, \\ 10 : \psi &\rightarrow \frac{00 - 11}{\sqrt{2}} = \beta_{10}, \\ 11 : \psi &\rightarrow \frac{01 - 10}{\sqrt{2}} = \beta_{11}, \end{aligned}$$

т.е. как раз четыре состояния Белла. Они образуют ортонормированный базис в пространстве состояний двухкубитной системы (убедитесь в этом самостоятельно). Следовательно, эти четыре состояния можно различить подходящим измерением для двухкубитной системы. Если Алиса отправит свой кубит Бобу, то Боб после измерения двухкубитной системы в базисе Белла сможет определить, которую из четырех возможных битовых строк Алиса хотела отправить.

Бобу для декодирования удобно было бы применить некий двухкубитный унитарный оператор, отображающий базис Белла в вычислительный базис (чтобы в итоге выполнить измерение в вычислительном базисе). Для этого можно применить оператор $CNOT$ (первый кубит – контрольный) и затем оператор Адамара H для первого кубита, как показано в пунктирном блоке в нижнем правом углу на общей схеме:

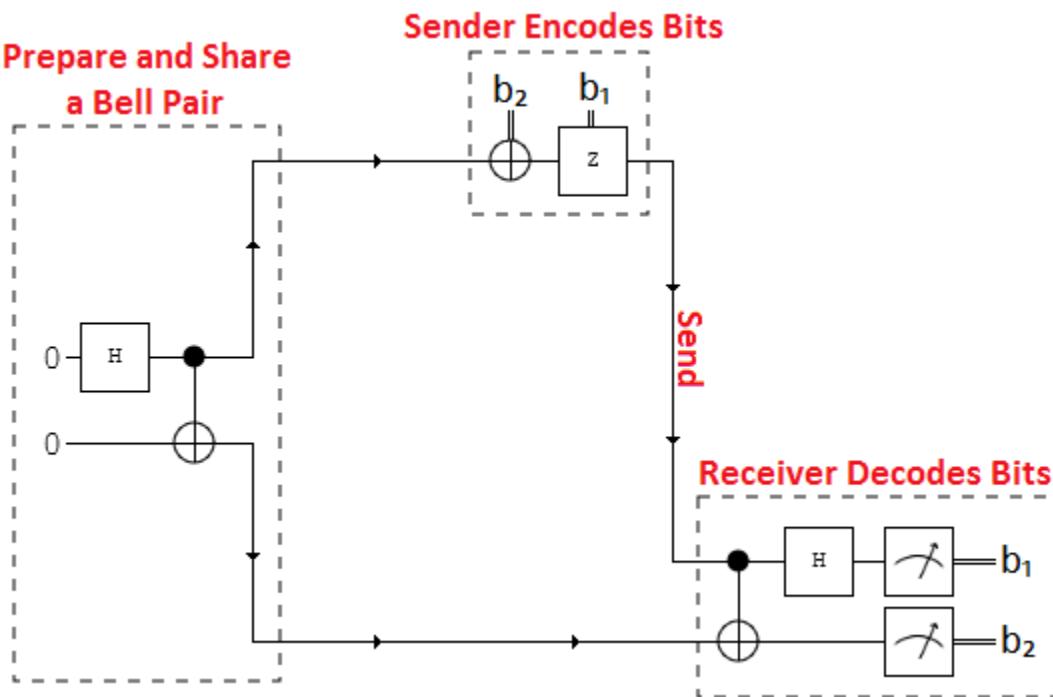


Fig. 24.1: Общая схема для решения задачи о сверхплотном кодировании

В качестве упражнения проверьте самостоятельно, что произведение операторов $(H \otimes I)CNOT$ действительно переводит базис $\{\beta_{00}, \beta_{01}, \beta_{10}, \beta_{11}\}$ в базис $\{00, 01, 10, 11\}$.

Приведем код на qiskit.

```
from qiskit import QuantumCircuit
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

qc = QuantumCircuit(2)

# готовим состояние beta_{00} из стартового состояния |00>:
qc.h(0)
qc.cx(0, 1)

# визуальный разделитель при отрисовке схемы:
qc.barrier()

# выбираем какое-либо сообщение из набора в assert-выражении ниже:
message = '10'

assert message in ('00', '01', '10', '11')

# Алиса выполняет кодирование сообщения:
if message[1] == "1":
    qc.x(0)
if message[0] == "1":
    qc.z(0)

qc.barrier()

# Боб декодирует сообщение:
qc.cx(0, 1)
qc.h(0)

# Боб измеряет двухкубитную систему целиком (в вычислительном базисе):
qc.measure_all()

qc.draw()

```



Запускаем схему на симуляторе:

```

from qiskit import Aer

aer_sim = Aer.get_backend('aer_simulator')
result = aer_sim.run(qc).result()
counts = result.get_counts(qc)

print(
    f"message was '{message}' -> the measurement result is {counts}"
    " (<- NOTE: the keys are little-endian!)"
)

```

```
message was '10' -> the measurement result is {'01': 1024} (<- NOTE: the keys are little-endian!)
```

RTFM!

Обратите внимание на [документацию](#) к `qiskit.result.Result.get_counts!`. Ключи возвращаемого словаря – это битовые строки в **little-endian** формате, т.е. кубит с индексом [0] находится справа в битовой строке.

Инициализируем переменную `message` каждым из четырех значений и получаем следующие результаты:

```
message was '00' -> the measurement result is {'00': 1024}
message was '01' -> the measurement result is {'10': 1024}
message was '10' -> the measurement result is {'01': 1024}
message was '11' -> the measurement result is {'11': 1024}
```

Резюмируем. Алиса, взаимодействуя только с одним кубитом, смогла передать два классических бита информации Бобу. Конечно, в процедуре участвовало два кубита, но Алисе не требовалось взаимодействовать со вторым кубитом. Если бы Алиса пересыпала Бобу один классический бит вместо одного кубита, то передать таким способом два классических бита было бы невозможно, разумеется.

Существуют более впечатляющие, чем сверхплотное кодирование, примеры применения квантовой механики к задачам обработки информации. Но на примере сверхплотного кодирования виден важнейший принцип – **информация физична**. Нетривиальные физические теории вроде квантовой механики могут привести к неожиданным новым возможностям в обработке информации.

Напоследок рассмотрим вопрос безопасности коммуникации. Допустим, некий третий субъект (пусть с именем Ева) хочет “подслушать” сообщение, передаваемое Бобу. Ева перехватывает кубит, отправленный Алисой, и может попытаться извлечь какую-либо полезную информацию, выполнив какое-либо измерение над кубитом Алисы. Пусть Ева использует положительно-определенный оператор E для первого кубита и вычисляет величину $\xi|E \otimes I|\xi$, где ξ – одно из состояний $\{\beta_{00}, \beta_{01}, \beta_{10}, \beta_{11}\}$. Кубит Боба (второй кубит) Еве недоступен, поэтому мы поставили единичный оператор на второе место в составном операторе. Любое возможное состояние ξ можно записать в виде

$$\xi = \frac{\phi_1 + \phi_2}{\sqrt{2}},$$

где ϕ_1, ϕ_2 – двухкубитные состояния, соответствующие вычислительному базису (см. формулы для β_{ij} выше). Например, $\phi_1 = 01, \phi_2 = -10$ для случая $\xi = \beta_{11}$ и т.д.

$$2\xi|E \otimes I|\xi = \phi_1|E \otimes I|\phi_1 + \phi_2|E \otimes I|\phi_2 + \phi_1|E \otimes I|\phi_2 + \phi_2|E \otimes I|\phi_1.$$

В каждом из четырех возможных случаев $\phi_1|E \otimes I|\phi_2 = \phi_2|E \otimes I|\phi_1 = 0$, потому что второй кубит имеет противоположные значения в ϕ_1 и ϕ_2 . Вычислив $\phi_i|E \otimes I|\phi_i$ для $i = 1, 2$ (первые два слагаемых в правой части), легко убедиться, что

$$2\xi|E \otimes I|\xi = 0|E|0 + 1|E|1$$

во всех случаях. Таким образом, Ева всегда будет получать один и тот же результат своего измерения, не зависящий от сообщения, которое Алиса пыталась передать Бобу. Ева не сможет получить никакой полезной информации о сообщении от Алисы, перехватив её кубит.

[Лекция и реализация процедуры сверхплотного кодирования в Qiskit](#)

CHAPTER
TWENTYFIVE

АЛГОРИТМ ГРОВЕРА

Автор(ы):

- Ширкин Сергей

Одно из самых востребованных действий в работе с данными – поиск по базе данных. При использовании классического компьютера такой поиск в худшем случае требует N операций, где N – количество строк в таблице. В среднем найти нужный элемент можно за $N/2$ операций.

Фактически, это означает, что если мы не знаем, где расположен нужный элемент в таблице, то придется перебирать все элементы, пока не найдем то, что нужно. Для классических вычислений это нормально, но что, если у нас есть квантовый компьютер?

Если наша база данных работает на основе квантовых вычислений, то мы можем применить алгоритм Гровера, и тогда такой поиск потребует всего порядка \sqrt{N} действий. Конечно же, такое ускорение не будет экспоненциальным, как при использовании некоторых других квантовых алгоритмов, но оно будет квадратичным, что также довольно неплохо.



Fig. 25.1: Лов Гровер

Лов Гровер

Индо-американский ученый в сфере Computer Science Лов Кумар Гровер предложил квантовый алгоритм поиска по базе данных в 1996 году. Этот алгоритм считается вторым по значимости для квантовых вычислений после

алгоритма Шора. Впервые он был реализован на простейшем квантовом компьютере в 1998 году, а в 2017 году алгоритм Гровера был впервые запущен для трехкубитной базы данных.

Итак, наша задача состоит в том, что мы должны найти идентификационный номер (Id) записи, которая удовлетворяет определенным условиям. Функция-оракул находит такую запись (для простоты будем сначала считать, что такая запись одна) и помечает соответствующий ей Id . Отметка делается достаточно оригинальным способом: Id умножается на -1 .

Для полной ясности соотнесем количество Id с числом кубитов в квантовой схеме. Здесь все очень просто: имея n кубитов, можно закодировать $N = 2^n$ идентификаторов. К примеру, если в таблице базы данных 1024 записей, то закодировать все Id можно с помощью десяти кубитов.

Для того, чтобы не запутаться в квантовых операциях, рассмотрим пример поменьше: с помощью двух кубитов закодируем четыре идентификационных номера, один из которых будет помечен функцией-оракулом как искомый – он будет домножен на -1 . Все эти четыре числа могут существовать в квантовой схеме одновременно, если кубиты приведены в состояние суперпозиции.

Пусть искомый Id равен 11 (будем пользоваться двоичной системой и вести счет с нуля), тогда после работы функции-оракула мы будем иметь 4 состояния: $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $-|11\rangle$. Проблема в том, что если измерить эту схему, то с равной вероятностью будет обнаружено одно из этих четырех значений, но узнать, какое из них функция-оракул пометила минусом, будет невозможно.

Получается, что одной функции-оракула недостаточно, нужно что-то дополнительное. На помощь приходит алгоритм Гровера. Правда, у него есть такая особенность – он является итерационным, то есть определенные операции (в том числе и применение функции-оракула) нужно повторить несколько раз (порядка \sqrt{N}). Причем, с количеством итераций нельзя ошибиться, иначе алгоритм даст неправильный ответ.

В идеале после всех итераций квантовую схему можно будет измерить и получить значение Id искомой записи в таблице базы данных.

Разберем операции, которые включает в себя каждая итерация, но перед этим добавим в схему еще один кубит, который мы будем называть вспомогательным. Он нужен для хранения метки искомого индекса. Звучит не совсем понятно, но ничего сложного в этом нет, все станет ясным после разбора работы функции-оракула. Итак, наша база данных двухкубитная, но сама схема состоит из трех кубитов.

Квантовая схема выглядит так:

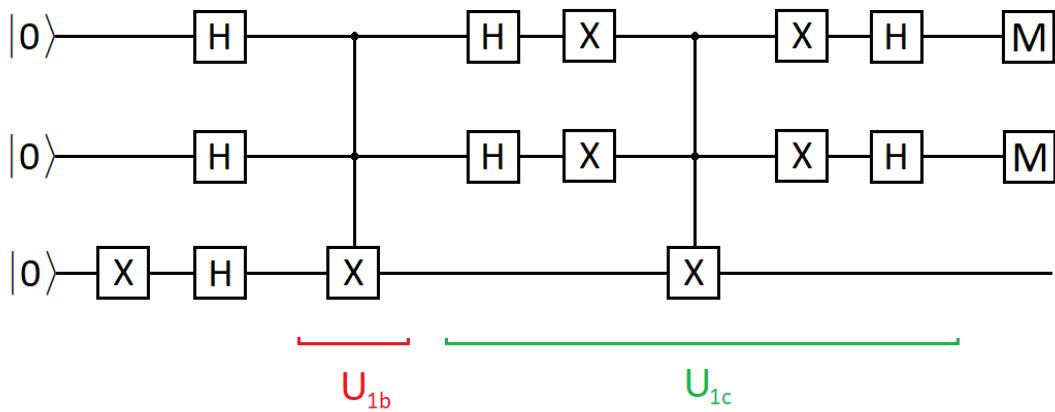


Fig. 25.2: Алгоритм Гровера для $n=2$ (искомый индекс 11).

В самом начале, еще до всех итераций, все кубиты (включая вспомогательный) должны быть приведены в состояние суперпозиции с помощью оператора Адамара. Причем начальное состояние всех кубитов должно быть равно 0, кроме вспомогательного кубита – до действия оператора Адамара он должен быть приведен в состояние 1.

Таким образом, вспомогательный кубит после применения оператора Адамара будет находиться в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, тогда как остальные кубиты примут состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

Далее начинаем итерации. Каждая итерация состоит из двух частей. Первая часть – это действие функции-оракула. Это некоторая функция, умеющая эффективно определять, какой индекс соответствует искомому объекту. Эта функция не может сообщить нам этот индекс напрямую, зато она может пометить его минусом.

Для разбора внутренней работы алгоритма нам потребуется задать функцию-оракул вручную и сделать ее достаточно простой, поэтому нужно знать, что в рабочих условиях она будет действовать похоже, но будет устроена, скорее всего, по-другому, так как предназначена для конкретной задачи выбора искомых данных. Мы не будем касаться вопроса конкретной реализации функции-оракула для выбора определенных данных, так как это уже другой вопрос, не влияющий на принцип алгоритма Гровера.

Для того чтобы понять алгоритм Гровера, мы должны будем понять, какие изменения происходят с состояниями кубитов до того момента, когда производится измерение, выдающее искомый индекс.

Мы договорились, что в нашей учебной задаче искомый *Id* равен 11, так что в результате измерения мы должны получить именно это значение. Смоделируем оракул, который будет помечать этот индекс. В качестве такого оракула подойдет гейт Тоффоли (*CC NOT*). При подаче на оба его управляющих входа значений 1, он будет применять к управляемому кубиту (это как раз будет вспомогательный кубит) гейт *X*.

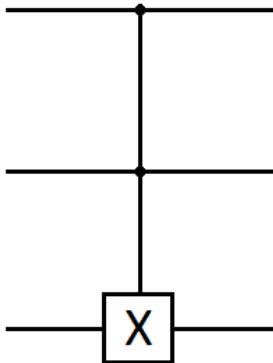


Fig. 25.3: Гейт Тоффоли.

На состояния верхних кубитов, кодирующих индексы 00, 01 и 10 гейт Тоффоли не будет реагировать, и вспомогательный кубит будет находиться в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$.

Но при срабатывании гейта на индексе 11 к вспомогательному кубиту применится оператор *X*, так что вспомогательный кубит примет состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |0\rangle)$, или, если это состояние записать по-другому, за скобками появится минус: $-\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$.

Этот минус относится не только к вспомогательному кубиту, но и ко всему состоянию, соответствующему индексу 11, так что можно считать, что вспомогательный кубит остался неизменным, и отнести минус к состоянию 11 верхних кубитов. Таким образом, индекс 11 помечен минусом как искомый. Другими словами, функция-оракул перевела состояние $|11\rangle|q_{helper}\rangle$ в состояние $-|11\rangle|q_{helper}\rangle$, где $|q_{helper}\rangle$ – вспомогательный кубит.

Запишем состояние квантовой схемы после применения оракула (состояние вспомогательного кубита – скобка справа):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle)(|0\rangle - |1\rangle)$$

Итак, первая часть первой итерации завершена. Искомый индекс помечен, но если измерить кубиты прямо сейчас, то это ничего не даст – минус не проявится при измерении. Да и сам индекс 11 будет получен только с вероятностью 0.25 – такой же, как и у других индексов.

Для того, чтобы лучше понять дальнейшие действия, представим первую половину работы алгоритма в виде рисунка, показывающего вектор текущего состояния. В качестве единичного вектора горизонтальной оси мы будем использовать все состояния из суперпозиции кроме того, который соответствует искомому индексу, а вертикальным единичным вектором будет искомый вектор.

Вектор c – состояние системы перед первой итерацией – является линейной комбинацией векторов, соответствующим горизонтальной и вертикальной осям.



Fig. 25.4: Состояние системы перед первой итерацией.

Можно выразить вектор c для нашего случая (системы из двух кубитов с искомым индексом 11), обозначив его координаты за x и y :

$$\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) = x \frac{1}{\sqrt{3}}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle) + y|11\rangle$$

Из данного уравнения находим $x = \frac{\sqrt{3}}{2}$ и $y = \frac{1}{2}$.

По этим координатам можно понять, что угол между вектором c и горизонтальной осью (обозначим его как θ) равен $\frac{\pi}{6}$. Если забежать немного вперед, то можно сказать, что наша цель – добиться, чтобы текущее состояние дошло до $\frac{\pi}{2}$ (или хотя бы приблизительно), то есть почти или полностью равнялось искомому состоянию, так что после измерения можно было его и получить с высокой вероятностью.

Координаты текущего вектора состояния можно записать через угол θ :

$$x = \cos \theta$$

$$y = \sin \theta$$

На всякий случай нужно уточнить, что вспомогательный кубит не отражается на рисунке с окружностью, так как он не предназначен для обозначения индекса, а только хранит в себе его метку.

После применения функции-оракула текущий вектор отразится относительно горизонтальной оси. Объясняется это очень легко – его вертикальная компонента (вектор $|11\rangle$) становится отрицательной.

Вектор c_{1b} – это отражение вектора c на угол θ вниз относительно горизонтальной оси:



Fig. 25.5: Состояние системы после первой части первой итерации.

Такое отражение в нашем примере производится с помощью операции $CCNOT$, но в общем случае операция выглядит так:

$$U_{1b} = I - 2|b\rangle\langle b|$$

Функцию-оракул мы здесь обозначили как U_{1b} . Она меняет знак только для вертикальной составляющей вектора состояния, поэтому и происходит отражение.

Проверим формулу в действии, применив ее для нашего примера:

$$U_{1b}|c\rangle = (I - 2|11\rangle\langle 11|)\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle - 2|11\rangle) = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle)$$

И наконец приступаем к разбору второй части первой итерации. В ней будет происходить еще одно отражение вектора, но уже не относительно горизонтальной оси, а относительно вектора c . Нетрудно заметить, что при этом текущий вектор состояния станет равен $\cos 3\theta|a\rangle + \sin 3\theta|b\rangle$.



Fig. 25.6: Состояние системы после второй части первой итерации.

Операция для получения вектора c_{1c} будет выглядеть так:

$$U_{1c} = 2|c\rangle\langle c| - I$$

Посчитаем, чему равен вектор c_{1c} для нашего примера:

$$U_{1c}|c_{1b}\rangle = (2|c\rangle\langle c| - I)\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle) = |11\rangle$$

Произошло отражение текущего вектора состояния $|c_{1b}\rangle$ относительно вектора $|c\rangle$. Если представить $|c_{1b}\rangle$ как $k_1|c\rangle + k_2|c_\perp\rangle$, где $|c_\perp\rangle$ – вектор, перпендикулярный $|c\rangle$, а k_1 и k_2 – действительные коэффициенты, то тогда отраженный вектор будет равен $k_1|c\rangle - k_2|c_\perp\rangle$.

В нашей квантовой схеме эта часть итерации реализована таким образом:

Вначале применяется оператор Адамара для первого и второго кубитов. Это упрощает нашу задачу, так как теперь отразить вектор состояния нужно не относительно состояния суперпозиции $\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$, а относительно состояния $|00\rangle$.

Далее требуется отразить вектор, то есть всем состояниям кроме нулевого присвоить минус, но мы сделаем проще: присвоим минус нулевому состоянию $|00\rangle$, а остальные состояния, составляющие суперпозицию, оставим как есть. Сделаем это, последовательно применив гейты X и $CCNOT$. После этого вернемся в исходную “систему координат”, применив операции в обратном порядке: сначала X , а потом H .

Из-за применения такого лайфхака (присвоения минуса нулевому состоянию) мы в нашем двухкубитном примере получим результат с точностью до общей фазы: не $|11\rangle$, а $-|11\rangle$. Но это не страшно, так как после измерения мы все равно увидим искомое значение индекса.

По рисунку, изображающему на окружности состояние системы после второй части первой итерации, видно, что в общем случае каждая последующая итерация будет приближать текущий вектор к вертикальному. Но в нашем

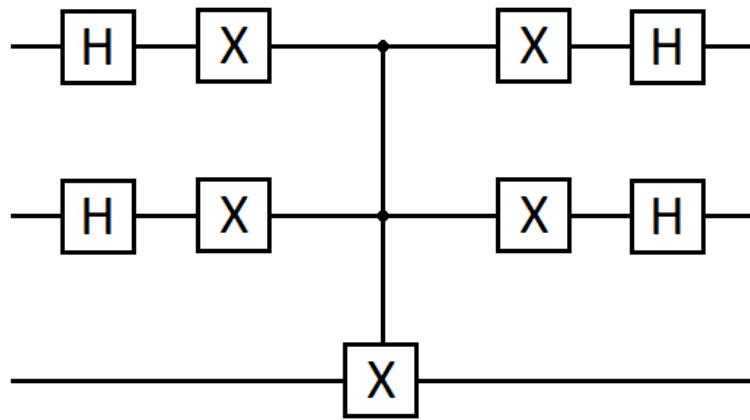


Fig. 25.7: Вторая часть итерации.

случае угол между вектором состояния и горизонтальной осью после окончания первой итерации равен 3θ , то есть это уже и есть желаемый угол $\frac{\pi}{2}$.

В общем случае этот угол равен $(2t + 1)\theta \approx \frac{\pi}{2}$, где t – номер произведенной итерации. Отсюда можно вывести число итераций, необходимое для работы алгоритма. При большом требуемом количестве итераций t и фиксированном $K = 1$ (для $K > 1$ вывод формулы аналогичный) угол θ будет близок к 0, так что его можно заменить на $\sin \theta$, который, в свою очередь, равен $\frac{1}{\sqrt{N}}$:

$$(2t + 1)\theta \rightarrow (2t + 1) \frac{1}{\sqrt{N}} \approx \frac{\pi}{2}$$

Если пренебречь единицей в скобках на основании того, что t – большое число, можно найти, что t приблизительно равно $\frac{\pi\sqrt{N}}{4}$.

Мы уже разобрались, что каждая итерация состоит из двух частей. Первая часть – отражение вниз относительно горизонтальной оси. Вторая часть – отражение вверх относительно изначального состояния, то есть вектора c . Вектор состояния всегда будет отражаться вверх на больший угол, чем в первой части итерации. Этим и будет обеспечиваться его постепенное приближение в вертикальной оси.

Мы разбрали случай, когда требуется найти один объект в таблице. Если же потребуется найти несколько объектов, то тогда, обозначив их количество за K , мы должны будем проделать около $\frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{N}{K}}$ итераций. Таким образом, для успешной работы алгоритма Гровера необходимо знать число K , чтобы можно было найти через него угол θ , а затем число итераций.

25.1 Реализация алгоритма Гровера

Итак, мы разбрали общие принципы алгоритма Гровера, а также рассмотрели конкретный пример. Настало время написать для этого примера программу.

Для начала импортируем все необходимые библиотеки и создадим схему из трех кубитов:

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np

dev = qml.device('default.qubit', shots=1, wires=3)
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Начальная функция, создающая суперпозицию для каждого кубита:

```
def U_start():
    qml.PauliX(wires=2)
    for i in range(3):
        qml.Hadamard(wires=i)
```

Создадим функцию, действующую аналогично оракулу (первая часть итерации). Эта функция помечает значение индекса 11:

```
def U_b():
    qml.Toffoli(wires=[0, 1, 2])
```

Вторая часть итерации:

```
def U_c():
    for i in range(2):
        qml.Hadamard(wires=i)
        qml.PauliX(wires=i)

    qml.Toffoli(wires=[0, 1, 2])
    for i in range(2):
        qml.PauliX(wires=i)
        qml.Hadamard(wires=i)
```

Объединим первую и вторую часть итерации в одну функцию:

```
def U_iteration():
    U_b()
    U_c()
```

Переходим к итоговой функции, содержащей все шаги, а также производящей измерение кубитов в конце. В аргументе N мы должны будем указать количество итераций:

```
@qml.qnode(dev)
def circuit(N: int):
    U_start()
    for t in range(N):
        U_iteration()
    return qml.probs(wires=[0, 1])
```

Запускаем функцию и выведем ее результат:

```
print(circuit(N=1))
```

```
[0. 0. 0. 1.]
```

Так как в качестве искомого индекса выступало значение 11, то в результате запуска функции мы должны получить массив, состоящий из вероятностей каждого индекса, в котором искомый индекс (в нашем примере он будет последним в массиве) должен иметь наибольшую вероятность. Параметр устройства `shots` при

необходимости можно увеличивать, не забывая о том, что его увеличение будет кратно замедлять алгоритм. Таким образом, мы нашли с помощью алгоритма Гровера искомый индекс.

Алгоритм Гровера может применяться не только для задач простого поиска в базе данных, но и как дополнительное средство ускорения для поиска экстремума целочисленной функции, а также для поиска совпадающих строк в базе данных, так что этот алгоритм, как и его модификации, сможет быть полезным в разнообразных задачах Data Science.

25.2 Задание

1. Распишите операторы U_{1b} и U_{1c} из примера в виде матриц 4×4 и проведите расчеты для получения c_{1b} и c_{1c} в виде векторов-столбцов.
2. Модифицируйте приведенный выше код алгоритма Гровера для двухкубитной базы данных так, чтобы искомый индекс соответствовал состоянию $|00\rangle$.

АЛГОРИТМ САЙМОНА

Автор(ы):

- Решетова Карина
- Токарев Игорь
- Сендерович Леонид

26.1 Задача Саймона

Давайте начнём с того, что алгоритм Саймона решает задачу Саймона. Да, вот такой замечательный учёный - нашёл проблему, решил проблему.

По своей природе задача Саймона является разновидностью задачи о скрытой абелевой подгруппе [Lom04].

Пусть задана функция $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ и **неизвестная** строка $s \in \{0, 1\}^n$, для всех $x, y \in \{0, 1\}^n$ выполняется:

$$f(x) = f(y) \Leftrightarrow x \oplus y = s$$

То есть, если мы для двух различных строк x и y имеем одинаковое значение $f(x) = f(y)$, то $x \oplus y$ равняется некоторой неизвестной строке s . Функция $f(x)$ представляет собой чёрный ящик.

Задача состоит в том, чтобы **найти s , выполнив при этом как можно меньшее количество вызовов $f(x)$**

26.2 Описание алгоритма

Сразу определим операцию на двух бинарных строках (они же бинарные векторы) $x = x_0x_1x_2\dots x_{2^n-1}$, $z = z_1z_2z_3\dots z_{2^n-1}$:

$$\langle x, z \rangle = \bigoplus_{i=0}^{2^n-1} x_i \wedge z_i = x_0 \wedge z_0 \oplus x_1 \wedge z_1 \oplus \dots \oplus x_{2^n-1} \wedge z_{2^n-1}$$

Принципиальная схема алгоритма Саймона:

В принципе, есть небольшие вариации в реализации алгоритма, мы рассмотрим наиболее простую (все необходимые ссылки в конце приведены):

1. Сначала приготовления. Вначале мы приготовим 2 набора квантовых регистров (каждый размерности n) в следующем состоянии:

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle|0\rangle$$



2. Применяем гейты Адамара на первом регистре:

$$(H^n \otimes I^n)|\psi_0\rangle = (H^n \otimes I^n)|0\rangle|0\rangle = |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle|0\rangle$$

3. Применяем оператор U_f , который выполняет следующее преобразование $U_f(|x\rangle|0\rangle) = |x\rangle|f(x)\rangle$, т.е. во второй регистр записывается значение функции $f(x)$:

$$U_f(|\psi_1\rangle) = U_f\left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle|0\rangle\right) = |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle|f(x)\rangle$$

4. Производим измерение на втором регистре. Измеренное значение будет соответствовать либо x либо $y = x \oplus s$. А первый регистр примет значение:

$$|\psi\rangle_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle_1 + |y\rangle_1)$$

5. Снова применяем гейты Адамара на первом регистре:

$$(H^n \otimes I^n)|\psi_2\rangle = |\psi_3\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} (-1^{\langle x, z \rangle} + -1^{\langle y, z \rangle})|z\rangle,$$

(операцию $\langle x, z \rangle$ мы уже определяли выше).

Note: Для чисел $x = 110111$ и $z = 010101$ получим

$$\langle x, z \rangle = 1 \wedge 0 \oplus 1 \wedge 1 \oplus 0 \wedge 0 \oplus 1 \wedge 1 \oplus 1 \wedge 0 \oplus 1 \wedge 1 = 1$$

$$(-1)^1 = -1$$

6. Производим измерение на первом регистре. И здесь возможны 2 варианта исхода:

1. $x \oplus y = s = 0^n$

Учитывая $x \oplus y = 0^n$ и то, что состояние всей системы описывается как

$$\sum_{z \in \{0,1\}^n} |z\rangle \otimes \frac{1}{2^n} \sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1^{\langle x,z \rangle}) |f(x)\rangle$$

находим вероятность получить строку z на первом регистре

$$p_z = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle z,x \rangle} |f(x)\rangle) \right\|^2 = \frac{1}{2^n}$$

т.е. в данном случае имеет место **равномерное распределение**.

2. $x \oplus y = s \neq 0^n$

Этот случай гораздо интереснее. Функция f преобразует два различных входных значения $x_1, x_2 \in \{0,1\}^n$ в одно $f(x_1) = f(x_2) = s \in \{0,1\}^n$. Также $x_1 \oplus x_2 = s$ эквивалентно $x_1 \oplus s = x_2$.

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{(-1)^{\langle z,x \rangle} (1 + (-1)^{\langle z,s \rangle})}{2} |z\rangle \oplus |f(x)\rangle =$$

$$\frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} |z\rangle \otimes \sum_{x \in \{0,1\}^n} \frac{(-1)^{\langle z,x \rangle} (1 + (-1)^{\langle z,s \rangle})}{2} |f(x)\rangle$$

$$\begin{aligned} p_z &= \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{x \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle x,z \rangle} |f(x)\rangle) \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{z \in A} (((-1)^{\langle x_1,z \rangle} + (-1)^{\langle x_2,z \rangle}) |z\rangle) \right\|^2 \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2^{n-1}}, & \text{если } \langle z, s \rangle = 0 \\ 0, & \text{если } \langle z, s \rangle = 1 \end{cases} \end{aligned}$$

Расчёты вероятностей можно найти в приложениях [Приложение 1](#).

Выполняем алгоритм n раз. После чего у нас будет система n линейно независимых уравнений. Теперь приступаем к вычислению строки s .

7. Постобработка.

Итак, для того, чтобы найти $s = (s_0, s_1, s_2, \dots, s_{n-1})^T$, нам потребуется n линейно независимых векторов \vec{z}_i , для которых выполняется $\langle \vec{z}_i, s \rangle = 0$.

После того как получена система из n линейно независимых уравнений, решение можно найти методом Гаусса.

26.3 Пример

Давайте возьмём $n = 3$, строку $s = 100$, и функцию f , которая соответствует критерию

$$f(x) = f(y) \Leftrightarrow x \oplus s = y$$

Обычно функция $f(x)$ задана наперёд. Ну а мы выберем её простейшей: $f(x) = x \oplus s$.

Давайте посмотрим на таблицу истинности всех нужных переменных.

x	$x \oplus s$	$f(x)$
000	100	000
001	101	001
010	110	010
011	111	011
100	000	000
101	001	001
110	010	010
111	011	011

Нарисуем схему на Qiskit, которая будет показывать одну итерацию алгоритма:

```
from qiskit import QuantumCircuit, ClassicalRegister, QuantumRegister

# Работаем в пространстве размерности n = 3
n = 3

# Создаём необходимые регистры
qr1 = QuantumRegister(n, name="q1")
qr2 = QuantumRegister(n, name="q2")
cr1 = ClassicalRegister(n, name="c1")

# Шаг 1. Создаём квантовую схему (инициализация состояния)
qc = QuantumCircuit(qr1, qr2, cr1)

# Шаг 2. Применяем гейт Адамара ко всем кубитам первого регистра
qc.h(range(n))

# Шаг 3. Применяем U_f
qc.cx(qr1[0], qr2[0])

# Шаг 4. Производим измерение второго регистра
qc.measure(qr2, cr1)

# Шаг 5. Ещё раз применяем гейт адамара к каждому из кубитов
qc.h(range(n))

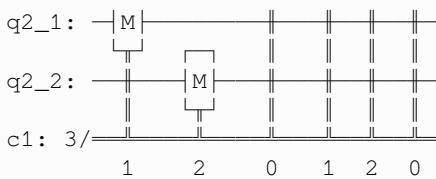
# Шаг 6. Производим измерение первого регистра
qc.measure(qr1, cr1)

# Рисуем схему
qc.draw()
```



(continues on next page)

(continued from previous page)



При использовании PennyLane схема выглядит следующим образом:

```

import pennylane as qml
import matplotlib.pyplot as plt
from typing import Tuple, List

n = 3

dev = qml.device("default.qubit", shots=128, wires=n*2)

def simon_start(N: int) -> None:
    for i in range(N):
        qml.Hadamard(wires=i)

def simon_oracle(N: int) -> None:
    qml.CNOT(wires=[0, N])

def simon_after_oracle(N: int) -> None:
    for i in range(N):
        qml.Hadamard(wires=i)

@qml.qnode(dev)
def simon_circuit(N: int) -> Tuple[List[List[int]], List[List[int]]]:
    simon_start(N)
    simon_oracle(N)
    simon_after_oracle(N)

    wx = range(0, N)
    wfx = range(N, N*2)

    return qml.sample(wires=wx), qml.sample(wires=wfx)

# Схема возвращает массив результатов измерений первого
# регистра: x, и массив результатов измерения 2-го регистра: f(x).
# количество измерений (samples) задано через shots
x, fx = simon_circuit(N=n)

fig, ax = qml.draw_mpl(simon_circuit)(N=n)
fig.show()
  
```

```

/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
  _hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
  warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
  
```



Note: Созданная с помощью PennyLane схема визуально отличается от полученной с помощью Qiskit, так как PennyLane не позволяет выполнять операции с кубитами после выполнения измерения. Но так как с кубитами Y ([3, 4, 5]) после операции измерения не должно выполняться никаких действий, результат получается тот же самый.

Теперь пройдём по всем шагам алгоритма:

- Инициализация всех регистров в 0 состоянии:

$$|\psi_0\rangle = |000\rangle_1|000\rangle_2$$

- Применяем Адамар к первому регистру:

$$(H^n \otimes I)(|\psi_0\rangle) = |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle + |011\rangle + |100\rangle + |101\rangle + |110\rangle + |111\rangle)_1|000\rangle_2)$$

- Применяем оракул U_f :

$$U_f(|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle =$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{8}}(|000\rangle_1|0 \oplus 0, 0, 0\rangle_2 \\ & + |001\rangle_1|0 \oplus 0, 0, 0\rangle_2 \\ & + |010\rangle_1|0 \oplus 0, 0, 0\rangle_2 \\ & + |011\rangle_1|0 \oplus 0, 0, 0\rangle_2 \\ & + |100\rangle_1|0 \oplus 1, 0, 0\rangle_2 \\ & + |101\rangle_1|0 \oplus 1, 0, 0\rangle_2 \\ & + |110\rangle_1|0 \oplus 1, 0, 0\rangle_2 \\ & + |111\rangle_1|0 \oplus 1, 0, 0\rangle_2) \end{aligned}$$

- Измеряем второй регистр. С вероятностью $\frac{1}{2}$ мы получим либо значение $|000\rangle$ либо $|100\rangle$. Допустим результат равен $|100\rangle$. Тогда состояние первого регистра примет вид: $|\psi_3\rangle = (|100\rangle_1 + |101\rangle_1 + |110\rangle_1 + |111\rangle_1)$.

- Ещё один раз применяем гейты Адамара на первый регистр:

$$\begin{aligned} |\psi_4\rangle = & \frac{1}{4}[(& |0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)) \\ & + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle)) \\ & + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle)) \\ & + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle))] \end{aligned}$$

- Производим измерение первого регистра, записывая результат.

Выполняем шаги 1-6 n раз.

- Здесь решаем систему уравнений.

26.4 Приложение

- Расчёт вероятностей.

1. Случай, когда $x \oplus z = 0^n$:

$$\sum_{z \in \{0,1\}^n} |z\rangle \otimes \left(\frac{1}{2^n} \sum_{x \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle x,z \rangle} |f(x)\rangle) \right)$$

Вероятность получить какую-либо из 2^n строк одинакова:

$$p_z = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle z,x \rangle} |f(x)\rangle) \right\|^2 = \frac{1}{2^n}$$

Утверждение, данное выше, следует из того, что $f(x)$ отличается от x лишь порядком во всём множестве строк $\{0,1\}^n$:

$$\left\| \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle z,x \rangle} |f(x)\rangle) \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} ((-1)^{\langle z,x \rangle} |x\rangle) \right\|^2$$

2. Случай, когда $x \oplus z = s \neq 0^n$:

Определим $A = f(\{0,1\}^n)$ - образ функции f , $f(x_i) = \ell \in A$ - т.е. это какое-то значение функции f . Здесь у нас имеются два таких значения $x_1 \in \{0,1\}^n$, $x_2 \in \{0,1\}^n$, что для них выполняется $x_2 = s \oplus x_1$.

$$p_z = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{\ell \in A} (((-1)^{\langle z,x_1 \rangle} + (-1)^{\langle z,x_2 \rangle}) |\ell\rangle) \right\|^2 = \frac{1}{2^n}$$

Перепишем коэффициенты $(-1)^{\langle x_1, z \rangle} + (-1)^{\langle x_2, z \rangle}$:

$$(-1)^{\langle x_1, z \rangle} + (-1)^{\langle x_2, z \rangle} = (-1)^{\langle x_1, z \rangle} + (-1)^{\langle x_2 \oplus s, z \rangle}$$

Также, заметим, что выполняется $\langle x_1 \oplus s, z \rangle = \langle x_1, z \rangle \oplus \langle x_2, z \rangle$, тогда ещё раз перепишем:

$$(-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 + (-1)^{\langle z, s \rangle})$$

И собирая все полученные условия:

$$p_z = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{\ell \in A} ((-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 + (-1)^{\langle z, s \rangle}) |\ell\rangle) \right\|^2 = \frac{1}{2^n}$$

Если $\langle z, s \rangle = 1$, то $(-1)^{\langle z, s \rangle} = -1$ и следовательно

$$(-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 + (-1)^{\langle z, s \rangle}) = (-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 - 1) = 0$$

И вероятность в таком случае равняется 0

$$p_z = \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{\ell \in A} ((-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 + (-1)^{\langle z, s \rangle}) |\ell\rangle) \right\|^2 = 0$$

Иначе $\langle z, s \rangle = 0$, и тогда $(-1)^{\langle z, s \rangle} = 1$:

$$(-1)^{\langle x_1, z \rangle} (1 + (-1)^{\langle z, s \rangle}) = 2(-1)^{\langle x_1, z \rangle}$$

Вычисление вероятности

$$\begin{aligned}
 p_z &= \left\| \frac{1}{2^n} \sum_{\ell \in A} (-1)^{\langle x_1, z \rangle} 2|\ell\rangle \right\|^2 = \\
 \left\| \frac{2}{2^n} \sum_{\ell \in A} (-1)^{\langle x_1, z \rangle} |\ell\rangle \right\|^2 &= \left\| \frac{2}{2^n} \sum_{\ell \in A} (-1)^{\langle x_1, z \rangle} |\ell\rangle \right\|^2 = \left\| \frac{1}{2^{n-1}} \sum_{\ell \in A} (-1)^{\langle x_1, z \rangle} |\ell\rangle \right\|^2 \\
 p_z &= \begin{cases} \frac{1}{2^{n-1}}, & \text{если } \langle z, s \rangle = 0 \\ 0, & \text{если } \langle z, s \rangle = 1 \end{cases}
 \end{aligned}$$

26.5 Ссылки

- Simon Algorithm
- Simon's problem
- Qiskit Simon algorithm

Part VIII

Железо квантовых компьютеров

CHAPTER
TWENTYSEVEN

О БЛОКЕ “ЖЕЛЕЗО КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ”

Этот блок включает в себя обзор различных подходов к физической реализации квантовых вычислений. Как и классические компьютеры, квантовые компьютеры вовсе не обязаны быть основаны на какой-то одном физическом принципе работы: информация может храниться в токах и напряжениях в электрической схеме, спинах атомов, механическом положении или движении микроскопических частиц. Квантовая механика проявляется для любых достаточно малых систем. В качестве критерия малости можно использовать постоянную Планка \hbar , которая имеет размерность фазового объема, или произведения координаты на импульс; это отражается и в принципе неопределенность Гейзенберга. Это значит, что если мы имеем систему, работающей на частоте ω , разность энергий уровней, в которых хранится информация, скорее всего будет порядка $\hbar\omega$. Из-за того, что $\hbar \sim 1.054 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ – очень маленькое число, два квантовых состояния очень слабо отличаются друг от друга.

Из-за того, что все платформы для квантовых вычислений очень разные, делать конкретные утверждения про все сразу практически невозможно. В этом блоке будет дана обзорная классификация разных платформ по разным признакам со ссылками на оригинальные работы, а затем более подробная лекция про сверхпроводниковые кубиты.

ОБЗОР И КЛАССИФИКАЦИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПЛАТФОРМ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Автор(ы):

- Беседин Илья

28.1 Радиочастотные и оптические кубиты

Первый признак, по которому можно классифицировать разные кубиты, это характер тех двух квантовых состояний, в которых хранится информация. Рассмотрим, например, фрагмент структуры уровней для иона Yb-171+ [Mon]. Этот ион часто используют для квантовых вычислений.

На сегодняшнем этапе все платформы для квантовых вычислений можно разделить на два класса: те, которые работают со сравнительно низкими $\omega/2\pi \sim 10^5 \dots 10^{10}$ Hz частотами (вплоть до микроволновых), и те, которые работают на высоких частотах $\omega/2\pi \sim 10^{13} \dots 10^{15}$ Hz. К первым относятся:

- сверхпроводниковые квантовые схемы;
- кубиты на тонком и сверхтонком расщеплении в нейтральных атомах;
- кубиты на сверхтонком расщеплении в ионах;
- кубиты спинах в квантовых точках;
- кубиты на экзотических квазичастицах, вроде Майорановских фермионов.

К второй группе относятся:

- оптические и телекоммуникационные фотонах;
- кубиты на оптических переходах в атомах и ионах.

Квантовые компьютеры первого типа надо сильно охлаждать, так как они самовозбуждаются под действием броуновского движения и теплового излучения тел, находящихся при комнатной температуре.

$^{171}\text{Yb}^+$ spin manipulation



Fig. 28.1: Фрагмент структуры энергетических уровней иона Yb-171+. У типичного атома очень много степеней свободы: спин ядра, спин электронной подсистемы, радиус орбитали электрона и проекция момента орбитали электрона. Переходы между состояниями имеют очень разные частоты, времена когерентности и восприимчивости к частотам к внешним полям. Чтобы сделать из иона кубит, надо определиться, какой уровень будет “0”, а какой – “1”.

28.2 Природа степени свободы для кодирования информации

Можно классифицировать популярные платформы для квантовых вычислений и по другим признакам. Например, есть кубиты на естественных степенях свободы и кубиты на коллективных степенях свободы.

Естественные степени свободы – это:

- любые переходы в уединенных атомах и ионах;
- фотоны в открытом пространстве.

Кубиты на естественных степенях свободы автоматически получаются одинаковыми: вы берете одинаковые атомы, и у них обязательно будут одинаковые переходы. Впрочем, если поместить их в какую-нибудь ловушку, то из-за того, что ловушки немного влияют на частоты переходов в атомах, эту эквивалентность легко испортить.



Fig. 28.2: Фотография уединенного атома в ловушке. Источник: [ion]

Кубиты на искусственных степенях свободы получаются когда имеет место коллективная динамика большого числа частиц, например поляризация в материала оптоволокна, или коллективное движение электронов в сверхпроводнике. Примеры искусственных степеней свободы:

- сверхпроводниковые электрические цепи;
- фотоны в интегрально-оптической схеме;
- фотоны в оптоволокне;

- спины в квантовых точках;
- любые квазичастицы в твердотельных системах.



Fig. 28.3: Изображение кремниевой микросхемой с кубитом на квантовой точке. Источник: [SZK+18]

На самом деле граница между естественными степенями свободы и искусственными вовсе не такая очевидная, как может показаться на первый взгляд. Так, например, фотон, находящийся в открытом пространстве, можно поместить между двумя зеркалами, которые образуют резонатор. Но в таком случае в зеркалах, и в носителях заряда в зеркале будет храниться часть энергии фотона – получается так называемый “поляритон”, который уже не совсем естественная степень свободы. Абсолютно тождественными могут быть только те носители информации, которые ни с чем не связаны.

28.3 Способ кодирования информации

Только системы, где есть всего два уровня, а больше никакие не используются и не учитываются, строго говоря являются кубитами. Такими являются, например:

- потоковые сверхпроводниковые кубиты;
- логические кубиты, которые получаются выполнением кодов коррекции на большом числе физических кубитов любой природы.

Помимо “чистых” кубитов, у которых есть всего два дискретных состояния, существуют также “кудиты”, которые имеют d ($d > 2$) состояний. Таковыми являются, например:

- ионы со сложной структурой уровней и правилами отбора переходов между ними;
- сверхпроводниковые кубиты-трансмопны;
- атомы и ридберговские состояния в них.

Бывают модели квантовых вычислений на непрерывных степенях свободы, например:

- оптические вычисления на непрерывных переменных;
- колебательное движение ионов в радиочастотных ловушках;
- состояния микроволнового поля в сверхпроводниковых резонаторах.

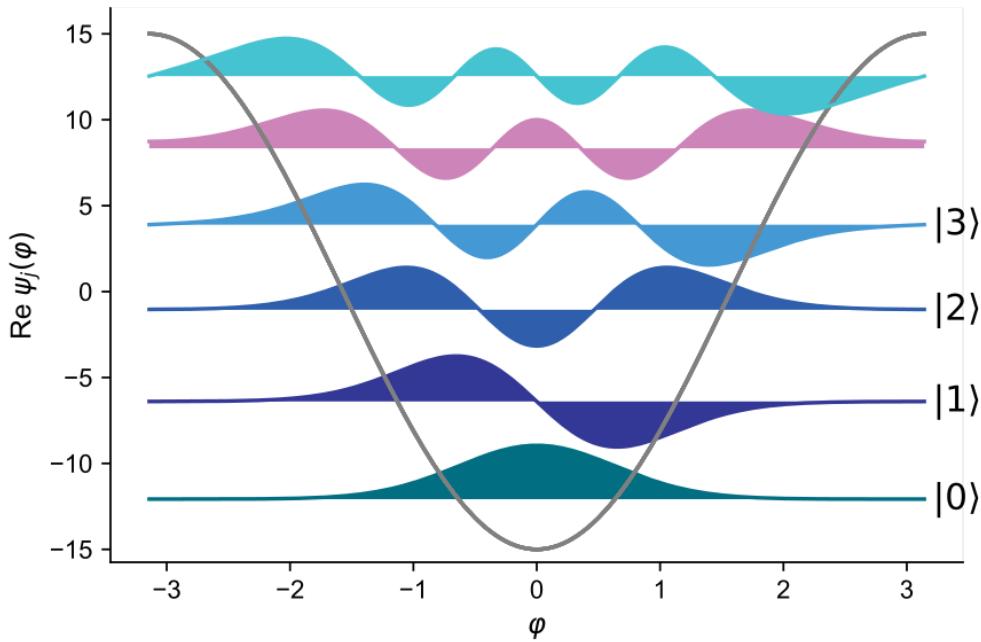


Fig. 28.4: Потенциал и уровни энергии в сверхпроводниковом кубите-трансмоне. Построено с помощью scqubits [GK21]. Как правило используются нижние два уровня, однако и остальные уровни можно использовать для алгоритмов

28.4 Способ выполнения операций

Модели вычислений в квантовых компьютерах можно классифицировать по признаку способа реализации операций в них. Самый простой и очевидный способ – воздействие на кубит (кубит, непрерывную переменную) при помощи короткого аналогового сигнала на резонансной частоте этой системы, причем амплитуда и фаза этого сигнала будут определять унитарную матрицу операции. Так работают

- сверхпроводниковые кубиты-трансмоны и потоковые кубиты;
- кубиты на ионах в радиочастотных ловушках;
- кубиты на нейтральных атомах в дипольных ловушках.

Бывают вычислительные модели, в которых вместо временной последовательности управляющих сигналов носитель информации движется по “конвейеру”, вдоль которого с ним выполняются операции. Так работают, например, вычисления на:

- фотонах в интегральной оптике;
- фотонах в открытом пространстве.

Некоторые модели вычислений вовсе не предполагают выполнения каких-то изолированных операций. Впрочем, для таких моделей вычислений и не выполняется большинство утверждений и теоретических предсказаний, связанных с квантовыми вычислениями. Таковыми моделями является, например, **квантовый аннилиер D-Wave**. Важно отметить, что классические компьютеры работают совсем иначе, чем все вышеперечисленные квантовые компьютеры. В них операции осуществляются цифровыми сигналами, то есть от непосредственного значения уровня сигнала слабо зависит то, какая операция будет выполнена, главное, чтобы сигнал вовремя превысил некоторое пороговое значение. Цифровой характер классических компьютеров имеет



Fig. 28.5: Схема квантового компьютера на ионах. Источник: [WBD+19]. Кубиты расположены рядом друг с другом в вакуумной камере, а управляющие сигналы представляют собой лазерные лучи, направленные на каждый ион. Для однокубитных и двухкубитных операций используют разные лазеры, для считывания – еще лазер. Рассеянное на ионе излучение последнего лазера детектируется, чтобы определить состояние кубита. Похожим образом работают и кубиты на нейтральных атомах (там есть дополнительный оптический пинцет), и сверхпроводниковые кубиты (там вместо лазеров используются микроволновые кабели).

очень важное значение для масштабирования алгоритмов, ведь именно он обеспечивает воспроизводимость и возможность безошибочной работы квантового компьютера. К моделям квантовых вычислений, нечувствительным к аналоговым ошибкам управляющих сигналов, или с пониженной чувствительностью к ним, можно отнести:

- кубиты на майорановских фермионах;
- логические кубиты, которые получаются в результате работы алгоритмов квантовой коррекции ошибок на физических кубитах любой природы;
- сверхпроводниковые 0-пи кубиты, при условии, что гейты будут производиться специальным помехозащищенным образом, а не через промежуточные уровни.

28.5 Наборы инструкций и универсальность

Разные модели вычислений дают разные наборы инструкций для реализации квантовых алгоритмов. В зависимости от вероятности успешной реализации инструкций (квантовые компьютеры делают ошибки!) эти модели вычислений могут быть ближе, либо дальше от создания универсального масштабируемого квантового компьютера. По этому признаку:

- сверхпроводниковые кубиты;
- нейтральные атомы;
- ионы в радиочастотных ловушках

являются самыми очевидными. Набор инструкций в них содержит однокубитные и двухкубитные операции,

инициализацию кубита в определенном состоянии и считывание. Чем выше точность операций – тем лучше, и все операции на сегодняшний день продемонстрированы с вероятностью положительного исхода выше 99% – этого все еще мало для многих применений, но это уже что-то.

Для вычислений на линейнооптических схемах используются источники единичных эквивалентных фотонов, либо источники запутанных фотонов, либо источники сжатого света. Вероятность успеха операции по созданию такого излучения (либо степень сжатия света) на сегодняшний день сильно далека от того, что нужно для универсальности квантовых вычислений; здесь идет речь о сжатии порядка 10 дБ (грубо переводя на язык “успешного выполнения операции” 0,9), и вероятности испускания фотона 0,9. Однако отсутствие универсальности не означает, что линейнооптические схемы должны быть для всех задач вычислительно слабее, чем другие платформы: напротив, самое сильное квантовое превосходство на сегодняшний день достигнуто именно на таких устройствах.

Причина, по которой линейнооптические системы выделяются среди других заключается в том, что для полноценного компьютера (что классического, что квантового) нужны нелинейные элементы. В классическом компьютере это транзисторы. На одних линейных индуктивностях и емкостях можно, в зависимости от способа кодирования информации, выполнять какой-то набор операций, но универсальным он не будет, потому что функция отклика линейной цепи является линейным. Алгоритмы, которые не сводятся к умножению матрицы на вектор в некотором представлении данных, на линейной системе выполнить не получится. Чтобы обойти это ограничение, линейно-оптические системы для квантовых вычислений принимают на часть своих входов, в дополнение к входным данным, сложные неклассические сигналы, а на выходе производится считывание числа фотонов, которое является квадратичным по отношению к амплитудам сигналов. Дополнение линейной оптики наборами нелинейных операций может сделать такие модели вычислений универсальными.

Наконец, кубиты с дискретными операциями, такие как логические кубиты и кубиты на майорановских фермионах, сами по себе не дают полный набор квантовых логических операций – в дополнение к ним нужны обычные кубиты. Впрочем, задача построения кубита на майорановских фермионах или на коррекции ошибок сама по себе настолько сложная, что необходимость связать с ним обычные дополнительные кубиты не кажется такой сложной.

28.6 Успехи в практической реализации

Платформы для квантовых вычислений можно отсортировать по максимальному размеру гильбертова пространства и точности операций (не только унитарных гейтов, но и считыванию и инициализации), которое удавалось реализовать экспериментально. В этом рейтинге только три верхние платформы находятся относительно близко к режиму квантового превосходства в подтвержденных экспериментальных работах. Итак, рейтинг:

- линейная оптика (фотоны) в открытом пространстве;
- сверхпроводниковые кубиты-трансмоны;
- ионы в линейных радиочастотных ловушках;
- интегральнооптические фотоны;
- нейтральные атомы в дипольных ловушках;
- спины в квантовых точках.

Другие платформы существуют на сегодняшний день в лучшем случае в виде двухкубитной системы, чаще – одного кубита, а лучше вообще в виде теоретической концепции – которая может оказаться вовсе нереализуемой на практике.



Fig. 28.6: Принципиальная схема работы оптического квантового чипа Xanadu. Взято из работы [ABBradler+21]. а – квантовый алгоритм, выполняемый схемой: 1) сжатие света до 8 модах и создание запутанности (формирование двухмодового сжатого состояния света, эквивалент однокубитных гейтов), 2) программируемые двухкубитные гейты в каждом четырехмодовом подпространстве, 3) считывание всех 8 мод в фоковском базисе; б – изображение чипа, на котором видны основные модули; в – схема управляющих сигналов и приборов; д – фотография всей системы (кроме управления детектором фотонов) в серверной стойке.

СВЕРХПРОВОДНИКОВЫЕ КУБИТЫ

Автор(ы):

- Беседин Илья

Сверхпроводниковые кубиты относятся к наиболее успешным типам кубитов для квантовых вычислений и симуляции на сегодняшний день. Google впервые продемонстрировала квантовое превосходство на квантовом процессоре из 53 сверхпроводниковых кубитов-трансмонов [AAB+19]. Кроме Google, сверхпроводниковые кубиты используют IBM (в том числе для своего открытого облачного проекта IBM Quantum Experience), Rigetti Computing и другие крупные фирмы и лаборатории по всему миру.

Квантовый процессор на сверхпроводниковых кубитах – это электрическая цепь. Этую электрическую цепь можно изобразить в схемы с квазисосредоточенными элементами.

29.1 Квантование электрических цепей

Электрические цепи, как и любые другие физические объекты, могут быть описаны с помощью законов квантовой механики [VD17]. Для этого следует начать с гамильтонового описания, например с помощью функции Лагранжа. Энергия всей физической системы (электрической цепи) должна быть записана в виде суммы энергий, накопленных ее составными частями (сосредоточенных элементов), выраженной через динамические переменные системы и их производные. Самые простые электрические элементы, такие как конденсаторы и индукторы, запасают энергию E_C и E_L в электрическом и магнитном поле, а выражение для них можно записать либо через заряд на обкладках Q и поток через кольцо Φ , либо через напряжение V и ток I , соответственно:

$$E_C = \frac{Q^2}{2C} = \frac{CV^2}{2},$$
$$E_L = \frac{\Phi^2}{2L} = \frac{LI^2}{2}.$$

Для третьего самого простого линейного элемента электрической цепи, резистора, так сделать не получится. Резистор не накапливает в себе энергию, он ее диссирирует. Диссипативные системы не могут быть описаны исключительно при помощи функции Лагранжа. Это не значит, что резистор совершенно невозможно адекватно описать в гамильтоновом формализме: он может быть представлен как бесконечный резервуар энергии, так как с точки зрения остальной цепи не слишком важно, осталась ли энергия в резисторе или она была рассеяна, если она никогда больше не вернется в остальные элементы цепи. Резисторы не слишком полезны в квантовой обработке информации, так как любые потери энергии приводят к неунитарной эволюции, потере когерентности и в конечном счете – ошибкам вентилей.

В электротехнике, как правило, используются переменные V и I : напряжение и ток можно померить, правильно подключив измерительные приборы к проводникам цепи, в то время как измерения Q и Φ затруднены, так как заряды и потоки локализованы внутри элементов. Но V и I не подходят в качестве переменных, от которых зависит функция Лагранжа, так как ни одна из них не является производной другой. Зато из закона сохранения



Fig. 29.1: Фотографии, изображения со сканирующего электронного микроскопа и эквивалентная электрическая схема микросхемы сверхпроводникового квантового процессора с двумя кубитами-трансмонами. Синим отмечен электрод одного из трансмонов. Микросхема была изготовлена в НОЦ ФМН в МГТУ им. Баумана, технология разработана в НИТУ МИСиС.

заряда следует, что $\dot{Q} = -I$, а закон индукции Фарадея говорит, что $\dot{\Phi} = V$, а значит и Φ , и Q могут быть использованы в качестве динамических переменных системы.



Fig. 29.2: Электрические схемы одного LC-контура и двух емкостно связанных LC-контуров.

В случае одной степени свободы определения для величин Q , Φ , V и I однозначны. В более сложных случаях в классической электротехнике принято использовать метод контурных токов, либо узловых напряжений. Рассмотрим метод узловых напряжений. Для лагранжевого описания введем узловой поток $\Phi_i(t)$ как первообразную напряжения на узле с номером i $V_i(t)$:

$$\Phi_i(t) = \int_0^t V_i(t) dt.$$

Функция Лагранжа LC-контура имеет вид

$$L(\Phi_1, \dot{\Phi}_1) = \frac{C\dot{\Phi}_1^2}{2} - \frac{\Phi_1^2}{2L}.$$

Канонически сопряженный импульс Q_i к обобщенной переменной Φ_i можно найти по формуле

$$Q_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}_i} = C\dot{\Phi}_i.$$

Физический смысл этого импульса – сумма зарядов на конденсаторах, примыкающих к узлу i , или узловой заряд.

Функция Гамильтона $H(\Phi_i, Q_i)$ представляет собой преобразование Лежандра от функции Лагранжа по парам $(\dot{\Phi}_i, Q_i)$, то есть

$$H(\Phi_i, Q_i) = \dot{\Phi}_i \dot{Q}_i - L = \frac{Q_i^2}{2C} + \frac{\Phi_i^2}{2L}.$$

Оператор Гамильтона может быть получен из функции Гамильтона заменой переменных Φ_1, Q_1 на соответствующие операторы:

$$H = \frac{\hat{Q}_1^2}{2C} + \frac{\hat{\Phi}_1^2}{2L}.$$

Здесь $[\hat{Q}_1, \hat{\Phi}_1] = -i\hbar$ в силу того, что Φ_1 и Q_1 – каноническая переменная и сопряженный к ней импульс. Волновая функция системы может быть записана в потоковом $\psi_\Phi(\Phi_1)$ или зарядовом $\psi_Q(Q_1)$ представлении. Переход от одного представления к другому, как в случае обыкновенных координат и импульсов, может быть произведен с помощью преобразования Фурье

$$\psi_\Phi(\Phi_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{i\Phi_1 Q_1} \psi_Q(Q_1, Q_2) dQ_1.$$

Как и в случае механических осцилляторов, для LC-осцилляторов очень полезен формализм операторов вторичного квантования \hat{a} и \hat{a}^\dagger , которые можно определить как

$$\hat{Q}_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{2Z}}(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger),$$

$$\hat{\Phi}_1 = i\sqrt{\frac{\hbar Z}{2}}(\hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger),$$

где $Z = \sqrt{L_1/C_1}$ – импеданс осциллятора. В этом формализме гамильтониан системы принимает вид

$$\hat{H} = \hbar\omega_1(\hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \frac{1}{2}),$$

где $\omega_1 = (L_1C_1)^{-1/2}$ – частота осциллятора.

29.2 Джозефсоновский контакт

Линейные электрические элементы, такие как емкости и индуктивности, очень полезны при создании электронных приборов. Но из линейных элементов можно создать только линейную электрическую цепь. Это означает, что любые выходные сигналы $V_i^{\text{out}}(\omega)$ выражаются через входные сигналы $V_j^{\text{in}}(\omega)$ с помощью линейного преобразования

$$V_i^{\text{out}}(\omega) = \sum_j S_{ij}(\omega) V_j^{\text{in}}(\omega).$$

Это выражение остается справедливым и для квантового случая, где величина $V_i^{\text{out}}(\omega)$ является оператором. $S_{ij}(\omega)$ – это передаточная функция, или S-параметр системы. Для линейной системы S-параметр зависит лишь от частоты сигнала, но не зависит от состояния системы. По существу линейные системы не обладают состоянием, т.е. не могут играть роль памяти. В частности, такие системы не могут эффективно симулировать машину Тьюринга и тем более квантовую машину Тьюринга. Они могут реализовывать некоторое линейное преобразование над входными данными, однако это линейное преобразование жестко задано топологией и номиналами емкостей и индуктивностей цепи.

Для того, чтобы создать архитектуру компьютера, в которой есть память или управление, нужны нелинейные элементы. В классической электронике в качестве нелинейного элемента чаще всего используют транзистор. Наиболее популярный в интегральных микросхемах – это полевой транзистор. Полевой транзистор имеет три контакта, причем напряжение между затвором и стоком управляет сопротивлением между стоком и истоком. Для квантовой обработки информации управление сопротивлением – не самый practicalный вариант, в связи с тем, что протекание тока через конечные сопротивления приводит к ошибкам квантовых вентилей.

В качестве альтернативы полупроводниковым нелинейным элементам вроде транзистора и диода можно использовать сверхпроводниковые нелинейные элементы. Одним из таких элементов является джозефсоновский контакт сверхпроводник-изолятор-сверхпроводник (Superconductor-insulator-superconductor, SIS).

Для гамильтонового описания джозефсоновского контакта как элемента электрической цепи используется джозефсонская энергия, которая определяется соотношением

$$E_J = \frac{I_c \Phi_0}{2\pi}(1 - \cos \phi),$$

где I_c – критический ток контакта, $\Phi_0 = h/2e$ – квант магнитного потока в сверхпроводнике, $\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$ – обезразмеренная на квант потока разность узловых потоков на берегах контакта. Эта величина одновременно является фазой конденсата куперовских пар в сверхпроводнике. Для понимания принципов работы сверхпроводниковых кубитов совершенно необходимо понимать физику самой сверхпроводимости,

что такое куперовская пара, что подразумевается под словом конденсат и что значит его фаза. С точки зрения схемотехники кубитов, все знания о физике сверхпроводников могут быть сведены к определению фазы и соотношением для энергии контакта в зависимости от фазы. Эти соотношения однозначно определяют поведение потоков и зарядов в цепи. Мы будем пользоваться фазой вместо узлового потока исключительно из-за того, что эта величина является безразмерной, и это позволит упростить все соотношения. Также заряд будет измеряться в единицах заряда куперовской пары, то есть $2e$.

Дифференцируя соотношение для джозефсоновской энергии по потоку, можно получить выражение для индуктивности джозефсоновского контакта

$$L_J = \frac{1}{\frac{\partial^2 E}{\partial \Phi^2}} = \frac{2\pi\Phi_0^2}{I_c\Phi_0(2\pi)^2 \cos \phi} = \frac{\Phi_0}{I_c 2\pi \cos \phi}.$$

29.3 Трансмон



Fig. 29.3: Электрическая схема трансмона. I_c – критический ток контакта, C_S – шунтирующая емкость, C_J – емкость контакта

Самый простой, и в то же время один самых успешных видов сверхпроводниковых кубитов – это трансмон[KYG+07]. Трансмон представляет собой ангармонический осциллятор на основе наноразмерного джозефсоновского контакта, шунтированного емкостью. Такая цепь хорошо известна в сверхпроводниковой электронике, а ее резонансная частота называется плазменной частотой:

$$\omega_p = \frac{1}{\sqrt{L_J(C_J + C_S)}}.$$

В квантовом случае, свойства этого осциллятора могут зависеть от постоянного напряжения V_g . Наступление квантового режима определяется произведением критического тока и емкости; фактически, в зависимости от этого произведения, такая схема может быть классическим осциллятором, трансмоном или зарядовым кубитом.

Гамильтониан трансмона (а также зарядового кубита) имеет вид

$$\hat{H} = \frac{(2e)^2(\hat{n} - n_g)^2}{2(C_J + C_S)} + \frac{I_c\Phi_0}{2\pi}(1 - \cos \hat{\phi}),$$

где $\hat{n} = \hat{Q}/2e$, $\hat{\phi} = \frac{2e}{\hbar}\hat{\Phi}$ – безразмерные операторы числа и фазы куперовских пар на электроде, а n_g – средний наведенный на острове внешними источниками напряжение заряд. Гамильтониан можно упростить, заменив произведения размерных константы на параметры

$$E_C = \frac{e^2}{2(C_J + C_S)}$$

$$E_J = \frac{I_c\Phi_0}{2\pi},$$

которые называют емкостной и джозефсоновской энергией трансмона, соответственно. В этих обозначениях гамильтониан принимает вид

$$\hat{H} = 4E_C(\hat{n} - n_g)^2 + E_J(1 - \cos \hat{\phi}).$$

Уровни энергии стационарных состояний в такой системе будут зависеть от приложенного напряжения (вернее, от наведенного внешним напряжением V_g зарядом n_g). Однако эта зависимость ослабевает по мере того, как увеличивается соотношение E_J/E_C .



Fig. 29.4: Уровни энергии в зарядовом кубите и в трансмоне

Трансмоном называется режим этой электрической цепи, когда $E_J/E_C \sim 50$; при таком соотношении между константами зависимость от заряда практически отсутствует. Это очень хорошо, потому что наведенный заряд очень сложно контролировать на практике. Космические частицы и события радиоактивного распада в подложке приводят к запиранию зарядов в случайных местах в подложке, из-за чего зарядово-чувствительные кубиты могут менять частоту перехода между уровнями. Уровни энергии в трансмоне не чувствительны к таким воздействиям, что значительно улучшает их времена когерентности по сравнению с зарядовыми кубитами. Обратной стороной такой схемы является невысокий ангармонизм. Ангармонизм δ называется разность частот между переходами $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ и $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$. У трансмона $\delta = -E_C$. По существу, трансмон является слабо ангармоничным осциллятором. Однако расстояния между частотами переходов в трансмоне достаточно большие, чтобы можно было попасть в один переход и при этом не попасть в соседний.



Fig. 29.5: Уровни энергии и волновые функции стационарных состояний трансмона с $E_J/E_C = 50$

29.4 Считывание

Считывание состояния кубита в сверхпроводящих цепях, как правило, осуществляется методом дисперсионного считывания [WSB+05]. В основе дисперсионного считывания состояния сверхпроводниковых кубитов стоит архитектура квантовой электродинамики в электрической цепи, в которой сверхпроводниковый кубит связан с микроволновым резонатором. Концепция квантовой электродинамики в электрической цепи возникла по аналогии с квантовой электродинамикой в полости, где уединенный атом помещается в оптическую полость, которая выступает в роли резонатора. Взаимодействие такого атома с излучением сильно отличается от того, что происходит с таким атомом, помещенным в вакуум: из-за отражений от стенок полости, излучение не может эффективно покинуть атом. Это увеличивает время жизни атома, если резонансная частота полости находится вдали от спектральной линии кубита. Напротив, если атом находится в резонансе с полостью, то это стимулирует излучение.



Fig. 29.6: Эквивалентная электрическая схема трансмона, связанного с резонатором. Синий — электрод резонатора, зеленый — электрод трансмона

Для многокубитных схем, как правило, в качестве микроволнового резонатора используется участок копланарной передающей линии на микросхеме. Микроволновый резонатор, в свою очередь, подключается к микроволновой линии.

Пропускание микроволновых сигналов через линию приводит к изменению квантового состояния электромагнитного излучения в резонаторе; это излучение взаимодействует с кубитом. Преимуществом данной схемы является то, что кубит может быть очень сильно связан с резонатором, но при этом сохраняет когерентность. Если пренебречь влиянием потерь в управляющей линии, то система описывается гамильтонианом вида

$$\hat{H}/\hbar = \left(\omega_q + \frac{1}{2} \delta_q (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) \right) \hat{a}^\dagger \hat{a} + \left(\omega_r + \frac{1}{2} \delta_r (\hat{b}^\dagger \hat{b} - 1) \right) \hat{b}^\dagger \hat{b} + \chi \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2} \right),$$

где ω_q, ω_r — частоты кубита и резонатора, соответственно; δ_r, δ_q — ангармонизмы мод трансмона и резонатора; χ — дисперсионный сдвиг, или кросс-керровская нелинейность между трансмоном и резонатором, \hat{a}, \hat{a}^\dagger —

одночастичные операторы уничтожения и рождения, действующие на моду трансмона, \hat{b}, \hat{b}^\dagger – одночастичные операторы рождения и уничтожения, действующие на моду резонатора, $\Omega(t)$ – амплитуда возбуждения со стороны микроволновой линии.

Если емкость C_C между трансмоном и резонатором маленькая, а их частоты сильно отличаются, то взаимодействие между ними будет нерезонансным, и тогда ангармонизмом резонатора можно пренебречь. А вот наличие дисперсионного сдвига между модой кубита и резонатора приводит к тому, что частота эффективная резонатора, то есть сумма всех чисел перед множителем $\hat{b}^\dagger \hat{b}$, зависит от населенности трансмона. В таком случае, измеряя отклик от резонатора на микроволновый импульс вблизи его резонансной частоты, мы можем получить информацию о состоянии кубита.



Fig. 29.7: Микроволновый прямоугольный импульс, отраженный от резонатора, при различных состояниях трансмона. Усреднено по 10000 повторениям.

29.5 Микроволновые однокубитные операции

Логические операции над кубитами выполняют микроволновыми сигналами на резонансной частоте кубита. Поведение трансмона по отношению к внешнему излучению можно представить в виде гамильтониана

$$\hat{V} = V_{\text{exl}}(t) \frac{C_g}{C_g + C_{qs}} \hat{Q}$$

для схемы с возбуждением напряжением $V_{\text{exl}}(t)$, подаваемым через маленький конденсатор. Пусть

$$V_{\text{exl}}(t) = V_I(t) \cos(\omega_q t + \phi(t)) + V_Q(t) \sin(\omega_q t + \phi(t)),$$

где $V_I(t), V_Q(t)$ – медленно изменяющиеся огибающие напряжения, а $\phi(t)$ – медленно изменяющаяся фаза. “Медленно изменяющаяся” здесь означает, что за переходы между уровнями будет отвечать только быстро

осциллирующий множитель. Обозначим

$$\Omega(t) = I(t) - iQ(t) = \frac{C_g}{C_g + C_{qs}} \sqrt{\frac{\hbar}{2Z}} (V_I - iV_Q).$$

Полный гамильтониан трансмона с возбуждающим излучением будет иметь вид

$$\hat{H}_{\text{dr}}/\hbar = \hat{H}/\hbar + \hat{V}/\hbar = \left(\omega_q + \frac{1}{2} \delta_q (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) \right) \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \left(\Omega(t) e^{i(\omega_q t + \phi(t))} + \Omega^*(t) e^{-i(\omega_q t + \phi(t))} \right) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger).$$



Fig. 29.8: Трансмон с линиями для микроволновых однокубитных операций. Слева – емкостно связанная линия (через конденсатор), справа – индуктивно связанная линия (через индуктивность).

Если трансмон использовать как кубит (то есть не возбуждать никаких уровней, кроме основного и первого возбужденного), можно перейти от операторов повышения и понижения к операторам Паули с помощью соотношений

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \hat{a} &= -\frac{1}{2} \hat{\sigma}_z \\ \hat{a} + \hat{a}^\dagger &= \hat{\sigma}_x \\ i(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) &= \hat{\sigma}_y.\end{aligned}$$

Тогда мы получим гамильтониан вида

$$\hat{H}_{\text{dr}}/\hbar = \frac{1}{2} \left(\Omega(t) e^{i(\omega_q t + \phi(t))} + \Omega^*(t) e^{-i(\omega_q t + \phi(t))} \right) \sigma_x.$$

Такое возбуждение отвечает модели Раби для двухуровневой системы. Модель Раби хорошо известна в квантовой оптике, так как она описывает когерентное взаимодействие одного атома с лазерным излучением. Здесь мы остановимся поподробнее, так как модель Раби имеет центральное значение для однокубитных операций на очень широком классе различных кубитов.

Пусть $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$ – решение уравнения Шредингера. Для того, чтобы решить уравнение Шредингера, которое является системой двух обыкновенных линейных дифференциальных уравнений относительно $c_0(t)$ и $c_1(t)$, нужно сделать замену

$$\begin{aligned}c_0(t) &= d_0(t) e^{-i\omega_q t/2}, \\ c_1(t) &= d_1(t) e^{+i\omega_q t/2}.\end{aligned}$$

Эта замена называется переходом во вращающуюся систему отсчета. В данном случае, система отсчета вращается вместе с быстро осциллирующей частью микроволнового сигнала. Эта замена может быть записана в виде произведения матрицы на вектор:

$$\begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} & 0 \\ 0 & e^{-i(\omega_q t + \phi(t))/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_0(t) \\ d_1(t) \end{pmatrix}.$$

Матрица этого линейного преобразования $\hat{U} = e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2\hat{\sigma}_z}$ является унитарной – ее собственные числа по модулю равны единице. Если подставить эту замену в уравнение Шредингера

$$i\hbar \partial |\psi\rangle / \partial t = \hat{H}_{\text{dr}} |\psi\rangle,$$

то получим систему

$$\begin{aligned} i\dot{d}_0 e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} + \frac{\omega_q + \dot{\phi}}{2} d_0 e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} = \\ -\frac{\omega_q}{2} d_0 e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} + d_1 e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} (\Omega(t) e^{i(\omega_q t + \phi(t))} + \Omega^*(t) e^{-i(\omega_q t + \phi(t))}), \\ i\dot{d}_1 e^{-i(\omega_q t + \phi(t))/2} - \frac{\omega_q + \dot{\phi}}{2} d_1 e^{-i(\omega_q t + \phi(t))/2} = \\ \frac{\omega_q}{2} d_1 e^{-i(\omega_q t + \phi(t))/2} + d_0 e^{i(\omega_q t + \phi(t))/2} (\Omega(t) e^{i(\omega_q t + \phi(t))} + \Omega^*(t) e^{-i(\omega_q t + \phi(t))}). \end{aligned}$$

Некоторыми алгебраическими преобразованиями можно упростить гамильтониан до вида

$$\begin{aligned} i\dot{d}_0 + \frac{\dot{\phi}(t)}{2} d_0 = \\ (\Omega(t) e^{i2(\omega_d t + \phi(t))} + \Omega^*(t)) d_1, \\ i\dot{d}_1 - \frac{\dot{\phi}(t)}{2} d_1 = \\ (\Omega(t) + \Omega^*(t) e^{-i2(\omega_d t + \phi(t))}) d_0. \end{aligned}$$

Далее используют “приближение вращающейся волны”, смысл которого в том, чтобы отбросить быстро осциллирующие слагаемые в гамильтониане с множителями $e^{-2i\omega_d t}$ и $e^{2i\omega_d t}$. При не очень больших амплитудах возбуждающих сигналов $\Omega \ll \omega$, эти слагаемые слишком быстро меняются, чтобы оказать существенное влияние на более медленное изменение $d_0(t)$ и $d_1(t)$.

Получается система уравнений уже с постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned} i\dot{d}_0 + \frac{\dot{\phi}(t)}{2} d_0 = \\ \Omega^*(t) d_1, \\ i\dot{d}_1 - \frac{\dot{\phi}(t)}{2} d_1 = \\ \Omega(t) d_0, \end{aligned}$$

которую можно записать через операторы Паули в виде

$$i|\tilde{\psi}(t)\rangle = \left(I(t)\hat{\sigma}_x + Q(t)\hat{\sigma}_y - \frac{\dot{\phi}(t)}{2}\hat{\sigma}_z \right) |\tilde{\psi}(t)\rangle,$$

$$\text{где } |\tilde{\psi}(t)\rangle = \begin{pmatrix} d_0(t) \\ d_1(t) \end{pmatrix}.$$

Такой гамильтониан отвечает вращению вектора состояния кубита в представлении сферы Блоха вокруг оси $\vec{\Omega} = \{I(t), Q(t), \dot{\phi}(t)/2\}$ с угловой скоростью $|\vec{\Omega}|$.

Наиболее часто используются микроволновые импульсы, отвечающие вращениям на углы $\pi/2$ и π вокруг осей x или y , однако реально любая однокубитная операция может быть реализована правильным подбором управляющих сигналов $I(t)$, $Q(t)$, или $\phi(t)$.

29.6 Декогеренция в сверхпроводниковых кубитах

В отличие от других типов кубитов, сверхпроводниковые кубиты имеют сравнительно низкие времена когерентности. Это означает, что информация, хранящаяся в сверхпроводниковом кубите, может испортиться. Для сверхпроводниковых кубитов декогеренцию можно понимать как неконтролируемое воздействие на кубит со стороны флюктуаций напряжения или тока. Природа флюктуаций может быть очень разной. Наиболее проблематичными являются флюктуации микроскопических зарядов и магнитных моментов внутри самой микросхемы.

Как правило различают шумы и наводки, которые могут привести самопроизвольному возбуждению или релаксации кубита, а также к переходу в недопустимые состояния типа уровней $|2\rangle$ и выше, и шумы, которые влияют на частоту переходов между уровнями кубита.

В самой простой, марковской модели модели шума, события декогеренции независимы во времени и пространстве. Флюктуационный сигнал $S_f(t)$, связывающийся с трансмоном посредством члена гамильтониана типа $\hat{V} = S_f(t)\hat{a}^\dagger\hat{a}$, будет случайным образом менять частоту кубита. Это приведет к набегу фазы

$$\Delta\phi(t) = \int_0^t S_f(\tau)d\tau$$

на кубите. Если разложить флюктуационный сигнал по спектральным компонентам (то есть представить в виде Фурье-компонент), то получим

$$\Delta\phi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_f(\omega)}{\omega} \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) d\omega.$$

Таким образом, наиболее существенным с точки зрения случайного набега фазы (то есть дефазировки) является низкочастотный шум. К таким флюктуационным сигналам может относиться, например, тепловая населенность считывающего резонатора.

Другой тип флюктуационного сигнала связывается с трансмоном посредством дополнительного члена в гамильтониане, имеющего вид $\hat{V} = i\Delta\Omega_\downarrow(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$. Такой флюктуационный сигнал приводит к самопроизвольному возбуждению и релаксации кубита под действием внешней силы. Наиболее существенными являются шумы, частота которых отвечает частоте кубита.

Помимо внешних воздействий, которые можно представить как случайное слагаемое в гамильтониане, существуют также и воздействия, которые нельзя представить в таком виде, например обыкновенную релаксацию кубита без сопутствующего теплового возбуждения. Такой канал декогеренции отвечает случайному действию оператора уничтожения \hat{a} . Таковым является, например, релаксация трансмана в управляющую линию, через которую выполняются однокубитные операции.

В общем случае, для всех типов марковского шума можно ввести оператор коллапса \hat{c} и константу декогеренции γ . В случае релаксации, $\hat{c} = \hat{a}$, $\gamma = 1/T_1$. Для дефазировки $\hat{c} = \hat{\sigma}_z$, $\gamma = 1/2T_\phi$.

Для того, чтобы измерить эффекты декогеренции на сверхпроводниковые кубиты, используют два основных типа эксперимента. Первый типа эксперимента заключается в возбуждении кубита и считывании его состояния спустя время t . Эксперимент повторяется много раз с различным временем задержки t ; результат можно зафитовать экспонентой. Время затухания экспоненты в e будет временем релаксации T_1 .

Такое измерение нечувствительно к дефазировке кубита. Чтобы измерить влияние дефазировки, кубит помещают в состояние суперпозиции при помощи вращения вокруг оси x на угол $\pi/2$, ждут время t , делают

вращение вокруг оси z на угол, пропорциональный длительности паузы t , а затем еще поворачивают на угол $\pi/2$ вокруг оси x . В случае идеальной двухкубитной системы зависимость результата измерений от длительности паузы t будет синусоидальной; при наличии декогеренции в марковской модели осцилляции будут затухать экспоненциально, причем константа затухания T_2 может быть выражена как $\frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{T_\phi}$.



Fig. 29.9: Эксперименты по измерению времени когерентности кубита

Процессы декогеренции ограничивают длину алгоритмов, которые могут быть выполнены на сверхпроводниковом квантовом процессоре. Если хотя бы одно событие декогеренции произойдет в течение алгоритма, то результат выполнения может оказаться неправильным. Важно, что считывание в квантовом компьютере имеет принципиально дискретный характер: из-за этого в принципе возможно говорить о дискретных ошибках, а не о непрерывных ошибках, как в аналоговых компьютерах. Кроме того, как и в обычных цифровых компьютерах, в квантовых компьютерах возможна коррекция ошибок. Для того, чтобы измерить вероятность ошибки напрямую, используют рандомизированное тестирование (randomized benchmarking) квантовых вентилей.

Идея рандомизированного тестирования заключается в том, чтобы выполнять случайную последовательность операций, а зачем сравнивать результат ее выполнения с теоретическим. Существует ряд различных вариаций рандомизированного тестирования, которые отличаются тем, из какой совокупности берутся случайные последовательности. В самом простом случае используют вентили из группы Клиффорда – это такое подмножество логических операций, которые не образуют универсальный набор, но зато алгоритмы целиком состоящие только из таких вентилей можно быстро просимулировать на классическом компьютере даже при большом количестве кубитов. Кроме того, часто используют только такие последовательности вентилей, в конце которых система оказывается не в состоянии суперпозиции, а в определенном состоянии, например в состоянии $|0 \dots 0\rangle$. Ошибки приводят к тому, что вероятность $\langle F_n \rangle$ получить состояние $|0 \dots 0\rangle$ экспоненциально убывает с увеличением длины последовательности вентилей N :

$$\langle F_n \rangle_{\text{seq}}(N) \sim e^{-F_1 n}$$

29.7 Двухкубитные вентили

Для трансмонов существует целый ряд способов реализации двухкубитных операций. Как правило, для этого трансмоны связывают емкостным способом, напрямую или через элемент связи. Мы будем рассматривать двухкубитную операцию iSWAP, реализуемую при помощи параметрического изменения эффективной константы связи между кубитами.

Так же, как в случае кубита, связанного с резонатором, гамильтониан двух связанных трансмонов описывается в первом приближении соотношением

$$\hat{H}/\hbar = \left(\omega_1 + \frac{1}{2} \delta_q (\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1) \right) \hat{a}^\dagger \hat{a} + \left(\omega_2 + \frac{1}{2} \delta_r (\hat{b}^\dagger \hat{b} - 1) \right) \hat{b}^\dagger \hat{b} + \chi \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2} \right),$$



Fig. 29.10: Схема микроволновых импульсов и пример результатов рандомизированного тестирования вентиляй из группы Клиффорда. Каналы 1 и 2 генератора сигналов произвольной формы подключены к линии считывания, каналы 3 и 4 – к линии управления кубитом. Измерена населенность кубита после случайных последовательностей вентиляй разных длин; константа экспоненциального затухания населенности дает точность в расчете на один вентиль $F_1 = 0.993$.

где \hat{a}, \hat{a}^\dagger – операторы уничтожения и рождения одной степени свободы (трансмона), а \hat{b}, \hat{b}^\dagger – операторы другой степени свободы (трансмона).

Принцип работы элемента связи в том, что вместо одного джозефсоновского контакта, в нем есть два джозефсоновских контакта, соединенных параллельно. Такая цепь называется ПТ-СКВИД, или просто СКВИД (Superconducting Quantum Interference Device). Если у нас есть два джозефсоновских контакта в кольце, то такая структура будет вести себя по отношению к внешней цепи так же, как один контакт, но с управляемым критическим током. Управление критическим током можно осуществлять при помощи магнитного потока Φ_x , который проходит через кольцо СКВИДа. Соотношение для критического тока выглядит следующим образом:

$$I_{\text{CSQUID}}(\Phi_x) = \sqrt{(I_{\text{Cc1}} + I_{\text{Cc2}})^2 \cos^2(\pi\Phi_x/\Phi_0) + (I_{\text{Cc1}} - I_{\text{Cc2}})^2 \sin^2(\pi\Phi_x/\Phi_0)}.$$

Таким образом, элемент связи представляет собой слабо нелинейный LC-контур с перестраиваемой индуктивностью, а значит и частотой. В зависимости от его частоты будет менять эффективная константа связи между кубитами χ , а также – в меньшей мере – и остальные параметры системы.

Когда нет двухкубитной операции, желательно, чтобы кубиты не взаимодействовали, то есть $\chi = 0$. Все константы этого гамильтониана зависят от внешнего параметра – потока в СКВИДе элемента связи Φ_x . При быстром изменении этого параметра появляется дополнительное (диабатическое) слагаемое

$$\hat{V} = i\hbar\hat{U}\frac{\partial\hat{U}^\dagger}{\partial\Phi_x}\frac{\partial\Phi_x}{\partial t} \sim \Omega(\hat{a}^\dagger + \hat{a})(\hat{b}^\dagger + \hat{b}).$$

Мы не будем здесь подробно рассматривать природу этого слагаемого; подробнее об этом можно почитать, например, в работе [RGM+17]. Ограничимся тем, что это взаимодействие является поперечным, то есть xx -взаимодействием. Если модулировать поток в СКВИДе в резонансе с разностью частот между кубитами ($n\omega_m = \omega_1 - \omega_2$, где n – номер гармоники), то возбуждение с одного кубита будет переходить на другой, и обратно.

Унитарная матрица этого вентиля имеет вид

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\Omega_g t & i\sin\Omega_g t & 0 \\ 0 & i\sin\Omega_g t & \cos\Omega_g t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Помимо вентиля iSWAP, на трансмонах делают CPHASE, который физически можно реализовать импульсным увеличением константы χ , или, например, как IBM Quantum Experience – при помощи кросс-резонансных вентилей.

29.8 Что почитать для дальнейшего изучения вопроса?

- Introduction to Quantum Computing and Quantum Hardware
- A Quantum Engineer’s Guide to Superconducting Qubits [KKY+19]



Fig. 29.11: Последовательность сигналов, которую нужно подать, чтобы наблюдать осцилляции населенности между кубитами, и результат из наблюдения. iSWAP получается при длительности вентиля $T_p = 500$ ns

Part IX

Квантовое машинное обучение

О БЛОКЕ “КВАНТОВОЕ МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ”

Этот блок включает в себя:

- общий рассказ о видах квантового машинного обучения;

Продвинутые темы блока дополнительно рассказывают:

- об алгоритме HHL;
- о квантовом алгоритме ближайшего соседа;

О КВАНТОВОМ МАШИННОМ ОБУЧЕНИИ

Автор(ы):

- Синченко Семен

Квантовое машинное обучение – это на самом деле огромная область, и наш курс охватывает лишь небольшую ее часть. В этой обзорной лекции мы попробуем взглянуть на картину в целом и посмотреть, какие есть направления в этой интересной и динамично развивающейся области.

Note: Эта статья является исключительно обзорной – в ней будет много красивых картинок, но мы не будем вдаваться в формулы, которые могут эти картинки объяснить. Цель лекции – познакомить читателя с тем, как машинное обучение может быть применено в разных задачах, связанных с квантовыми вычислениями и квантовой физикой.

31.1 Виды квантового машинного обучения

Как мы помним из *лекции по машинному обучению*, в таких задачах у нас есть две важных составляющих – данные и алгоритм. В случае квантового машинного обучения у нас появляется некоторая “вариативность”:

- квантовые данные
- квантовый алгоритм
- классические данные
- классический алгоритм

На базе этого можно построить классификацию машинного обучения.

Когда мы имеем классические данные и классический алгоритм, то это как раз обычное машинное обучение, рассмотренное во вводной лекции курса. А вот остальные виды мы рассмотрим далее.



Fig. 31.1: Виды машинного обучения в зависимости от типа данных и алгоритма.

31.2 Квантовые данные и классический алгоритм

Классическое машинное обучение применительно к квантовым данным – это очень активно развивающаяся область квантовой физики и квантовой химии. Главный вопрос в данном случае – что именно мы понимаем под “квантовыми данными”. Но мы будем придерживаться максимально широкой трактовки этого понятия. Далее рассмотрим примеры возможного применения ML в задачах квантовой физики и химии.

31.2.1 NQS

Neural Quantum States это очень перспективное улучшение квантового Монте-Карло – популярного метода приближенного решения задач квантовой физики. Мы будем подробно рассматривать проблему нахождения энергетических спектров квантумеханических систем, а также моделирования квантовой динамики в блоке о проблемах квантового машинного обучения. Пока нам достаточно знания того, что эти задачи являются вычислительно трудными и их прямое численное решение очень быстро становится невозможным по мере увеличения размера системы и числа взаимодействующих частиц. В подходе **NQS**, впервые опубликованном в журнале *Science* [CT17], предложено моделировать волновую функцию Ψ физической системы при помощи глубокой нейронной сети. Это дает ряд преимуществ над обычным квантовым Монте-Карло в плане точности моделирования, а также позволяет явно симулировать *time-dependent* уравнение Шредингера. Относительно другого популярного метода, который называется *Matrix Product State* **NQS** дает лучшую масштабируемость и меньшую аппроксимацию сложность, которая оказывается линейной по числу частиц в физической системе.



Fig. 31.2: Сходимость NQS по энергии в зависимости от числа эпох обучения. По вертикали значение энергии на один спин, по горизонтали эпохи обучения. Пунктиром отмечено точное значение, полученное прямой диагонализацией гамильтониана. Слева общий вид, справа – сверхтонкая сходимость вблизи энергии основного состояния. Источник [CT17].

31.2.2 CNN над потенциалами

Другим интересным подходом является применение *Convolutional Neural Networks (CNN)* – специального класса глубоких нейронных сетей, разработанных для обработки изображений, к физическим потенциалам. Дело в том, что трехмерный энергетический потенциал можно представить как 2D изображение. Например, можно взять периодическую потенциальную энергию, создаваемую атомами в кристаллической решетке и рассмотреть, как будет вести себя электрон в таком потенциале.

Существует ограниченный набор частных случаев, когда эта задача может быть решена аналитически. Используя такие точные решения, мы составляем обучающую выборку, тренируем *CNN*, а потом можем применять ее к другим, более сложным потенциалам.

31.2.3 Решение уравнения Шредингера

Другим примером решения задачи об энергетических уровнях является применение глубокой нейронной сети, которая на вход принимает *Slater determinants*, *Jastrow factor* и другие известные способы приближенного описания квантовомеханических систем. А на выходе из такой глубокой нейронной сети получаем волновую функцию системы. Таким образом, получается объединить все преимущества хорошо изученных физических представлений с высокой экспрессивностью глубоких нейронных сетей [HSchatzleNoe20].

Такой подход дает фантастическую точность по сравнению с другими подходами и выглядит очень перспективно, так как дополнительно позволяет получить очень хорошую масштабируемость из-за возможности снизить число *slater determinants*.



Fig. 31.3: Иллюстрация применения *CNN* на энергетических потенциалах. Источник [MST17].

31.2.4 RNN для моделирования волновых функций

Другой похожий на *NQS* подход – это использовать для аппроксимации волновой функции рекуррентные нейронные сети вместо машин Больцмана.

В данном подходе мы строим “последовательную” волновую функцию многочастичной квантовой системы, “подавая” туда по одной каждой частицу. А так как нейронная сеть – рекуррентная, мы по сути последовательно строим волновую функцию многочастичной системы.

31.2.5 Квантовая томография

Мы немного рассказывали о задаче квантовой томографии в *лекции про смешанные состояния*. Правда, там привели пример использования метода максимизации правдоподобия для решения задачи восстановления состояния по измерениям. Оказывается, что для этих целей можно использовать глубокие нейронные сети. Один из таких подходов описан в [AMunozNK21]. Суть подхода в том, что используются генеративные сети с условием – *Conditional GAN* (C-GAN) для восстановления состояния. Для создания матрицы плотности используется генератор, а для вычисления ошибки относительно реальных результатов измерений – дискриминатор.

31.2.6 Заключение к подразделу

В целом, применение классических алгоритмов машинного обучения к задачам квантовой физики и квантовой химии – очень перспективная область. Мы еще немного коснемся этой темы, когда будем рассматривать решение задачи о собственных значениях гамильтонианов. Однако, эта тема выходит за рамки нашего курса.



Fig. 31.4: Архитектура подхода *PauliNet*. Источник [HSchatzleNoe20].



Fig. 31.5: Результаты RNN-модели для аппроксимации волновых функций. Можно получать не только значение энергии, но и ожидаемые значения других операторов, например, операторов спина или операторов спиновых корреляций. Источник [HAGH+20]. На графике (а) приведена зависимость энергии от эпохи обучения. На графике (б) приведены зависимости собственного значения операторов спиновых корреляций 40-го (центрального) спина с n -ым от номера n . На графике (с) приведено распределение значений оператора спина по длине цепочки спинов.

Fig. 31.6: Иллюстрация подхода *C-GAN*.

31.3 Классические данные и квантовый алгоритм

Теперь перейдем к ситуации, когда мы рассматриваем классические данные (задачи классификации и регрессии) и применяем к ним машинное обучение, реализуемое на квантовом компьютере как набор операций над кубитами.

31.3.1 HHL

Один из самых известных алгоритмов квантового машинного обучения – это алгоритм **HHL** [HHL09], которому в нашем курсе посвящена *отдельная продвинутая лекция*. Это алгоритм решения системы линейных уравнений за $O(N \log N)$ операций. Так как к решению системы уравнений можно свести огромное число задач реального мира, этот алгоритм обладает огромным потенциалом. К сожалению, сегодня его практическое применение сильно ограничено несколькими вещами:

- необходимость эффективной генерации начального состояния – без этого достижения превосходства **HHL** невозможно;
- высокие требования к точности операций, а также необходимость в большом числе кубитов.

Этот алгоритм является примером чисто квантового алгоритма, где абсолютно все операции выполняются на квантовом компьютере.

31.3.2 Quantum k-NN

Другой пример полностью квантового алгоритма – это модификация классического алгоритма ближайшего соседа, с той лишь разницей, что для вычисления расстояний между точками в N -мерном пространстве мы используем квантовый компьютер. Этот алгоритм называется *Quantum k-NN* (*Quantum k Nearest Neighbours*). Сегодня существует довольно много потенциально эффективных реализаций этого алгоритма, которые отличаются в основном тем, какая используется метрика расстояния в гильбертовом пространстве. Одна из реализаций рассмотрена в *продвинутой лекции нашего курса*. К сожалению, практическое использование таких алгоритмов сегодня ограничено тем, что для них требуется эффективная квантовая память – *quantum Random Access Memory*.

31.3.3 Заключение к подразделу

Сегодня мы живем в так называемой *NISQ* (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*) эпохе, то есть когда у нас есть квантовые компьютеры лишь ограниченного размера и с относительно большим уровнем шумов. А чисто квантовые алгоритмы квантового машинного обучения очень требовательны именно к точности вычислений. Также в таких алгоритмах большой проблемой является постоянная необходимость сложной операции перевода классических данных в квантовые. В теории, эта проблема исчезнет с появлением *qRAM*, однако сегодня такая “квантовая память” еще не существует и даже пока нет однозначного понимания того, как именно ее делать. Все это сильно ограничивает потенциал полностью квантовых подходов. Далее мы рассмотрим более перспективный в *NISQ*-эпоху подход – гибридное квантово-классическое машинное обучение.

31.4 Гибридное обучение

Большая часть из оставшихся лекций нашего курса будет посвящена как раз гибридным методам квантового машинного обучения. В этих методах часть алгоритма реализуется в виде квантовых вентилей, а часть выполняется на классическом компьютере.

31.4.1 VQC

Variational Quantum Circuits, или просто вариационные схемы, – это одно из центральных понятий в гибридном квантово-классическом обучении. Основная идея заключается в том, что мы используем квантовую операцию, которая задается каким-то классическим параметром. Обычно это одна или несколько операций “вращений” на сфере Блоха, про которые мы говорили в лекции про квантовые гейты. При этом вариация классического параметра осуществляется на классическом компьютере, например, при помощи градиентного спуска.

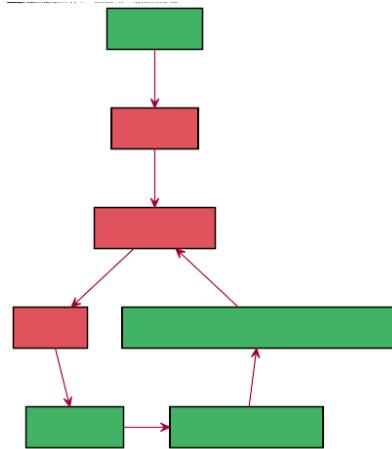


Fig. 31.7: Схема работы вариационной квантовой схемы.

В нашем курсе теме вариационных схем будет посвящено несколько лекций:

- *вариационные квантовые схемы*
- *градиенты VQC*
- *продвинутая лекция по градиентам VQC*

Также мы часто будем возвращаться понятию VQC в теме квантовых нейросетей, а также в блоке про решение задачи собственных значений при помощи алгоритма *Variational Quantum Eigensolver*.

31.4.2 Квантовые нейросети

Квантовые “нейронные сети” – это как раз пример, когда мы комбинируем вариационные слои вместе с обычными слоями нейронных сетей.

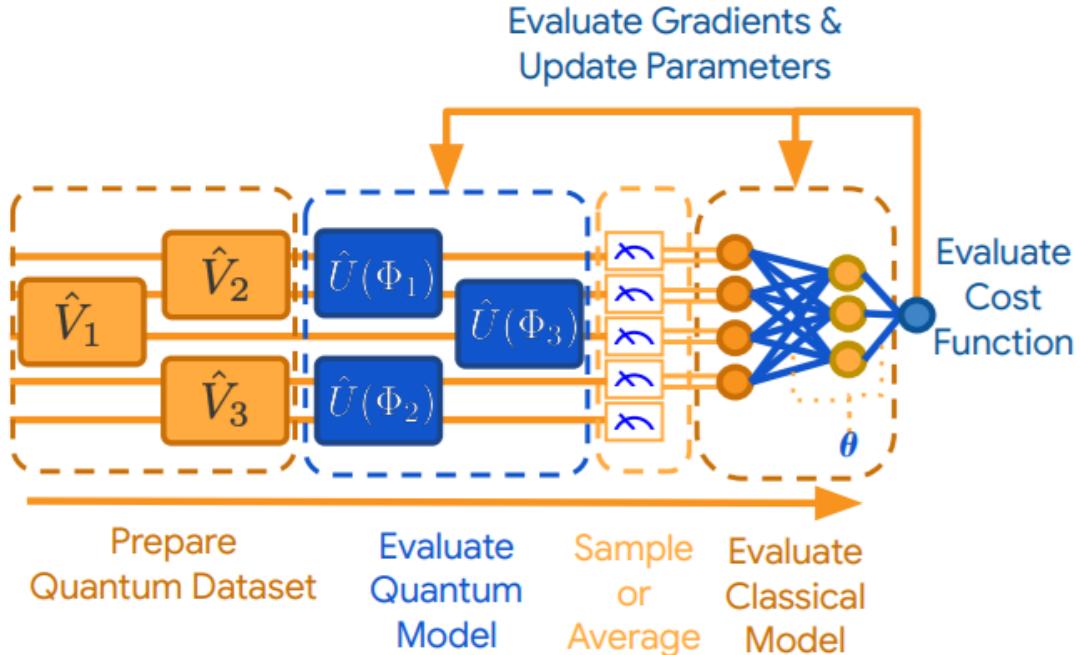


Fig. 31.8: Пример гибридной квантовой нейросети. Источник [BVM+21].

На картинке выше приведен пример комбинации вариационных квантовых схем и классических слоев обычных глубоких нейронных сетей. При этом оптимизация параметров выполняется при помощи единого процесса *back-propagation*, с той лишь разницей, что для классических и квантовых слоев немного по-разному вычисляется градиент для параметров конкретного слоя. Теме квантовых нейронных сетей в нашем курсе будет посвящен целый блок, где будет, в том числе, рассказано еще и об аналоге сверточного слоя с использованием VQC.

31.4.3 Квантовые ядра

Квантовые ядра и квантовый алгоритм *Support Vector Machine (SVM)* – это другой пример, как можно объединить квантовые гейты с классическими алгоритмами. Математике “под капотом” классического *SVM* у нас будет посвящена отдельная лекция, но если кратко, то суть там в том, что решение задачи об оптимальной разделяющей гиперплоскости (другими словами, об оптимальной классификации) можно выразить через скалярные произведения точек обучающей выборки. Причем не обязательно в исходном пространстве, а в любом гильбертовом пространстве. А как мы помним, квантовые гейты как раз представляют собой операции в гильбертовом пространстве, причем экспоненциально большого размера. Так и появляется идея гибридного *SVM* – мы переписываем скалярные произведения точек как результат измерения параметризованных квантовых схем, где параметры это и есть компоненты каждой из точек. А дальше уже применяем классические методы решения оптимизационной задачи. Этой теме у нас будет посвящена отдельная лекция.

31.4.4 Оптимизация энергии

Еще один интересный и перспективный класс задач, которые можно решать гибридными методами – это оптимизация энергии гамильтониана. Может показаться, что это еще что-то из области квантовой физики, но на самом деле в блоке о проблемах квантового машинного обучения мы покажем, как к задаче поиска основного состояния системы, описанной квантовым оператором – гамильтонианом, можно свести огромное число задач реального мира. Например, это задача Коммивояжера, очень важная в области логистики, или задача о нахождении энергий электронов, которая играет важную роль в разработке лекарств или создания новых материалов.

31.5 Заключение

В этой лекции мы познакомились с тем, каким может быть квантовое машинное обучение. Мы узнали, что бывают:

- классические алгоритмы над квантовыми данными;
- квантовые алгоритмы над классическими данными;
- гибридные алгоритмы.

Именно гибридные алгоритмы наиболее перспективны в *NISQ*-эпоху, и именно им будет посвящена большая часть оставшихся лекций курса.

CHAPTER
THIRTYTWO

АЛГОРИТМ ННЛ

Автор(ы):

- Решетова Карина
- Токарев Игорь

Сегодня пришла пора поговорить о знаменитом алгоритме Харроу, Хассидима и Ллойда, более известном как ННЛ-алгоритме, способном решать системы линейных уравнений.

Очень надеюсь, что к данному занятию у вас уже есть представление об алгоритме фазовой оценки (QPE), использующем обратное квантовое преобразование Фурье, на котором и базируется ННЛ. Глубокое понимание всех тонкостей этого алгоритма потребует от вас уверенного владения математическим аппаратом. За детальным описанием вы всегда можете обратиться к статьям [DHM+18], [HHL09], и [HZL+17]. Приготовьтесь потратить время и умственные ресурсы, если алгоритм вас зацепит и вы решите в нем как следует покопаться. Мы же поможем вам заинтересоваться, рассмотрим основные принципы и небольшой пример.

Note: Именно ННЛ-алгоритм произвел настоящую революцию в области квантового машинного обучения. Ведь решение систем линейных уравнений так или иначе находится “под капотом” почти любого известного алгоритма машинного обучения. И действительно:

- классические линейная и логистическая регрессия сводятся именно к этой задаче;
- задача SVM может быть переформулирована в терминах решений систем линейных уравнений;
- задача нахождения обратной матрицы (часто используется в глубоком обучении) внутри обычно решается через решение линейной системы;

И это только малая часть примеров!

Так что знакомство с QML не будет полным без ознакомления с этим прекрасным, но очень сложным алгоритмом!

32.1 Задача

Представим обычную систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$

Что в операторной форме можно переписать как:

$$A\vec{x} = \vec{b},$$



Fig. 32.1: Сет Ллойд, профессор МИТ и один из создателей HHL-алгоритма

где A – эрмитова матрица.

Мы будем решать задачу на квантовом компьютере, то нам нужно перейти к квантовым состояниям:

$$A|x\rangle = |b\rangle$$

Чтобы найти искомый вектор $|x\rangle$, все что нам по сути нужно сделать – это найти обратный к A оператор (обозначаемый A^{-1}), который находится из равенства:

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

Распишем применительно к нашей задаче поиск вектора $|b\rangle$:

$$\begin{aligned} A|x\rangle &= |b\rangle \\ A^{-1}A|x\rangle &= A^{-1}|b\rangle \\ |x\rangle &= A^{-1}|b\rangle \end{aligned}$$

Оказывается, что и это все можно провернуть с помощью известных квантовых преобразований. Принципиальный вид нашей схемы представлен следующим образом:



Fig. 32.2: Квантовая схема, реализующая алгоритм HHL

В нижний регистр загружается вектор $|b\rangle$, средний и нижний регистры участвуют в фазовой оценке, а верхний дополнительный кубит нужен для так называемого вращения, обусловленного собственными значениями. Давайте разбираться.

32.2 Реализация HHL

Для начала мы должны подготовить наши регистры по всем квантовым законам: $|b\rangle$ и $|x\rangle$ должны быть пронормированы, а оператор A должен быть эрмитовым. Надеемся, что Вы помните про ортонормированный базис, сферу Блоха, комплексное представление векторов $|0\rangle$ и $|1\rangle$... Если нет, то обратитесь к предыдущим разделам курса.

Мы будем использовать оператор $U = e^{iAt}$, и нужно, чтобы он был обратим -- для этого должна быть эрмитовой.

Note: В случае, когда A не является эрмитовой, нужно перейти к эрмитовой матрице C :

$$C = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

И рассматривается задача $C\vec{y} = \begin{pmatrix} \vec{b} \\ 0 \end{pmatrix}$ для того, чтобы найти решение $y = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{x} \end{pmatrix}$

Вспомним, что эрмитову матрицу A можно представить в виде суммы собственных векторов, умноженных на собственные значения, т.е. в виде спектрального разложения:

$$A = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|$$

$$A^{-1} = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j^{-1} |u_j\rangle\langle u_j|$$

Тогда вектор $|b\rangle$ можно представить через собственные векторы A :

$$|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} b_j |u_j\rangle$$

Чтобы понять, почему это тоже ключевой момент, давайте вспомним, что значит собственный вектор и собственное значение матрицы.

Note: Собственным вектором $|u\rangle$ оператора A называется такой ненулевой вектор, для которого выполняется:

$$A|u\rangle = \lambda|u\rangle$$

λ – собственное значение оператора A .

Таким образом, искомый вектор $|x\rangle$ – не что иное, как:

$$|x\rangle = A^{-1}|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j^{-1} b_j |u_j\rangle$$

Итак, фазовая оценка. Мы применяем к кубитам второго регистра матрицы Адамара, тем самым приводим их в суперпозицию. Следом запускаем оператор U :

$$U = e^{iAt} = \sum_{j=0}^{N-1} e^{i\lambda_j t} |u_j\rangle\langle u_j|$$

Для того, чтобы узнать собственное значение оператора U , получения фазы (Quantum Phase Estimation – QPE), результатом которого получится следующее состояние:

$$\begin{aligned} QPE(U, |0\rangle|u\rangle) &= \\ \frac{1}{2^{m/2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 2^{m-1}\psi} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 2^{m-2}\psi} |1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 2^0\psi} |1\rangle) \otimes |u\rangle &= \\ \frac{1}{2^{m/2}} \sum_{j=0}^{2^{m-1}} e^{2\pi i \psi j} |j\rangle|u\rangle &= |\psi_u\rangle|u\rangle \end{aligned}$$

Параметр t это нормировочная константа в случае $U = e^{iAt}$:

$$e^{2\pi i \psi} = e^{i\lambda_j t}$$

$$\psi = \frac{\lambda_j t}{2\pi}$$

Параметр t подбирается с учетом того, что на выходе алгоритма QPE собственные значения λ_j нормализуются к виду $0 \leq \lambda_j \leq 1$ и обычно мы располагаем ограниченным числом кубитов, которое можно использовать для аппроксимации.



Fig. 32.3: Схема алгоритма QPE

Алгоритм обратного квантового Фурье переводит фазу в конкретный вектор.

Принципиальная схема QPE выглядит следующим образом:

Итак, мы подготовились, вспомнили много хорошего, теперь пошагово распишем наш алгоритм.

Стартуем мы со следующим состоянием:

$$|0\rangle_a |0\rangle_r |b\rangle_m$$

Т.е. наше состояние будет храниться в трех регистрах, в каждом из которых содержится столько кубитов, сколько нужно для решения задачи.

1. Применение QPE с использованием преобразования e^{iAt} , после чего мы получим собственное значение оператора A во втором регистре:

$$|0\rangle_a |0\rangle_r |b\rangle_m \rightarrow \sum_{j=0}^{N-1} b_j |0\rangle_a |\lambda_j\rangle_r |u_j\rangle_m$$

2. Поворачиваем первый кубит (с индексом a), используя специальный оператор вращения R :

$$R|0\rangle_a = \sum_{j=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle_a + \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle_a \right),$$

где C – константа, которая должна быть меньше минимального из лямбда: $|C| < \lambda_{min}$ [Почему?].

Переводим первый кубит $|0\rangle_a$:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^{N-1} b_j |0\rangle_a |\lambda_j\rangle_r |u_j\rangle_m \rightarrow \\ & \sum_{j=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle \right) b_j |\lambda_j\rangle_n |u_j\rangle_m \end{aligned}$$

3. Применяем QPE^\dagger (т.е. обратное получение фазы) и получаем следующее состояние:

$$\sum_{j=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle \right) b_j |0\rangle_n |u_j\rangle_m$$

В конце мы измеряем верхний кубит и если получаем единицу, то знаем, что в нижнем регистре хранится искомый $|x\rangle$ с учетом нормировки:

$$|x\rangle \approx \sum_{j=0}^{N-1} C\left(\frac{b_j}{\lambda_j}\right) |u_j\rangle$$

32.3 Пример

Рассмотрим небольшой, но удобный пример. Удобный в том отношении, что, вообще говоря, алгоритм ННЛ имеет определенное приближение. Если собственные значения не представимы в бинарной форме, то о 100% точности говорить не приходится. Мы также опустим ряд вопросов, связанных с подбором параметров и количества кубитов второго регистра. Главное сейчас – понять, что происходит, и для этого наша матрица эрмитова, все условия подобраны, а преобразования точны. Стоит помнить, что знать заранее значение собственных векторов и собственных значений нам совершенно не обязательно – это нужно лишь для наглядности.

Итак, пусть задача выглядит так :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{5} \\ \frac{3}{5} & 1 \end{pmatrix}$$

$$|b\rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{cases} x_1 + \frac{3}{5}x_2 = 0 \\ \frac{3}{5}x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

Собственные значения и соответствующие собственные векторы:

$$\lambda_0 = \frac{2}{5}, |u_0\rangle = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_1 = \frac{8}{5}, |u_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Зададим параметр t и проанализируем фазу:

$$t = 2\pi \frac{5}{16}$$

$$e^{2\pi i \psi} = e^{i\lambda_j t}$$

$$\psi = \frac{\lambda_j t}{2\pi}$$

$$\frac{\lambda_0 t}{2\pi} = \frac{1}{8}, \quad \frac{\lambda_1 t}{2\pi} = \frac{1}{2}$$

Как мы видим, для перевода угла ψ в векторную форму, нам понадобятся три кубита. После преобразования QPE мы имеем следующее состояние:

$$QPE(|0\rangle_a |0\rangle_r |b\rangle_m) = \sum_{j=0}^1 \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle_a |\lambda_j\rangle_r |u_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_a |001\rangle_r |u_0\rangle + |0\rangle_a |100\rangle_r |u_1\rangle)$$

Подберем константу C (как мы помним, она должна быть меньше наименьшего из собственных чисел) и произведем вращение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 - \frac{(1/16)^2}{(1/8)^2}} |0\rangle + \frac{1/16}{1/8} |1\rangle \right) |001\rangle_r |u_0\rangle_m + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 - \frac{(1/16)^2}{(1/2)^2}} |0\rangle_a + \frac{1/16}{1/2} |1\rangle_a \right) |100\rangle_r |u_1\rangle_m \end{aligned}$$

В конце мы производим измерение верхнего кубита (с индексом a) и при получении единицы можем быть уверены, что нижний регистр содержит искомое решение с учетом нормировки:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\sqrt{2}} |1\rangle_a |000\rangle_r |u_0\rangle_m + \frac{1}{8\sqrt{2}} |1\rangle_a |000\rangle_r |u_1\rangle_m \\ |x\rangle \approx & \frac{1}{2\sqrt{2}} / (\sqrt{\frac{17}{128}}) |u_0\rangle + \frac{1}{8\sqrt{2}} / (\sqrt{\frac{17}{128}}) |u_1\rangle \end{aligned}$$

QUANTUM K-NEAREST NEIGHBOR

Автор(ы):

- Токарев Игорь

33.1 Введение

Если вы занимались машинным обучением, то, скорее всего, знакомы с классическим алгоритмом k ближайших соседей. Он относительно прост, применяется как в задачах классификации, так и в регрессии. Кстати, классический kNN можно вспомнить обратившись к [лекции](#) от ODS по классическому машинному обучению.

Давайте немножко вспомним задачу классификации с использованием классического kNN алгоритма:

У нас есть $\vec{x} \in \{0, 1\}^N$ – **тестовый образец**, а также **тренировочные образцы** – это набор векторов $\vec{v}_i \in \{0, 1\}^N$, в котором каждый вектор уже размечен. И наша задача подобрать правильную метку тестовому образцу.

Тогда мы пройдём следующие шаги:

1. Вычислим похожесть между тестовым образцом и **каждым** тренировочным образцом.
2. Найдем k ближайших к тестовому образцу соседей.
3. Подсчитаем количество представителей для каждого класса и приписываем метку самого часто встречающегося класса к тестовому образцу.

Самой трудозатратным шагом является вычисление расстояния от тестового образца к каждому тренировочному. Также и в квантовой версии алгоритма.

Note: На текущий момент разработано несколько разных версий квантового алгоритма поиска ближайших соседей. Есть версия основанная на расстоянии Хэмминга [[LTG21](#)]:

Расстояние Хэмминга между векторами \vec{x} и \vec{v}_i :

$$d_i = |\vec{x} - \vec{v}_i| = \sum_{j=1}^N (x_j \oplus v_{ij})$$

Но в данной работе мы обратим внимание на версию, которая вычисляет fidelity между двумя векторами состояниями.

Пусть задано Гильбертово пространство n кубитов, размерности $N = 2^n$. Вектор $|\psi\rangle \in H$ – это тестовое состояние, для которого нам нужно определить метку.

Пусть $\{|\phi\rangle : j \in \{0, \dots, M-1\}\} \subset H$ – это набор тренировочных состояний, для которых мы знаем их метки. $M = 2^m$, $m \in \mathbb{Z}$

Определим fidelity между тестовым состоянием и j -тым тренировочным $|\phi_j\rangle$ как

$$F_j = F(\psi, \phi_j) = |\langle\psi|\phi_j\rangle|^2$$

В свою очередь $F = [F_0, F_1, \dots, F_{M-1}]$ - это таблица fidelity значений между тестовым состоянием и каждым из тренировочных.

Заметим, что задача нахождения k ближайших соседей сводится к задаче нахождения k максимумов значений fidelity из таблицы F . Для этого мы должны реализовать оракула

$$O_{y,A}|j\rangle|0\rangle = |j\rangle|f_{y,A}(j)\rangle,$$

где $f_{y,A}$ - это булева функция определённая как

$$f_{y,A}(j) = \begin{cases} 1 : F_j > F_y \text{ and } j \notin A, \\ 0 : \text{otherwise ,} \end{cases}$$

33.2 Алгоритм

Далее мы алгоритм представленный в работе [BAG21].



Fig. 33.1: Принципиальная схема QkNN алгоритма. Взято из работы [BAG21].

Квантовый алгоритм поиска k ближайших соседей будет состоять из двух основных шагов:

1. Используй оракул $O_{y,A}$ (для алгоритма Гровера) мы находим k состояний $\{|\phi_{j1}\rangle, \dots, |\phi_{jk}\rangle\}$ для которых значение fidelity с тестовым состоянием максимально.
2. Найти преобладающую метку среди k найденных состояний и присвоить её тестовому состоянию.

Самой нетривиальной задачей для нас будет построение оракула $O_{y,A}$.

1. Вначале нужно составить оператор \mathcal{F} , который выполняет преобразование вида:

$$\mathcal{F}|j\rangle|0\rangle = |j\rangle|F_j\rangle$$

для $j \in \{0, \dots, M-1\}$. $|F_j\rangle$ - это одно из базисных состояний вычислительного базиса (выражающее двоичное представление числа F_j).

- Выполняется преобразование: $\xi^{amp}|j\rangle|0\rangle = |j\rangle|\psi_j\rangle$. В амплитуду состояния $|\psi_j\rangle$ закодирована информация о числе F_j . Делается это с помощью Swap test.

Swap test это применение контролируемой операции *Swap*, которым можно пользоваться для того, чтобы статистически определять fidelity: $F(\psi, \phi) = |\langle\psi|\phi\rangle|^2$ между двумя произвольными чистыми состояниями $|\psi\rangle$ и $|\phi\rangle$.

$$\begin{aligned} CSWAP(|0\rangle|\psi\rangle|\phi\rangle) &= |0\rangle|\psi\rangle|\phi\rangle \\ CSWAP(|1\rangle|\psi\rangle|\phi\rangle) &= |1\rangle|\psi\rangle|\phi\rangle \end{aligned}$$



Fig. 33.2: Схема Swap test

- Выполняется преобразование $\xi^{dig}|j\rangle|\psi_j\rangle = |j\rangle|F_j\rangle$
И тогда $\mathcal{F} = \xi^{dig}\xi^{amp}$.
2. Берём 2 пары регистров $i_1, f_1; i_2, f_2$. Инициализируются они в форме $|j\rangle_{i_1}|0\rangle_{f_1}|y\rangle_{i_2}|0\rangle_{f_2}$
Применяется \mathcal{F} на каждой паре:

$$\mathcal{F}(|j\rangle_{i_1}|0\rangle_{f_1})\mathcal{F}(|y\rangle_{i_2}|0\rangle_{f_2}) = |j\rangle_{i_1}|F_j\rangle_{f_1}|y\rangle_{i_2}|F_y\rangle_{f_2}$$

3. Теперь информация закодирована в регистры и нам нужно реализовать функцию $f_{y,A}$. И пусть \mathcal{C} это оператор, реализующий $f_{y,A}$.

$$\mathcal{C}(|j\rangle_{i_1}|F_j\rangle_{f_1}|y\rangle_{i_2}|F_y\rangle_{f_2}) = |j\rangle_{i_1}|0\rangle_{f_1}|f_{y,A}\rangle_{i_2}|0\rangle_{f_2}$$

Теперь займёмся вопросом конструирования оракула $O_{y,A}$. Просьба держаться за ваши кресла.

Вначале мы подготовим состояния. Но чтобы это сделать нам нужны оракулы \mathcal{V}, \mathcal{W} . Как их имплементировать указано в статье, которая указывалась выше.

$$\mathcal{V}|0^n\rangle = |\psi\rangle$$

$$\mathcal{W}|j\rangle|0^n\rangle = |j\rangle|\phi\rangle$$

для всех $j \in \{0, \dots, M - 1\}$.

- Инициализируем 4 регистра i, tr, tst, B с соответствующим количеством кубитов в каждом $m, n, n, 1$, где $n = \log(N), m = \log(M)$.

$$|j\rangle_i|0^{\otimes n}\rangle_{tr}|0^{\otimes n}\rangle_{tst}|0\rangle_B$$

2. Применяем \mathcal{W}

$$\mathcal{W}(|j\rangle_i|0^{\otimes n}\rangle_{tr}|0^{\otimes n}\rangle_{tst}|0\rangle_B) = |j\rangle_i|\phi_j\rangle_{tr}|0^{\otimes n}\rangle_{tst}|0\rangle_B$$

3. Применяем \mathcal{V}

$$\mathcal{V}(|j\rangle_i|\phi_j\rangle_{tr}|0^{\otimes n}\rangle_{tst}|0\rangle_B) = |j\rangle_i|\phi_j\rangle_{tr}|\psi_j\rangle_{tst}|0\rangle_B$$

4. Применяем swap test между тренировочным регистром tr и тестовым регистром tst , а регистр B будет выступать в качестве контрольного.

$$\frac{1}{2} [(|\phi_j\rangle|\psi\rangle_{tst} + |\psi_j\rangle|\phi\rangle_{tst})|0\rangle_B + (|\phi_j\rangle|\psi\rangle_{tst} - |\psi_j\rangle|\phi\rangle_{tst})|1\rangle_B] = |j\rangle_i|\psi_j\rangle_{tr,tst,B}$$

Определим U как унитарное преобразование, которое объединяет шаги 3-4. Кстати, если мы сейчас произведём измерение регистра B , то будем иметь

$$\begin{aligned} Pr(B=0) &= \frac{1+F_j}{2} \\ Pr(B=1) &= \frac{1-F_j}{2} \end{aligned}$$

На этом шаге информация о *fidelity* теперь закодирована в амплитуды. Теперь же мы должны перевести *fidelity* из амплитуды в число.

5. Теперь мы будем конструировать новый гейт G . Вообще говоря, он описан в работе [MKF19], где вы можете подробнее с ним ознакомиться.

$$G = U_{tr,tst,B} \mathcal{W}_{i,tr} S_{0_{tr,tst,B}} \mathcal{W}_{i,tr}^\dagger U_{tr,tst,B}^\dagger Z_B,$$

где Z_B – это действие гейта Z на регистре B , $S_0 = I - 2|0\rangle\langle 0|$.

6. Текущее состояние $|\psi\rangle_{tr,tst,B}$ может быть представлено в виде композиции двух состояний

$$|\psi_j\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}} (e^{i\pi\theta_j} |\psi_{j+}\rangle - e^{-i\pi\theta_j} |\psi_{j-}\rangle)$$

7. Теперь применяем алгоритм QPE (Quantum Phase Estimation), чтобы перевести значение фазы θ_j в числовое представление.

$$QPE(|\psi_j\rangle) = \frac{-i}{\sqrt{2}} |j\rangle_i [e^{i\pi\theta_j} |\theta_j\rangle_{ph} |\psi_{j+}\rangle_{tr,tst,B} - e^{-i\pi\theta_j} |1-\theta_j\rangle_{ph} |\psi_{j-}\rangle_{tr,tst,B}] = |j\rangle_i |\psi_{j,AE}\rangle_{ph,tr,tst,B}$$

8. Применяем алгоритм квантовой арифметики:

$$|j\rangle |F_j\rangle_{fid} |\psi_{j,AE}\rangle_{ph,tr,tst,B}$$

9. Обнуляем регистры ph, tr, tst, B и получаем $|j\rangle_i |F_j\rangle_{fid}$. На самом деле шаги 5-9 составляют оператор ξ^{dig} , который мы упоминали ранее.

10. Теперь применяем оператор \mathcal{F}

$$|j\rangle_{i1} |F_j\rangle_{f1} |y\rangle_{i2} |F_y\rangle_{f2}$$

11. Добавим кубит Q_1 для выполнения сравнения

$$J|a\rangle|b\rangle|0\rangle = \begin{cases} |a\rangle|b\rangle|1\rangle : a > b, \\ |a\rangle|b\rangle|0\rangle : a \leq b, \end{cases}$$

$$|j\rangle_{i1}|F_j\rangle_{f1}|y\rangle_{i2}|F_y\rangle_{f2}|g(j)\rangle_{Q_1},$$

где

$$g(j) = \begin{cases} 1 : F_j > F_y, \\ 0 : F_j \leq F_y, \end{cases}$$

По кубиту Q_1 мы сможем распознать все индексы j для которых $F_j > F_y$.

12. Обнуляем регистры $i2, f2$.

13. Добавляем ещё один кубит Q_2 для каждого $i_l \in A$, применяя гейт $D^{(i_l)}$

$$D^{(i_l)}|j\rangle|0\rangle = \begin{cases} |j\rangle|1\rangle : j = i_l, \\ |j\rangle|0\rangle : j \neq i_l, \end{cases}$$

на индексах регистра. И в результате получим состояние

$$|j\rangle_{i1}|F_j\rangle_{f1}|g(j)\rangle_{Q_1}|\chi_A(j)\rangle_{Q_2}$$

14. О да... Теперь мы добавляем ещё один кубит Q_3 . Применяем гейт X на кубите Q_2 и гейт Тoffoli с контролирующими (Q_1, Q_2) и целевой Q_3

$$|j\rangle_{i1}|F_j\rangle_{f1}|g(j)\rangle_{Q_1}|\chi_A(j)\rangle_{Q_2}|f_{y,A}(j)\rangle_{Q_3}$$

15. Обнуляем все регистры, кроме Q_3

$$|j\rangle_{i1}|f_{y,A}(j)\rangle_{Q_3}$$

Что ж, вот мы и построили преобразование $O_{y,A}$ которое так хотели

$$O_{y,A}|j\rangle|0\rangle = |j\rangle|f_{y,A}(j)\rangle$$

Part X

Вариационные схемы

CHAPTER
THIRTYFOUR

О БЛОКЕ “ВАРИАЦИОННЫЕ СХЕМЫ”

Этот блок включает в себя только вариационные квантовые схемы (VQC).

ВАРИАЦИОННЫЕ КВАНТОВЫЕ СХЕМЫ

Автор(ы):

- Синченко Семен

35.1 Описание лекции

На этой лекции мы впервые познакомимся непосредственно с квантовым машинным обучением. Лекция расскажет:

- в чем заключается идея квантово-классического обучения;
- что такое вариационное машинное обучение;
- как устроена вариационная квантовая схема и как закодировать в нее данные.

35.2 Введение

В течение всего курса будем говорить преимущественно о комбинированном квантово-классическом машинном обучении, построенном на базе вариационных квантовых схем. Именно он является наиболее перспективным в эпохи *NISQ*. Давайте забежим немного вперед и посмотрим, как выглядит типичный цикл такого обучения.

Красным цветом на диаграмме помечены блоки, выполняемые на квантовом устройстве, зеленым – те, что считает обычный компьютер. Квантовая часть, которая включает в себя операторы $\hat{U}(X)$ и $\hat{U}(\theta)$, а также измерение наблюдаемой \hat{M} , называется вариационной квантовой схемой. Именно ей посвящена данная лекция.

Но сначала сделаем шаг назад и обсудим в общих чертах идеи, которые лежат в основе квантово-классического обучения.

35.3 Квантово-классическое обучение

Основная идея квантово-классического обучения заключается в том, что в эпоху Noisy Intermediate-Scale Quantum (*NISQ*) у нас нет больших работающих квантовых компьютеров и квантовой памяти. Это сильно ограничивает применение алгоритмов, более быстрых, чем классические. Нам остается только “встраивать” квантовые схемы в классический цикл обучения.

В этом случае мы разделяем классическую и квантовую части алгоритма. Выполняем предварительную обработку и подготовку данных на классическом компьютере, затем “прогоняем” их через квантовую схему. Она должна возвращать нам “классические” данные, а значит, должна включать в себя набор последовательно применяемых операторов и измерение. Со стороны классического компьютера такая схема выглядит как



Fig. 35.1: Пример цикла смешанного обучения

“черный ящик” или “оракул”, с которым уже можно работать. Например, можно варьировать параметры схемы таким образом, чтобы она “обучалась” так же, как “обучаются” нейронные сети или другие алгоритмы классического машинного обучения.

Давайте более детально посмотрим на квантовую схему, которую можно использовать в таком подходе.

35.4 Вариационные квантовые схемы

В основе вариационных квантовых схем – Variational Quantum Circuits (**VQC**) – лежит простая идея. Чтобы проиллюстрировать ее, давайте сделаем схему, которая включает в себя набор унитарных операторов и переводит классические данные \mathbf{X} и параметры θ в квантовое состояние $\Psi(\theta, \mathbf{X})$. Затем будем варьировать наше состояние Ψ , меняя параметры θ так, чтобы при его измерении в каком-либо базисе мы получали нужный результат, например, результат классификации входных данных \mathbf{X} .

Разберем написанное выше на примере.

35.4.1 Аппроксимация матрицы Паули X оператором поворота

Из предыдущих лекций мы помним, что оператор $\hat{\mathbf{X}}$ работает как квантовый аналог оператора *NOT* – инвертирует значение кубита.

```
import pennylane as qml

dev = qml.device("default.qubit", 1)

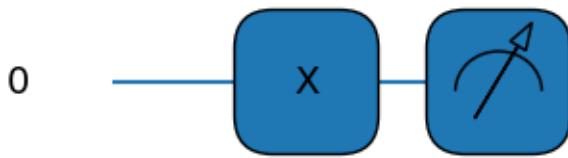
@qml.qnode(dev)
def simple_x_gate():
    qml.PauliX(0)
    return qml.expval(qml.PauliZ(0))

print(f"simple_x_gate() = {simple_x_gate()}")
```

/home/runnner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")

```
simple_x_gate() = tensor(-1., requires_grad=True)
```

```
qml.drawer.use_style("default")
fig, ax = qml.draw_mpl(simple_x_gate)()
fig.show()
```



С другой стороны, у нас есть оператор $\hat{R}\hat{X}(\phi)$, который “вращает” состояние нашего кубита вокруг оси **X** на угол ϕ . Сделаем параметризованную схему с одним параметром:

```

@qml.qnode(dev)
def vqc(phi):
    qml.RX(phi, wires=[0])
    return qml.expval(qml.Pauliz(0))
  
```

Теперь попробуем подобрать ϕ так, чтобы параметризованная схема работала точно так же, как оператор \hat{X} :

```

for i in [1.0, 2.0, 3.0, 3.14159265359]:
    print(f"Try {i}: {vqc(i)}")
  
```

```

Try 1.0: 0.5403023058681394
Try 2.0: -0.41614683654714246
Try 3.0: -0.9899924966004454
Try 3.14159265359: -0.9999999999999998
  
```

Получается, что нужный нам угол ϕ составляет ровно π . Это логично, мы могли бы это легко понять из простейших соображений линейной алгебры, либо взглянув на сферу Блоха. Но целью этого примера было проиллюстрировать работу VQC.

Наш процесс “подбора” параметра ϕ крайне примитивный, на следующих лекциях мы рассмотрим, как посчитать градиент параметров квантовой схемы и задействовать всю мощь известных на сегодня методов оптимизации. А пока еще немного подумаем о том, как можно закодировать данные в квантовую схему.

35.5 Кодирование данных в VQC

В конструировании VQC есть две важных части:

- кодирование классических данных в квантовые операторы;
- выбор наблюдаемой для измерений.

Вот как можно закодировать данные.

35.5.1 Кодирование поворотами

Один из самых популярных методов кодирования классических данных в квантовые схемы – это использование операторов поворота $\hat{R}Y, \hat{R}Z$. Представим, что мы хотим отображать вектор из двумерного пространства в один кубит $\vec{x} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$.

```
@qml.qnode(dev)
def angle_vqc(a, b):
    qml.RY(a, wires=[0])
    qml.RZ(b, wires=[0])

    return qml.expval(qml.PauliZ(0))
```

А теперь давайте посмотрим, как такая схема преобразует данные. Для этого сгенерируем набор случайных двумерных данных в диапазоне $[0, 2\pi]$ и применим к каждой точке нашей схемы, затем визуализируем результаты:

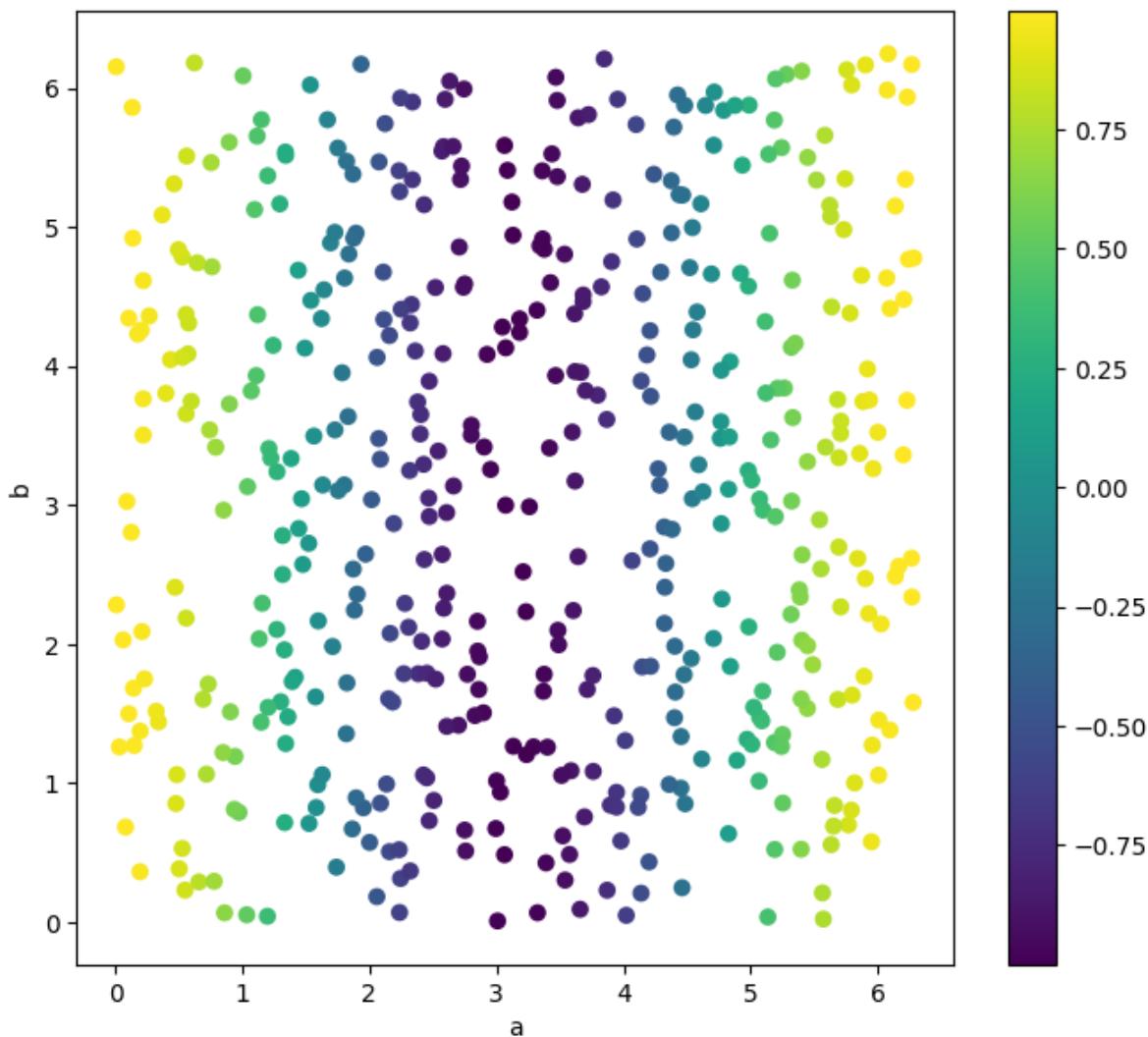
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

aa = np.random.uniform(0, 2 * np.pi, size=500)
bb = np.random.uniform(0, 2 * np.pi, size=500)

res = [angle_vqc(a, b) for a, b in zip(aa, bb)]

f = plt.figure(figsize=(8, 7))
clb = plt.scatter(aa, bb, c=res)
plt.xlabel("a")
plt.ylabel("b")
plt.colorbar(clb)

f.show()
```



Результат довольно необычный. Предсказать такое довольно сложно и хорошо видна возможность нелинейности VQC схем. В дальнейших лекциях мы будем более подробно разбирать возможные варианты кодирования данных. Кстати, кодирование углами настолько популярно, что в PennyLane для этого есть специальная функция, которая позволяет “поворнуть” сразу множество кубитов, используя список из классических данных:

```
@qml.qnode(dev)
def angle_vqc_pl(a, b):
    qml.templates.embeddings.AngleEmbedding([a], wires=[0], rotation="Y")
    qml.templates.embeddings.AngleEmbedding([b], wires=[0], rotation="Z")
    return qml.expval(qml.PauliZ(0))
```

Давайте убедимся, что это даст нам ровно тот же результат:

```
res_pl = [angle_vqc_pl(a, b) for a, b in zip(aa, bb)]
print(np.allclose(res, res_pl))
```

True

35.5.2 Важность многокубитных гейтов

При кодировании параметров целесообразно использовать многокубитные гейты, так как именно они создают запутанные состояния и раскрывают все преимущества квантовых компьютеров. Давайте попробуем это сделать.

```
dev2 = qml.device("default.qubit", 2)

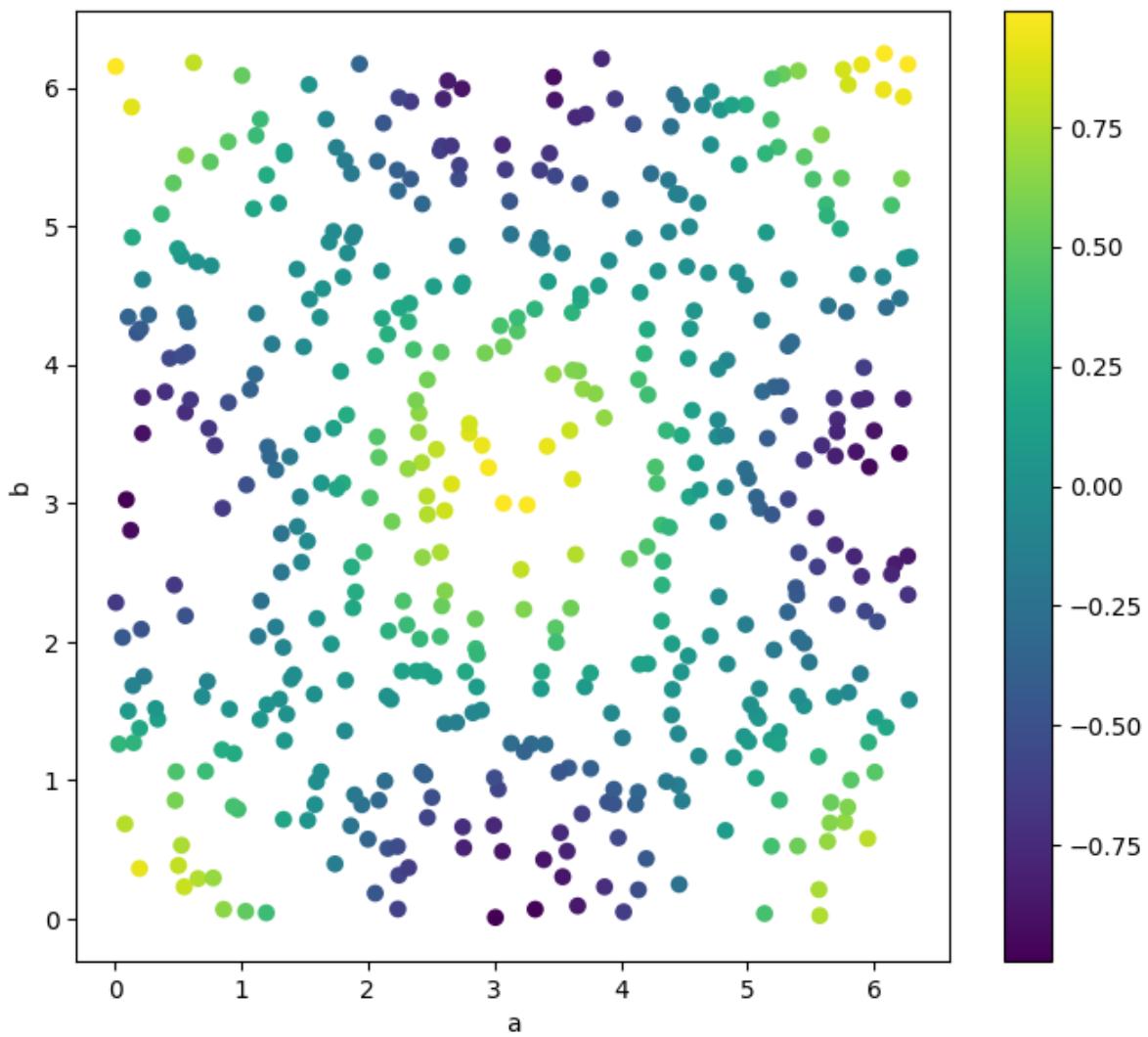
@qml.qnode(dev2)
def cnot_vqc(a, b):
    qml.RY(a, wires=0)
    qml.RY(b, wires=1)
    qml.RZ(a, wires=0)
    qml.RZ(b, wires=1)
    qml.CZ(wires=[0, 1])
    return qml.expval(qml.PauliZ(0) @ qml.PauliZ(1))
```

В этой схеме мы видим оператор $\hat{C}Z$, который создает запутанное состояние. Посмотрим, как такая схема преобразует наше исходное пространство случайных точек.

```
res = [cnot_vqc(a, b) for a, b in zip(aa, bb)]

f = plt.figure(figsize=(8, 7))
clb = plt.scatter(aa, bb, c=res)
plt.xlabel("a")
plt.ylabel("b")
plt.colorbar(clb)

plt.show()
```



Результат выглядит гораздо интереснее. В целом можно сказать, что выбор способа кодирования данных – один из важнейших при проектировании VQC. Мы еще много раз будем обсуждать способы сделать это.

35.6 Что мы узнали из лекции

- В эпоху NISQ мы чаще всего ограничены комбинированием квантового и классического машинного обучения.
- Ключевой элемент такого обучения – вариационные квантовые схемы (VQC). Основная идея VQC:
 - кодируем классические данные в квантовые операторы;
 - измеряем состояние;
 - варьируем параметры на классическом компьютере так, чтобы измерение давало желаемый результат.
- Один из широко применимых методов кодирования – использование операторов вращений $\hat{R}X$, $\hat{R}Y$, $\hat{R}Z$

Part XI

Квантовые градиенты

CHAPTER
THIRTYSIX

О БЛОКЕ “КВАНТОВЫЕ ГРАДИЕНТЫ”

Этот блок включает в себя обзор способов оценки градиента VQC.

Продвинутая тема блока рассказывает о квантовых градиентах старших порядков.

ГРАДИЕНТЫ КВАНТОВЫХ СХЕМ

Автор(ы):

- Синченко Семен

37.1 Описание лекции

В этой лекции мы детально разберем, как можно оптимизировать параметры VQC:

- Как выглядит цикл обучения квантовой схемы
- Как работает оценка градиента “под капотом”
 - Метод конечных отрезков
 - Parameter-shift rule

37.2 Введение

Как мы уже говорили ранее, VQC выступают в роли “черных ящиков”, которые имеют параметры и как-то преобразуют поступающие в них данные. В этом случае сам процесс оптимизации параметров выполняется на классическом компьютере. Одними из самых эффективных на сегодня методов решения задач непрерывной оптимизации являются градиентные методы. Для этих методов разработан широкий арсенал эвристик и приемов, который применяется в обучении классических глубоких нейронных сетей. Очень хочется применить весь этот арсенал и для квантового машинного обучения. Но как же посчитать градиент вариационной квантовой схемы?

37.3 Задача лекции

На этой лекции мы рассмотрим простую задачку по оптимизации параметров квантовой схемы и на ее примере увидим, как работают квантовые градиенты. В качестве задачи возьмем известный набор данных “Two Moon” из библиотеки scikit-learn:

```
from pennylane import numpy as np
import pennylane as qml
import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = 'retina'
from sklearn.datasets import make_moons
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
x, y = make_moons(n_samples=50)
```

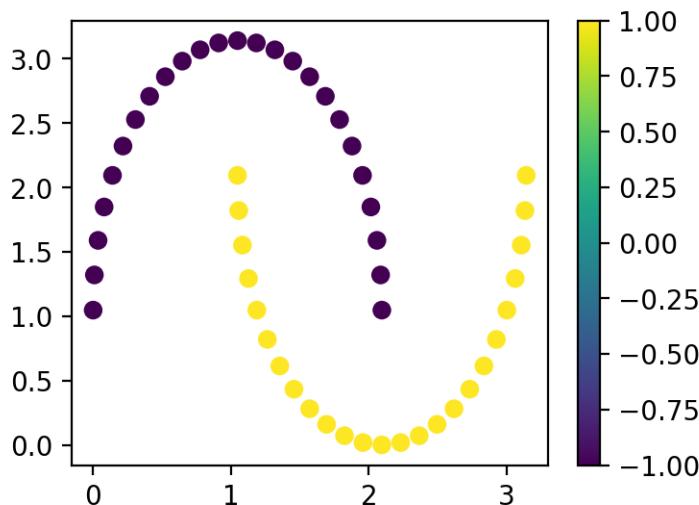
```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
  ↵hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
    warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Для удобства мы сразу переведем метки классов из $\{0, 1\} \rightarrow \{-1, 1\}$, а признаки \mathbf{X} переведем в $[0, \pi]$:

```
def normalize(x):
    """
    Переводит значения в интервал от 0 до pi
    """
    min_ = x.min()
    max_ = x.max()
    return np.pi * (x - min_) / (max_ - min_)

x[:, 0] = normalize(x[:, 0])
x[:, 1] = normalize(x[:, 1])
y = y * 2 - 1

plt.figure(figsize=(4, 3))
cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=y)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



37.4 Вариационная схема

Перед тем как мы начнем обучение и будем считать градиенты, нам необходимо определиться с тем, как будет выглядеть наша вариационная схема. Мы посвятим кодированию данных, выбору архитектуры схемы, а также измеряемого оператора еще много занятий. Так что пока просто воспользуемся кодированием признаков **X** вращениями, а сверху применим несколько параметризованных слоев вращений.

37.4.1 Кодирование признаков

```
dev = qml.device("default.qubit", 2)

def encoding(x1, x2):
    qml.RY(x1, wires=0)
    qml.RY(x2, wires=1)
    qml.RZ(x1, wires=0)
    qml.RZ(x2, wires=1)
    qml.CZ(wires=[0, 1])
```

37.4.2 Параметризованные слои

В качестве одного слоя обучения мы будем использовать параметризованные вращения в связке с двухкубитным гейтом для создания запутанных состояний.

Note: Более детально о запутанных состояниях, а также квантовой энтропии и черных дырах можно посмотреть в *продвинутой лекции* блока про квантовые вычисления.

В этой лекции у нас нет цели идеально решить поставленную задачу – на самом деле это чуть сложнее, чем может показаться на первый взгляд. Поэтому пока не будем излишне усложнять нашу **VQC**. Сделаем нашу **VQC** содержащей несколько “слоев” следующего вида:

- Вращение 1-го кубита $\hat{Rot}(\theta_1^1, \theta_1^2, \theta_1^3)$
- Вращение 2-го кубита $\hat{Rot}(\theta_2^1, \theta_2^2, \theta_2^3)$
- “Запутывающий” оператор, который действует на оба кубита сразу – в нашем случае это \hat{CZ}

Как видно, на каждый “слой” у нас приходится шесть параметров. Реализуем это в коде:

```
def layer(theta):
    qml.Rot(theta[0, 0], theta[0, 1], theta[0, 2], wires=0)
    qml.Rot(theta[1, 0], theta[1, 1], theta[1, 2], wires=1)
    qml.CZ(wires=[0, 1])
```

Здесь у нас вращения каждого из кубитов по сфере Блоха и двухкубитное взаимодействие \hat{CZ} .

37.4.3 Все вместе

Теперь давайте объединим все это вместе, добавим пару наблюдаемых и оформим как `qml.qnode`:

```
@qml.qnode(dev)
def node(x1, x2, q):
    encoding(x1, x2)
    for q_ in q:
        layer(q_)

    return qml.expval(qml.PauliZ(0) @ qml.PauliY(1))
```

37.4.4 Функция “скоринга”

Наша квантовая схема принимает на вход лишь одну точку данных, а у нас их 50. Поэтому удобно сразу написать функцию, которая может работать с массивами NumPy:

```
def apply_node(x, q):
    res = []

    for x_ in x:
        vqc_output = node(x_[0], x_[1], q[0])
        res.append(vqc_output + q[1])

    return res
```

Может показаться немного запутанно, но так получилось. Дело в том, что параметры схемы это только углы поворотов. Но мы также хотим добавить еще и смещение, поэтому `tuple` параметров у нас содержит два элемента: массив параметров схемы, а также значение смещения. Так как схема у нас принимает на вход лишь одну пару значений x_1, x_2 , то для того, чтобы “проскорить” массив данных мы должны:

- итерироваться по строкам двумерного массива
- для каждой строки вычислять результат схемы – это функция от x_1, x_2, θ – массив параметров θ у нас первый элемент `tuple`
- добавлять смещение – это второй элемент `tuple`
- результат добавлять в итоговый массив

Именно это и реализовано в коде.

37.4.5 Визуализация

Давайте инициализируем нашу схему случайными параметрами и посмотрим, как она “сходу” классифицирует данные. Возьмем 4 параметризованных слоя.

```
np.random.seed(42)
q = (np.random.uniform(-np.pi, np.pi, size=(4, 2, 3)), 0.0)

plt.figure(figsize=(4, 3))
cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=apply_node(x, q))
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



Как видно, результат “не очень” и наша цель – попытаться его улучшить.

37.5 Функция потерь

Прежде чем варьировать параметры схемы, нам для начала необходимо понять, а что именно мы хотим оптимизировать. Для этого нам необходимо выбрать функцию потерь.

Note: Если у Вас трудности с функциями потерь в таком контексте, то рекомендуем вернуться к вводной лекции про классическое машинное обучение, где эта тема раскрыта достаточно подробно.

37.5.1 Квадратичное отклонение

В качестве функции потерь, которая является дифференцируемой, мы будем использовать наиболее простой вариант – среднеквадратичное отклонения. Это не самый лучший выбор для задач классификации, но зато самый простой. Простой вариант – это именно то, что нам нужно в этой лекции:

```
def cost(q, x, y):
    preds = np.array(apply_node(x, q))
    return np.mean(np.square(preds - y))
```

37.5.2 Точность классификации

В качестве метрики качества среднеквадратичное отклонение вообще не подходит – понять по этой цифре, хорошо или плохо работает модель почти невозможно! Поэтому для оценки модели в целом мы будем использовать точность:

```
def acc(q, x, y):
    preds = np.sign(apply_node(x, q))
    res = 0
    for p_, y_ in zip(preds, y):
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

if np.abs(y_ - p_) <= 1e-2:
    res += 1

return res / y.shape[0]

```

37.6 Решение средствами PennyLane

Библиотека PennyLane может использовать один из нескольких движков для автоматического дифференцирования:

- NumPy Autograd
- PyTorch
- Tensorflow
- Jax

По больше части, на наших занятиях мы будем использовать NumPy из-за простоты и привычности. Перед тем как разбираться с тем, как же именно происходит дифференцирование квантовой схемы, давайте посмотрим на весь цикл обучения.

Note: Внимание, процесс обучения на обычном ноутбуке может занять около минуты! Это связано с трудностью симуляции квантового компьютера на классическом.

```

opt = qml.optimize.GradientDescentOptimizer(stepsize=0.05)
acc_ = []
cost_ = []
ii = []
for i in range(75):
    batch = np.random.randint(0, len(x), (10,))
    x_batch = x[batch, :]
    y_batch = y[batch]
    q = opt.step(lambda q_: cost(q_, x_batch, y_batch), q)

    if i % 5 == 0:
        ii.append(i)
        acc_.append(acc(q, x, y))
        cost_.append(cost(q, x, y))

```

```

/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/pennylane/_grad.py:95: UserWarning: Starting with PennyLane v0.21.0, when using Autograd, inputs have to explicitly specify requires_grad=True (or the argnum argument must be passed) in order for trainable parameters to be identified.
warnings.warn(

```

И посмотрим на получившиеся графики точности и функции потерь:

```

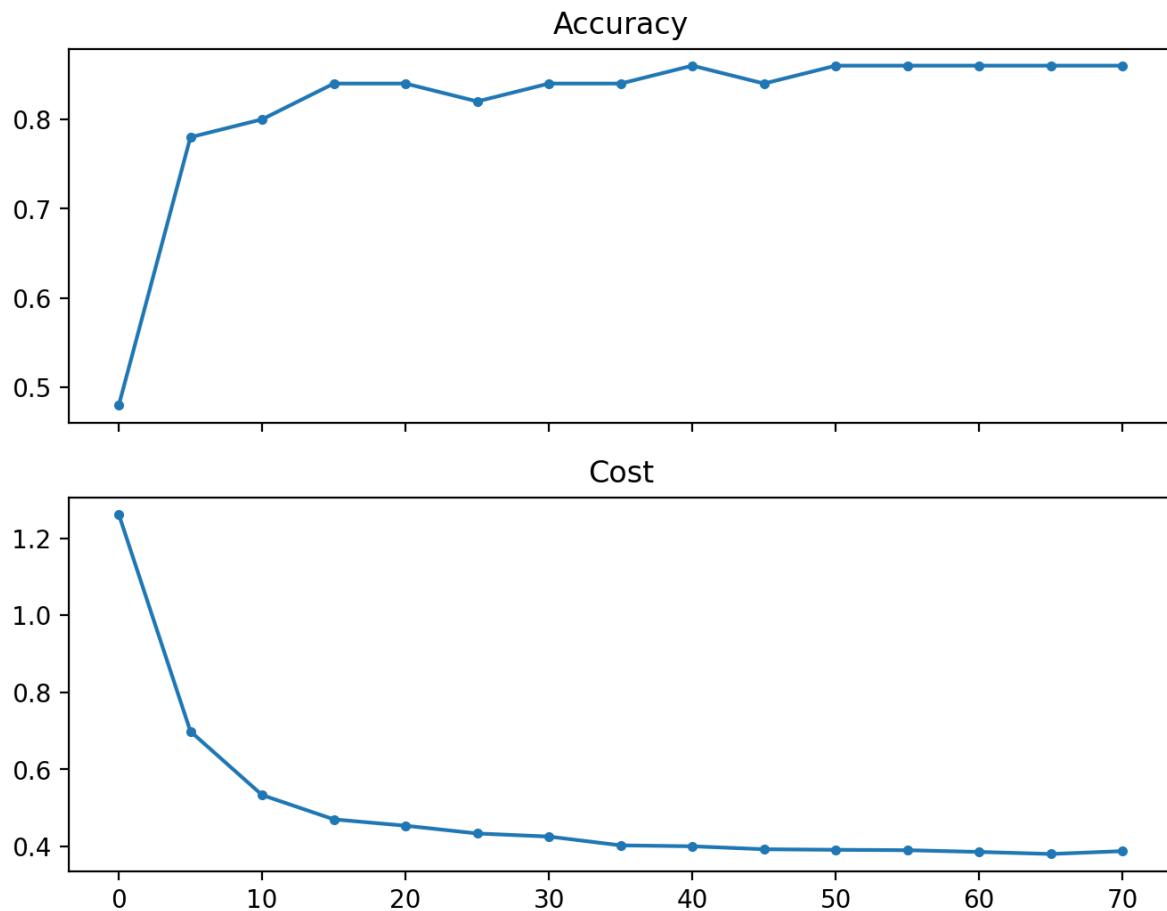
f, ax = plt.subplots(2, figsize=(8, 6), sharex=True)
ax[0].plot(ii, acc_, ".-")
ax[0].set_title("Accuracy")
ax[1].plot(ii, cost_, ".-")

```

(continues on next page)

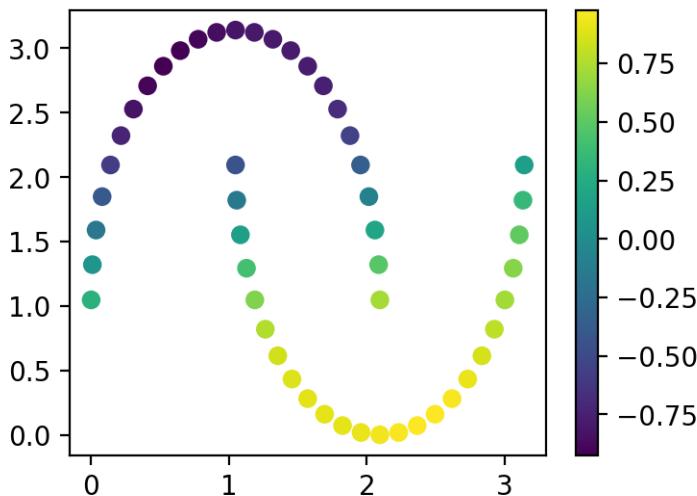
(continued from previous page)

```
ax[1].set_title("Cost")
plt.show()
```



А также на результаты классификации:

```
plt.figure(figsize=(4, 3))
cb = plt.scatter(x[:, 0], x[:, 1], c=apply_node(x, q))
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



37.7 А как оно работает?

Теперь, когда мы увидели процесс оптимизации квантовой схемы, давайте попробуем подумать, а как оно на самом деле работает?

37.7.1 Метод конечных отрезков

Для начала вспомним то, что является геометрическим (или визуальной) интерпретацией градиента функции. Правильно, градиент в каждой точке – это касательная. А приближенное значение угла наклона любой прямой можно найти, взяв конечные отрезки:

$$\frac{df}{dx} \simeq \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Давайте попробуем посчитать градиент нашей квантовой схемы. Для этого инициализируем ее заново случайными параметрами, а потом сравним это с тем значением, которое считает Autograd.

```
np.random.seed(42)
q = (np.random.uniform(0, np.pi, size=(4, 2, 3)), 0.0)

def naive_grad(cost, params, x, y, f0, delta):
    return (cost(params, x, y) - f0) / delta

def grad_i(q, f0, cost, x, y, i):
    new_params = q[0].copy().flatten()
    new_params[i] += 0.05

    return naive_grad(cost, (new_params.reshape(q[0].shape), q[1])), x, y, f0, 0.05
```

В качестве эталона возьмем тот градиент, который нам считает Autograd:

```
grad =qml.grad(cost, argnum=0)
```

Сравним первые пять значений Autograd с нашим наивным алгоритмом, взяв $\Delta = 0.05$:

Note: Осторожно! Так как мы считаем градиенты очень наивно и на всех точках сразу, то следующий блок кода работает долго!

```
autograd = grad(q, x, y)
f0 = cost(q, x, y)
pretty_print = ""
for i in range(10):
    g_i = grad_i(q, f0, cost, x, y, i)
    pretty_print += f"Naive grad: {g_i:.3f}\tAutograd result: {autograd[0].
    flatten()[i]:.3f}\n"

print(pretty_print)
```

Naive grad: -0.028	Autograd result: -0.029
Naive grad: 0.081	Autograd result: 0.081
Naive grad: 0.025	Autograd result: 0.025
Naive grad: 0.013	Autograd result: 0.008
Naive grad: -0.000	Autograd result: -0.011
Naive grad: 0.009	Autograd result: 0.004
Naive grad: 0.025	Autograd result: 0.025
Naive grad: 0.002	Autograd result: -0.003
Naive grad: -0.068	Autograd result: -0.069
Naive grad: 0.009	Autograd result: 0.004

Можно заметить, что даже с таким большим значением Δ наши оценки получились достаточно близкими к тем, которые получены в Autograd. Хотя, конечно, для некоторых значений расхождения заметны и иногда они даже в знаке частной производной.

37.7.2 Parameter-shift rule

Более точная оценка может быть получена методом, который называется **Parameter-shift**. Он основан на том, что для квантового “черного ящика” $\hat{U}(\theta)$, которым является наша схема, частная производная по параметру θ_i выражается так:

$$\nabla_{\theta_i} \langle \hat{U} \rangle(\theta) = \frac{1}{2} [\langle \hat{U} \rangle(\theta + \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_i) - \langle \hat{U} \rangle(\theta - \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_i)]$$

Note: Более строгую формулировку, а также вывод правила parameter-shift можно посмотреть в продвинутой лекции этого блока про производные высших порядков.

Если по-простому, то оценка частной производной по i -му параметру может быть получена вычислением сначала ожидаемого значения схемы с параметром θ_i , смещенным на $\frac{\pi}{2}$ в одну сторону, а потом – в другую. Давайте запишем это в коде, но перед этим давайте вспомним, как будет выглядеть производная функции потерь (а именно она нам нужна):

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_i} = \frac{\partial (\langle \hat{U} \rangle(\theta) - y)^2}{\partial \theta_i} = 2(\langle \hat{U} \rangle - y) \frac{\partial \langle \hat{U} \rangle}{\partial \theta_i}$$

Реализуем явно и наивно эту формулу в коде:

```

def parameter_shift_i(q, cost, x, y, i, y_hat):
    new_params = q[0].copy().flatten()
    new_params[i] += np.pi / 2

    forward = np.array(apply_node(x, (new_params.reshape(q[0].shape), q[1])))

    new_params = q[0].copy().flatten()
    new_params[i] -= np.pi / 2

    backward = np.array(apply_node(x, (new_params.reshape(q[0].shape), q[1])))

    diff = (y_hat - y)

    return np.mean(2 * diff * (0.5 * (forward - backward)))

```

И также проверим на первых 10 точках:

```

y_hat = apply_node(x, q)
pretty_print = ""
for i in range(10):
    g_i = parameter_shift_i(q, cost, x, y, i, y_hat)
    pretty_print += f"Naive grad: {g_i:.3f}\tAutograd result: {autograd[0].
    flatten()[i]:.3f}\n"

print(pretty_print)

```

Naive grad: -0.029	Autograd result: -0.029
Naive grad: 0.081	Autograd result: 0.081
Naive grad: 0.025	Autograd result: 0.025
Naive grad: 0.008	Autograd result: 0.008
Naive grad: -0.011	Autograd result: -0.011
Naive grad: 0.004	Autograd result: 0.004
Naive grad: 0.025	Autograd result: 0.025
Naive grad: -0.003	Autograd result: -0.003
Naive grad: -0.069	Autograd result: -0.069
Naive grad: 0.004	Autograd result: 0.004

Как видно, этот результат уже совпадает с тем, что делает “под капотом” PennyLane и Autograd. На самом деле, правило **parameter-shift** позволяет использовать много интересных хитростей и оптимизаций, но их не получится легко показать без погружения в математические детали метода.

37.8 Что мы узнали?

- Мы попробовали провести полный цикл оптимизации параметров VQC
- Научились использовать автоматический расчет градиентов в PennyLane
- Познакомились с двумя способами оценки градиента:
 - Метод конечных отрезков
 - Parameter-shift rule

ГРАДИЕНТЫ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

Автор(ы):

- Синченко Семен

38.1 План лекции

В этой лекции мы посмотрим на ту математику, которая лежит “под капотом” у *parameter-shift rule*. Мы познакомимся с обобщением *parameter shift*, а также увидим, как можно оптимизировать этот метод. В конце мы узнаем, как можно посчитать производную второго порядка за минимальное количество обращений к квантовому компьютеру.

Для более детального погружения в вопрос можно сразу рекомендовать статью [MBK21].

38.2 Важность гейтов вращений

Если задуматься, то одним из основных (если не единственных) способов сделать параметризованную квантовую схему является использование гейтов вращений, таких как $\hat{R}X$, $\hat{R}Y$, $\hat{R}Z$. Более формально это можно выразить так, что нас больше всего интересуют операторы вида:

$$U(\theta) = e^{-\frac{i}{2}H\theta}$$

где H – оператор “вращения”, который удовлетворяет условию $H^2 = \mathbf{1}$. Другой возможный вариант записи – представить матрицу H как линейную комбинацию операторов Паули $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$.

Если представить схему, содержащую множество параметризованных операторов, то итоговая запись имеет вид:

$$U_{j...k} = U_j, \dots, U_k \Psi$$

38.3 Производная от измерения

Давайте вспомним, как выглядит квантово-классическая схема обучения с VQC.

Видно, что мы хотим считать производную не от самой параметризованной схемы $U_{j...k}$, а от наблюдаемой. Для тех, кто забыл, что такое *наблюдаемая*, рекомендуем вернуться к *лекции про кубит*. Если кратко, то это тот оператор, который мы “измеряем” на нашем квантовом компьютере. Математически производная, которая нам интересна, может быть записана для выбранного параметра i таким образом:

$$G_i = \frac{\partial U_{j...k} \Psi \hat{M} U_{j...k} \Psi}{\partial \theta_i}$$



Fig. 38.1: Квантово-классическая схема

То есть нам важно посчитать производную от результата измерения, так как именно результат измерения у нас будет определять “предсказание” нашей квантовой нейронной сети. Причем нам нужно уметь считать производную от любого параметра θ_i в цепочке $\theta_j, \dots, \theta_i, \dots, \theta_k$.

38.4 Parameter-shift для гейтов Паули

Note: Тут мы для простоты предложим, что U_1 это просто оператор вращения, иначе выкладки станут совсем сложными.

Тогда сам оператор U_i может быть также записан так:

$$U_i = e^{-\frac{i}{2}P_i\theta_i}$$

Запишем результат математического ожидания через состояние Ψ_i , которое пришло на вход i -го гейта в нашей последовательности:

$$\langle M(\theta) \rangle = \text{Tr}(MU_{k,\dots,1}\rho_i U_{k,\dots,1}^\dagger)$$

где ρ это матрица плотности ($\Psi\Psi$). Подробнее о матрицах плотности можно почитать в ранней продвинутой лекции про смешанные состояния.

Тогда частная производная от математического ожидания по i -му параметру θ_i записывается (подробнее в [MNKF18]) через коммутатор исходного состояния ρ , которое “пришло” на вход гейта U_i и того оператора Паули P_i , который мы используем в U_i :

$$\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial \theta_i} = -\frac{i}{2} \text{Tr}(MU_{k,\dots,i}[P_i, U_{i-1,\dots,1}\rho_i U_{i-1,\dots,1}^\dagger]U_{k,\dots,i}^\dagger)$$

Этот коммутатор может быть переписан следующим образом:

$$[P_i, \rho] = i[U_i\left(\frac{\pi}{2}\right)\rho_i U_i^\dagger\left(\frac{\pi}{2}\right) - U_i\left(-\frac{\pi}{2}\right)\rho_i U_i^\dagger\left(-\frac{\pi}{2}\right)]$$

Тогда соответствующий градиент $\frac{\partial}{\partial \theta_i}$ можно записать через смещения на $\pm \frac{\pi}{2}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial \theta_i} &= \frac{\langle M_i^+ \rangle - \langle M_i^- \rangle}{2} \\ \langle M_i^\pm \rangle &= \frac{1}{2} \text{Tr}[MU_{k,\dots,i+1}U_i(\pm\frac{\pi}{2})\rho_i^{\circlearrowleft U_i^\dagger(\pm\frac{\pi}{2})U_{k,\dots,i+1}^\dagger}] \\ &\quad \rho_i^{\circlearrowleft} = U_{j,\dots,1}\rho_i U_{j,\dots,1}^\dagger \end{aligned}$$

По аналогии с классическими нейронными сетями и *backpropagation* (для тех, кто забыл это понятие, рекомендуем вернуться к вводным лекциям про классическое машинное обучение) тут явно можно выделить *forward* проход со смещением θ_i на значения $\frac{\pi}{2}$ и *backward* со смещением на $-\frac{\pi}{2}$.

38.5 Обобщенный parameter-shift

Предложенное в [MNKF18] выражение может быть на самом деле получено в более общем виде из других соображений. Так, выражение для нашей наблюдаемой $\langle M \rangle$ может всегда быть представлено [MBK21] как сумма вида:

$$U_i(\theta_i)\hat{M}U_i(\theta_i) = \hat{A} + \hat{B} \cos \theta_i + \hat{C} \sin \theta_i$$

где $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ – операторы, не зависящие от параметра θ_i .

Note: Действительно, явно выпишав выражение для наблюдаемой и вспомнив формулы для косинуса и синуса двойного угла, а также воспользовавшись тем, что $U(\theta) = e^{-\frac{1}{2}H\theta} = \cos \frac{\theta}{2}\mathbf{1} - i \sin \frac{\theta}{2}H$, получаем:

$$\begin{aligned} & (\cos \frac{\theta}{2}\mathbf{1} + i \sin \frac{\theta}{2}H)\hat{M}(\cos \frac{\theta}{2}\mathbf{1} - i \sin \frac{\theta}{2}H) = \\ & \cos^2 \frac{\theta}{2}\hat{M} + i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}H\hat{M} - i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}\hat{M}H + \sin^2 \frac{\theta}{2}H\hat{M}H = \\ & \frac{1}{2}\cos \theta\hat{M} + \frac{1}{2}\hat{M} + \frac{i}{2}\sin \theta H\hat{M} - \frac{i}{2}\sin \theta \hat{M}H + \frac{1}{2}H\hat{M}H - \frac{1}{2}\cos \theta H\hat{M}H = \\ & \frac{1}{2}(\hat{M} + H\hat{M}H) + \frac{1}{2}(\hat{M} - H\hat{M}H)\cos \theta + \frac{i}{2}(H\hat{M} - \hat{M}H)\sin \theta \end{aligned}$$

Тогда можно воспользоваться правилами тригонометрии, а именно, тем что для любого $s \neq k\pi$, $k \in 1, 2, \dots$, справедливо:

$$\begin{aligned} \frac{d \cos \theta}{d\theta} &= \frac{\cos(\theta + s) - \cos(\theta - s)}{2 \sin s} \\ \frac{d \sin \theta}{d\theta} &= \frac{\sin(\theta + s) - \sin(\theta - s)}{2 \sin s} \end{aligned}$$

И подставим это в выражение для $\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial \theta_i}$:

$$\frac{\partial \langle M(\theta_i) \rangle}{\partial \theta_i} = \frac{\langle M(\theta_i + s) \rangle - \langle M(\theta_i - s) \rangle}{2 \sin s}$$

Легко заметить, что подстановка сюда $s = \frac{\pi}{2}$ дает нам классический *parameter shift*, описанный в [MNKF18].

Наконец, запишем полученное выражение в более удобном виде, который позволит нам более эффективно выписывать производные высших порядков. Для этого введем вектор \mathbf{e}_i – единичный вектор для i -го параметра, то есть вектор, где все компоненты кроме i -й равны нулю, а i -я равна 1. Тогда наше финальное выражение для обобщенного *parameter shift* примет следующий вид:

$$\frac{\partial f(\mathbf{\theta})}{\partial \theta_i} = \frac{f(\mathbf{\theta} + s\mathbf{e}_i) - f(\mathbf{\theta} - s\mathbf{e}_i)}{2 \sin s}$$

38.6 Вторая производная и гессиан

В классической теории оптимизации, также как и в машинном обучении, очень часто на первый план выходят так называемые методы 2-го порядка. Эти методы похожи на обычный градиентный спуск, но для ускорения сходимости они также используют информацию из матрицы вторых производных, которая называется гессианом. Более подробно про методы 2-го порядка и гессиан можно посмотреть в вводных лекциях курса.

Методы второго порядка требуют больше вызовов, чтобы вычислить гессиан, но взамен они обеспечивают гораздо лучшую сходимость, а также менее склонны “застревать” в локальных минимумах. Это обеспечивает, в итоге, более быстрое обучение. В классических нейронных сетях вычисление гессиана это часто проблема, так как это матрица размерности $\sim O(N^2)$, где N – число весов нейронной сети, и эта матрица получается слишком большой. Но, как мы помним, основная “фича” VQC это их экспоненциальная экспрессивность – возможность линейным числом параметров (и гейтов) обеспечить преобразование, эквивалентное экспоненциальному числу весов классической нейронной сети. А значит, для них проблема размерности гессиана не стоит так остро. При этом использование гессиана теоретически позволяет в итоге обучить VQC за меньшее число вызовов. Именно

поэтому методы второго порядка потенциально очень интересны в квантово-классическом обучении. Но для начала нам необходимо разобраться, как именно можно посчитать матрицу вторых производных.

Пользуясь обобщенным правилом *parameter shift*, можно выписать выражение для второй производной [MBK21]:

$$\frac{\partial_2 f}{\partial \theta_i \theta_j} = \frac{f(\boxed{\cdot} + s_1 \mathbf{e}_i + s_2 \mathbf{e}_j) + f(\boxed{\cdot} - s_1 \mathbf{e}_i - s_2 \mathbf{e}_j) - f(\boxed{\cdot} + s_1 \mathbf{e}_i - s_2 \mathbf{e}_j) - f(\boxed{\cdot} - s_1 \mathbf{e}_i + s_2 \mathbf{e}_j)}{4 \sin s_1 \sin s_2}$$

Взяв $s_1 = s_2$, можно упростить это выражение к следующему виду:

$$\frac{f(\boxed{\cdot} + s\mathbf{a}) + f(\boxed{\cdot} + s\mathbf{b}) - f(\boxed{\cdot} + s\mathbf{c}) - f(\boxed{\cdot} + s\mathbf{d})}{(2 \sin s)^2}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= \mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j \\ \mathbf{b} &= -\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j \\ \mathbf{c} &= \mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j \\ \mathbf{d} &= -\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j\end{aligned}$$

Но чаще всего нам необходимо не просто посчитать гессиан, а еще и посчитать градиент, так как в большинстве методов 2-го порядка требуются оба эти значения. В этом случае хочется попробовать подобрать такое значение для s_g при вычислении вектора градиента, а также такое значение s_h при вычислении гессиана, чтобы максимально переиспользовать результаты квантовых вызовов и уменьшить их общее количество.

Внимательно взглянув на выражение для 2-х производных, можно заметить, что оптимизация там возможна при расчете диагональных элементов гессиана. Давайте выпишем выражение для диагонального элемента явно:

$$\frac{f(\boxed{\cdot} + 2s\mathbf{e}_i) + f(\boxed{\cdot} - 2s\mathbf{e}_i) - 2f(\boxed{\cdot})}{(2 \sin s)^2}$$

Можно заметить, что, например, использование $s = \frac{\pi}{4}$ для гессиана, а также “стандартного” $s = \frac{\pi}{2}$ для градиента позволит полностью переиспользовать в диагональных элементах гессиана значения, которые мы получили при расчете градиента. А значение $f(\boxed{\cdot})$ вообще считается один раз для всех диагональных вызовов.

Note: На самом деле, диагональные элементы гессиана можно использовать и сами по себе, например для квазиньютоновских методов оптимизации, где матрица Гессе аппроксимируется какой-то другой матрицей, чтобы не считать все вторые производные. Например, она может быть аппроксимирована диагональной матрицей, как в работе [And19].

38.7 Заключение

В этой лекции мы познакомились с классическим *parameter shift rule*, а также его обобщением. Также мы узнали, как можно посчитать гессиан VQC, и даже узнали маленькие хитрости, которые можно применять для уменьшения общего количества вызовов квантовой схемы.

Part XII

Квантовый SVM

CHAPTER
THIRTYNINE

О БЛОКЕ “КВАНТОВЫЙ SVM”

Этот блок включает в себя только квантово-классический SVM.

Продвинутая тема блока дополнительно рассказывает о классическом SVM.

КВАНТОВО-КЛАССИЧЕСКИЙ SVM

Автор(ы):

- Синченко Семен

40.1 Описание лекции

Лекция будет построена следующим образом:

- посмотрим, как можно использовать **VQC** как ядро SVM;
- напишем и применим код обучения смешанного SVM.

Перед тем как приступить, рекомендуется освежить *материал* по классическому методу опорных векторов, в частности, нужно понимать, как работает ядерный трюк.

40.2 VQC как ядерная функция

Как мы много говорили в более ранних лекциях, квантовые схемы позволяют нам оперировать в гильбертовых пространствах волновых функций. Эти пространства имеют экспоненциально большую размерность, при этом они параметризуются линейным количеством параметров. А еще в этих пространствах определены скалярные произведения волновых функций, более того, именно результат выборки из скалярного произведения мы чаще всего и получаем как результат измерений!

Давайте попробуем посмотреть, что общего у **VQC** и ядер.

- оба оперируют в пространстве большой (или бесконечной размерности);
- и там, и там работа идет в гильбертовом пространстве и определено скалярное произведение;
- и там, и там результат вычисляется как скалярное произведение.

Note: Это интересно, что многие специалисты в области **QML** сегодня даже предлагают вместо термина “квантовая нейросеть” использовать термин “квантовое ядро”, так как математически **VQC** гораздо ближе именно к ядрам, чем к слоям современных глубоких сетей.

Очевидная идея – попробовать как-то воспользоваться квантовой схемой, чтобы реализовать скалярное произведение двух классических векторов. Именно это и сделали авторы работы [[HavlivcekCorcolesT+19](#)].

40.2.1 Преобразование состояния

На самом деле, если просто использовать какие-то простые квантовые операции, мы не получим какого-то преимущества над классическим ядерным SVM – ведь все то же самое можно будет сделать и на классическом компьютере.

Чтобы получить реальное преимущество, нам необходимо использовать запутывание и прочие “фишки” квантовых вычислений.

Дальше мы не станем изобретать велосипеды, а вместо этого воспользуемся примерами хороших преобразований из работы [SYG+20]. Рассмотрим, что именно там описано.

Общая схема

Для простоты формул мы не будем выписывать обобщенные формулы, а все будем писать для нашего двумерного пространства. Тогда наша схема может быть разделена на несколько частей:

- гейты Адамара и гейты $CNOT$;
- операции, основанные на элементах входного вектора;
- попарные операции над парами элементов вектора.

Мы начинаем с того, что переводим кубиты в состояние суперпозиции, применяя операторы Адамара. Далее мы применяем однокубитные параметризованные операции и снова гейты Адамара. После этого мы применяем связку $CNOT \rightarrow$ параметризованная парой операция $\rightarrow CNOT$.

Выбор операции

Следуя идеи упомянутой статьи, в качестве что одно-элементной, что двух-элементной операции мы будем использовать гейт U_1 . Разница будет лишь в том, что мы передаем на вход в качестве параметра.

Feature function

В качестве параметров на входе гейта U_1 , как мы уже говорили, выступают один или два элемента вектора x . Строго это можно записать как функцию такого вида:

$$\phi(x_1, x_2) = \begin{cases} \phi(x), & x_1 = x_2 \\ \phi(x_1, x_2), & x_1 \neq x_2 \end{cases}$$

Мы будем называть ее *feature function*. В некотором смысле можно сказать, что именно эта функция определяет тип ядра по аналогии с классическим SVM. В работе [SYG+20] описано много разных вариантов таких *feature function*, мы будем использовать следующую:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= x \\ \phi(x_1, x_2) &= \pi \cos x_1 \cos x_2 \end{aligned}$$

Скалярное произведение

Все что мы описали выше, обозначим как квантовую схему $U(x)$. Она преобразует нам вектор классических данных x в квантовое состояние Ψ . Но нам то нужно получить скалярное произведение $U(x_1)|U(x_2)!$ Выглядит сложно, но на самом деле существует эффективный способ получить эту величину без необходимости восстанавливать весь вектор состояния. Можно показать, что величина $U(x_1)|U(x_2)$ равна вероятности нулевой битовой строки $(0, 0, \dots, 0)$ при измерении другой схемы: $U(x_1)U(x_2)^\dagger$.

Все это может казаться сложным и запутанным, но должно стать гораздо понятнее, когда мы посмотрим на пример реализации от начала и до конца.

40.3 Пример реализации

40.3.1 Схема

Для начала необходимые импорты.

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np
from sklearn.datasets import make_moons

import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = 'retina'
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
  -hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
    warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Помимо всех привычных, нам еще потребуется классический SVM из scikit-learn:

```
from sklearn.svm import SVC
```

Мы будем работать с уже привычным нам набором “Tow Moons”. Только в этом случае мы будем использовать чуть-чуть другую нормализацию – для нашего ядра элементы вектора x должны быть в интервале $[-1, 1]$. Сразу переведем наши данные в этот диапазон:

```
def normalize(x):
    """Переводит значения в интервал от -1 до 1"""

    return 2 * (x - x.min()) / (x.max() - x.min()) - 1

x_samples, y_samples = make_moons(n_samples=50)
y_samples = y_samples * 2 - 1

x_samples[:, 0] = normalize(x_samples[:, 0])
x_samples[:, 1] = normalize(x_samples[:, 1])

plt.figure(figsize=(4, 3))
cb = plt.scatter(x_samples[:, 0], x_samples[:, 1], c=y_samples)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



И привычное нам объявление устройства.

```
dev = qml.device("default.qubit", 2)
```

Теперь давайте для начала реализуем наше преобразование над одним из векторов ($U(x)$).

```
def var_layer(x):
    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.Hadamard(wires=1)

    qml.U1(x[0], wires=0)
    qml.U1(x[1], wires=1)

    qml.Hadamard(wires=0)
    qml.Hadamard(wires=1)

    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    qml.U1(np.pi * np.cos(x[0]) * np.cos(x[1]), wires=1)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
```

А теперь реализуем

$$U(x_1)|U(x_2) = U(x_1)U(x_2)^\dagger \Psi M_0 U(x_1)U(x_2)^\dagger \Psi,$$

где M_0 – проектор на один из собственных векторов системы кубитов, а именно на “нулевой”:

$$M_0 = 0, \dots, 00, \dots, 0.$$

Проще говоря, мы реализуем схему, которая нам дает вероятности каждой из битовых строк (а дальше мы просто возьмем первую, она и отвечает строке 0, ...0):

```
@qml.qnode(dev)
def dot_prod(x1, x2):
    var_layer(x1)
    qml.adjoint(var_layer)(x2)

    return qml.probs(wires=[0, 1])
```

Ну и сразу вспомогательную функцию, которая нам считает то, что нам было нужно:

```
def q_dot_prod(x, i, j):
    x1 = (x[i, 0], x[i, 1])
    x2 = (x[j, 0], x[j, 1])

    return dot_prod(x1, x2)[0]
```

Для самопроверки убедимся в том, что наше “скалярное произведение” симметрично:

```
print(np.allclose(q_dot_prod(x_samples, 0, 1), q_dot_prod(x_samples, 1, 0)))
```

True

И сразу посмотрим на то, как выглядит наша схема:

```
print(qml.draw(dot_prod)(x_samples, y_samples))
```

```
0: —H—U1 (M0)—H—C—————C—C—————C—H—U1 (-1)—H—C Probs
 1: —H—U1 (M1)—H—X—U1 (M2) —X—U1 (-0.917)—X—H—U1 (1)—H—C Probs
M0 =
[ 0.           -0.82136721]
M1 =
[0.13807119  0.60947571]
M2 =
[3.11169508  1.7547866 ]
```

40.3.2 Гибридный SVM

Мы не будем сами с нуля писать решение задачи квадратичного программирования, просто воспользуемся готовой рутиной из `scikit-learn`. Используемая там реализация позволяет вместо ядерной функции передать сразу матрицу Грамма (Gram matrix). На самом деле это просто матрица всех попарных скалярных произведений наших векторов. Вычислим ее, сразу воспользовавшись тем, что

$$U(x)|U(x) = 1 \quad \text{и} \quad U(x_1)|U(x_2) = U(x_2)|U(x_1)$$

```
gram_mat = np.zeros((x_samples.shape[0], x_samples.shape[0]))

for i in range(x_samples.shape[0]):
    for j in range(x_samples.shape[0]):
        if i == j:
            gram_mat[i, j] = 1
        if i > j:
            r = q_dot_prod(x_samples, i, j)
            gram_mat[i, j] = r
            gram_mat[j, i] = r
```

Обучим нашу модель:

```
model = SVC(kernel="precomputed")
model.fit(gram_mat, y_samples)
```

```
SVC(kernel='precomputed')
```

Посчитаем предсказания и посмотрим на результат:

```
preds = model.predict(X=gram_mat)

plt.figure(figsize=(4, 3))
cb = plt.scatter(x_samples[:, 0], x_samples[:, 1], c=preds)
plt.colorbar(cb)
plt.show()
```



Результат выглядит неплохо!

40.4 Заключение

Расчет полной матрицы скалярных произведений дает нам сложность $O(N^2)$ вызовов. Но основной потенциал гибридного SVM в том, что задачу квадратичной оптимизации на самом деле можно тоже решать на квантовом компьютере, используя алгоритм Гровера (про него рассказано в ранних лекциях), причем за сложность всего $O(N)$ и без расчета полной матрицы Грама!

Многие считают, что NISQ квантовые компьютеры могут стать для SVM чем-то типа видеокарт для нейронных сетей и вернуть этот алгоритм на пьедестал лучших алгоритмов машинного обучения!

КЛАССИЧЕСКИЙ SVM

Автор(ы):

- Кашницкий Юрий

41.1 Описание лекции

В этой лекции мы рассмотрим классический метод опорных векторов (SVM) и разберем стоящую за ним математику. С согласия Евгения Соколова, мы во многом переиспользуем конспекты лекций курса “Машинное обучение”, читаемого на ФКН ВШЭ.

План лекции такой:

- линейная классификация;
- интуиция метода опорных векторов;
- метод опорных векторов для линейно-разделимой выборки;
- метод опорных векторов для линейно-неразделимой выборки;
- решение задачи метода опорных векторов;
- ядерный переход;
- плюсы и минусы SVM.

41.2 Линейная классификация

Основная идея линейного классификатора заключается в том, что признаковое пространство может быть разделено гиперплоскостью на два полупространства, в каждом из которых прогнозируется одно из двух значений целевого класса. Если это можно сделать без ошибок, то обучающая выборка называется *линейно разделимой*.

Рассмотрим задачу бинарной классификации, в которой $\mathbb{X} = \mathbb{R}^d$ – пространство объектов, $Y = \{-1, +1\}$ – множество допустимых ответов (целевой признак), $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^\ell$ – обучающая выборка. Будем класс $+1$ называть положительным, а класс -1 – отрицательным. Здесь d – размерность признакового пространства, ℓ – количество примеров в обучающей выборке.

Линейная модель классификации определяется следующим образом:

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle + b) = \text{sign}\left(\sum_{j=1}^d w_j x_j + b\right),$$

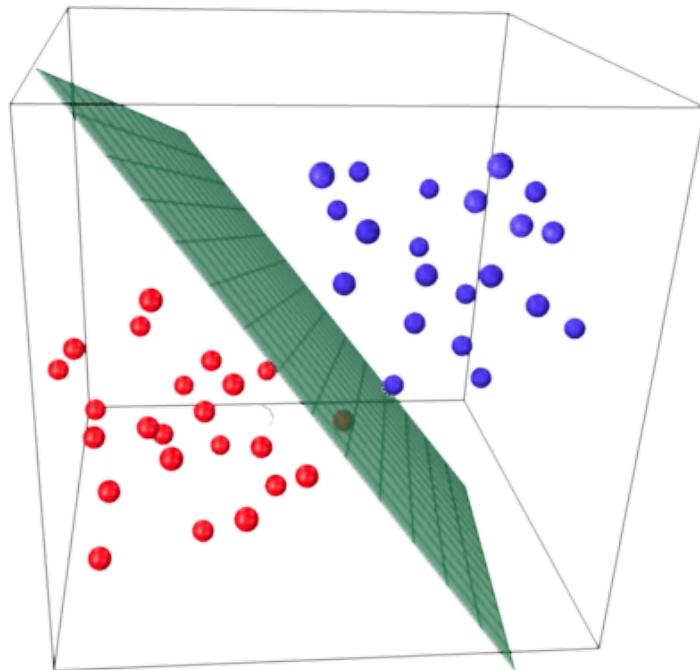


Fig. 41.1: Линейная классификация

где $w \in \mathbb{R}^d$ – вектор весов, $b \in \mathbb{R}$ – сдвиг (bias), $\text{sign}(\cdot)$ – функция “сигнум”, возвращающая знак своего аргумента, $a(x)$ – ответ классификатора на примере x .

Note: Хорошо бы для векторов ставить стрелку и писать \vec{w} , но мы этого не будем делать, предполагая, что из контекста ясно, что вектор, а что скаляр. В частности, в формуле выше w и x – вектора, а $a(x)$, w_j , x_j , d и b – скаляры.

Часто считают, что среди признаков есть константа, $x_{d+1} = 1$. В этом случае нет необходимости вводить сдвиг b , и линейный классификатор можно задавать как

$$a(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle.$$

Геометрически линейный классификатор соответствует гиперплоскости с вектором нормали w , которая задается уравнением $\langle w, x \rangle = 0$. Величина скалярного произведения $\langle w, x \rangle$ пропорциональна расстоянию от гиперплоскости до точки x , а его знак показывает, с какой стороны от гиперплоскости находится данная точка. Если быть точным, расстояние от точки с радиус-вектором x_A до плоскости $\langle w, x \rangle = 0$:

$$\rho(x_A, \langle w, x \rangle = 0) = \frac{\langle w, x_A \rangle}{\|w\|}.$$

Упражнение на метод Лагранжа

Метод Лагранжа – очень важный метод оптимизации функций при наличии ограничений. Этот же метод вовсю используется ниже в методе опорных векторов.

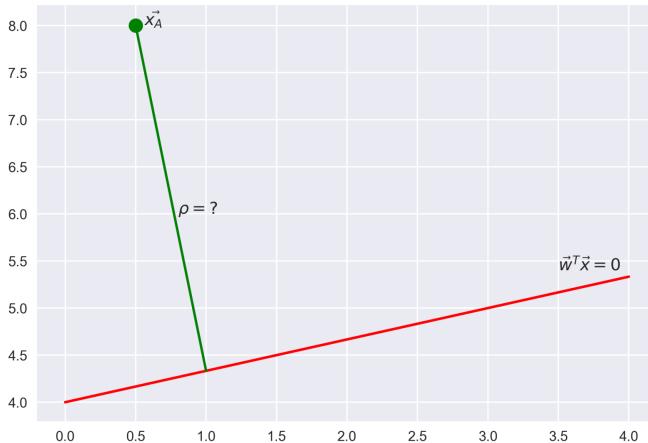


Fig. 41.2: Расстояние от точки до плоскости

Рекомендуется ознакомиться с методом Лагранжа и решить (ручками!) простую оптимизационную задачу вида

$$\begin{cases} x + y \rightarrow \min_{x,y} \\ x^2 + y^2 = 1 \end{cases} \quad (41.1)$$

$$x^2 + y^2 = 1$$

А мы выведем указанную выше формулу расстояния от точки до плоскости. Вообще это можно сделать разными способами – алгебраически и геометрически. Но давайте посмотрим на эту задачу (внезапно) как на задачу оптимизации и решим ее методом Лагранжа. Это послужит неплохой тренировкой перед тем как окунуться в SVM.

Итак, представим задачу в таком виде: хотим найти точку x на плоскости $\langle w, x \rangle = 0$ такую, что расстояние от x до точки x_0 минимально:

$$\begin{cases} \rho(x, x_0) \rightarrow \min_x \\ \langle w, x \rangle = 0 \end{cases} \quad (41.2)$$

$$\langle w, x \rangle = 0$$

Лагранжиан: $\mathcal{L}(x, \lambda) = \|x - x_0\|^2 + 2\lambda \langle w, x \rangle$. Тут мы для $\rho(x, x_0)$ подставили квадрат расстояния $\|x - x_0\|^2$ (такой переход от расстояния к его квадрат хорошо бы обосновать монотонностью оптимизируемой функции, но мы это опустим), а также перед коэффициентом λ для удобства поставили 2, что несущественно.

Далее надо приравнять нулю частные производные лагранжиана по его аргументам. Из $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = 0$ получаем: $2(x - x_0) + 2\lambda w = 0 \Rightarrow x = x_0 - \lambda w$.

Теперь умножим это уравнение скалярно на w и выразим λ :

$$\langle w, x \rangle = \langle w, x_0 \rangle - \lambda \|w\|^2 \Rightarrow \lambda = \frac{\langle w, x_0 \rangle}{\|w\|^2}$$

Тогда наконец

$$\min_{x, \langle w, x \rangle = 0} \rho(x, x_0) = \|x - x_0\| = \|(x_0 - \lambda w) - x_0\| = |\lambda| \|w\| = \frac{\langle w, x_0 \rangle}{\|w\|} \quad \square.$$

Таким образом, линейный классификатор разделяет пространство на две части с помощью гиперплоскости, и при этом одно полупространство относит к положительному классу, а другое – к отрицательному.

Пожалуй, самый известный и популярный на практике представитель семейства линейных классификаторов – логистическая регрессия. На русском языке про нее можно почитать в [статье](#) открытого курса по машинному обучению или в упомянутых [лекциях](#) Евгения Соколова. В этих лекциях также объясняется, как происходит обучение модели (подбор весов w) за счет минимизации функции потерь.

41.2.1 Отступ классификации

Оказывается полезным рассмотреть выражение $M(x_i, y_i, w) = y_i \cdot \langle w, x \rangle$.

Это **отступ классификации** (margin) для объекта обучающей выборки (x_i, y_i) . К сожалению, его очень легко перепутать с зазором классификации, который появится чуть ниже в изложении интуиции метода опорных векторов. Чтобы не путать: отступ определен на конкретном объекте обучающей выборки.



Fig. 41.3: Иллюстрация к понятию отступа классификации

Отступ – это своего рода “уверенность” модели в классификации объекта (x_i, y_i) :

- если отступ большой (по модулю) и положительный, это значит, что метка класса поставлена правильно, а объект находится далеко от разделяющей гиперплоскости (такой объект классифицируется уверенно). На рисунке – x_3 .

- если отступ большой (по модулю) и отрицательный, значит метка класса поставлена неправильно, а объект находится далеко от разделяющей гиперплоскости (скорее всего такой объект – аномалия, например, его метка в обучающей выборке поставлена неправильно). На рисунке – x_1 .
- если отступ малый (по модулю), то объект находится близко к разделяющей гиперплоскости, а знак отступа определяет, правильно ли объект классифицирован. На рисунке – x_2 и x_4 .

Далее увидим, что понятие отступа классификации – часть функции потерь, которая оптимизируется в методе опорных векторов.

41.3 Интуиция метода опорных векторов

Метод опорных векторов (Support Vector Machine, SVM) основан на идее максимизации зазора между классами. Пока не вводим этот термин формально, но передадим интуицию метода. На Рис. Fig. ?? показана линейно-разделимая выборка, кружки соответствуют положительным примерам, а квадраты – отрицательным (или наоборот), а оси – некоторым признакам этих примеров. На рисунке слева показаны две прямые (в общем случае – гиперплоскости), разделяющие выборку. Кажется, что синяя прямая лучше тем, что она дальше отстоит от примеров обучающей выборки, чем красная прямая (зазор – больше), и потому лучше будет разделять другие примеры из того же распределения, что и примеры обучающей выборки. То есть такой линейный классификатор будет лучше обобщаться на новые данные. Теория подтверждает описанную интуицию [MRT18].



Fig. 41.4: Слева показаны две прямые (в общем случае – гиперплоскости), разделяющие выборку. Справа показана прямая, максимизирующая зазор между классами. Источник: [лекция Cornell](#)

Note: Одним из ключевых авторов алгоритма SVM является Владимир Вапник – советский и американский (с 1991-го года) ученый, который также сделал огромный вклад в теорию классического машинного обучения. Его имя носит одно из ключевых теоретических понятий машинного обучения – размерность Вапнича-Червоненкиса.

41.4 Метод опорных векторов для линейно-разделимой выборки

Будем рассматривать линейные классификаторы вида

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle + b), \quad w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}.$$

Заметьте, что мы вернули сдвиг (bias) b . Будем считать, что существуют такие параметры w_* и b_* , что соответствующий им классификатор $a(x)$ не допускает ни одной ошибки на обучающей выборке. В этом случае говорят, что выборка **линейно разделима**.

Заметим, что если одновременно умножить параметры w и b на одну и ту же положительную константу, то классификатор не изменится. Распорядимся этой свободой выбора и отнормируем параметры так, что

$$\min_{x \in X} |\langle w, x \rangle + b| = 1.$$

Как мы увидели выше, расстояние от произвольной точки $x_0 \in \mathbb{R}^d$ до гиперплоскости, определяемой данным классификатором, равно

$$\rho(x_0, a) = \frac{|\langle w, x_0 \rangle + b|}{\|w\|}.$$

Тогда расстояние от гиперплоскости до ближайшего примера из обучающей выборки равно

$$\min_{x \in X} \frac{|\langle w, x \rangle + b|}{\|w\|} = \frac{1}{\|w\|} \min_{x \in X} |\langle w, x \rangle + b| = \frac{1}{\|w\|}.$$

Данная величина также называется **зазором** (margin). Опять же, эту величину очень легко перепутать с отступом классификации, про который мы говорили выше и который тоже margin в англоязычном варианте. Заметим, что отступ – функция параметров w и конкретного примера обучающей выборки (x_i, y_i) , а зазор – функция только параметров w при описанном трюке с нормировкой w и b (в противном случае зазор – также функция сдвига b и всех примеров x).

Таким образом, если классификатор без ошибок разделяет обучающую выборку, то ширина его разделяющей полосы равна $\frac{2}{\|w\|}$. Максимизация ширины разделяющей полосы приводит к повышению обобщающей способности классификатора [MRT18]. На повышение обобщающей способности направлена и регуляризация, которая штрафует большую норму весов – а чем больше норма весов, тем меньше ширина разделяющей полосы.

Итак, требуется построить классификатор, идеально разделяющий обучающую выборку, и при этом имеющий максимальный отступ.

Запишем соответствующую оптимизационную задачу, которая и будет определять метод опорных векторов для линейно разделимой выборки (hard margin support vector machine):

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|w\|^2 \rightarrow \min_{w, b} \\ y_i (\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{cases}$$

Здесь мы воспользовались тем, что линейный классификатор дает правильный ответ на примере x_i тогда и только тогда, когда $y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 0$ (вспомним, что $M_i = y_i(\langle w, x_i \rangle + b)$ – отступ классификации для примера (x_i, y_i) обучающей выборки). Более того, из условия нормировки $\min_{x \in X} |\langle w, x \rangle + b| = 1$ следует, что $y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1$.

В данной задаче функционал является строго выпуклым, а ограничения линейными, поэтому сама задача является выпуклой и имеет единственное решение. Более того, задача является квадратичной и может быть решена крайне эффективно.

41.5 Метод опорных векторов для линейно-неразделимой выборки

Рассмотрим теперь общий случай, когда выборку невозможно идеально разделить гиперплоскостью. Это означает, что какие бы w и b мы ни взяли, хотя бы одно из ограничений в предыдущей задаче будет нарушено:

$$\exists x_i \in X : y_i(\langle w, x_i \rangle + b) < 1.$$

Сделаем эти ограничения *мягкими*, введя штраф $\xi_i \geq 0$ за их нарушение:

$$y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, \ell.$$

Отметим, что если отступ объекта лежит между нулем и единицей ($0 \leq y_i(\langle w, x_i \rangle + b) < 1$), то объект верно классифицируется, но имеет ненулевой штраф $\xi > 0$. Таким образом, мы штрафуем объекты за попадание внутрь разделяющей полосы.

Величина $\frac{1}{\|w\|}$ в данном случае называется **мягким зазором** (soft margin). С одной стороны, мы хотим максимизировать зазор, с другой – минимизировать штраф за неидеальное разделение выборки $\sum_{i=1}^{\ell} \xi_i$.

Эти две задачи противоречат друг другу: как правило, излишняя подгонка под выборку приводит к маленькому зазору, и наоборот – максимизация зазора приводит к большой ошибке на обучении. В качестве компромисса будем минимизировать взвешенную сумму двух указанных величин.

Приходим к оптимизационной задаче, соответствующей методу опорных векторов для линейно неразделимой выборки (soft margin support vector machine):

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \rightarrow \min_{w, b, \xi} \\ y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{cases}$$

Чем больше здесь параметр C , тем сильнее мы будем настраиваться на обучающую выборку. Данная задача также является выпуклой и имеет единственное решение.

41.5.1 Сведение к безусловной задаче оптимизации

Покажем, что задачу метода опорных векторов можно свести к задаче безусловной оптимизации функционала, который имеет вид верхней оценки на долю неправильных ответов.

Перепишем условия задачи:

$$\begin{cases} \xi_i \geq 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b) \\ \xi_i \geq 0 \end{cases}$$

Поскольку при этом в функционале требуется, чтобы штрафы ξ_i были как можно меньше, то можно получить следующую явную формулу для них:

$$\xi_i = \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b)).$$

Данное выражение для ξ_i уже учитывает в себе все ограничения задачи, описанной выше. Значит, если подставить его в функционал, получим безусловную задачу оптимизации:

$$\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \max(0, 1 - y_i(\langle w, x_i \rangle + b)) \rightarrow \min_{w, b}$$

Эта задача является негладкой, поэтому решать её может быть достаточно тяжело. Тем не менее, она показывает, что метод опорных векторов, по сути, как и логистическая регрессия, строит верхнюю оценку на долю ошибок и добавляет к ней стандартную квадратичную регуляризацию. Только если в случае логистической регрессии этой верхней оценкой была логистическая функция потерь (опять сделаем ссылку к [статье](#) из открытого курса машинного обучения), то в случае метода опорных векторов это функция вида $L(y, z) = \max(0, 1 - yz)$, которая называется **кусочно-линейной функцией потерь (hinge loss)**.



Fig. 41.5: Пороговая, кусочно-линейная и логистическая функции потерь

Это становится понятнее в терминах упомянутого выше отступа $M_i = y_i(\langle w, x_i \rangle + b)$ на примере обучающей выборки. В идеале мы хотели бы штрафовать классификатор за ошибку на примере: $L_{1/0}(M_i) = [M_i < 0]$. Это пороговая функция потерь (zero-one loss), ее график изображен черным на Fig. ?? как функция от отступа. К сожалению, напрямую мы не можем эффективно оптимизировать такую функцию градиентными методами из-за разрыва в нуле, поэтому оптимизируется верхняя оценка zero-one loss. В случае логистической регрессии – логистическая функция потерь $L(M_i) = \log(1 + e^{-M_i})$ (красная на рисунке выше), а в случае метода опорных векторов – кусочно-линейная функция $L(M_i) = \max(0, 1 - M_i)$ (зеленая на рисунке выше).

Note: Бытует мнение, что метод опорных векторов сегодня нигде не используется из-за его сложности (как минимум квадратичной по числу примеров). Однако, это не так. Линейный SVM вполне неплохо можно применять в задачах с высокой размерностью объектов обучающей выборки, например, для классификации текстов с [Tf-Idf](#) или любым другим разреженным представлением. В частности, [Vowpal Wabbit](#) – очень эффективная утилита для решения многих задач машинного обучения – по умолчанию использует hinge-loss для задач классификации, то есть по сути в этом сценарии применения является линейным SVM. Кусочно-линейная функция потерь хороша тем, что у нее очень простая производная – положительная константа либо ноль. Это удобно использовать с SGD и большими выборками, когда приходится делать миллиарды обновлений весов.

Про прелести Vowpal Wabbit и обучение на гигабайтах данных за считанные минуты можно почитать в [статье](#) открытого курса машинного обучения.

41.6 Решение задачи метода опорных векторов

Итак, метод опорных векторов сводится к решению задачи оптимизации

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \rightarrow \min_{w,b,\xi} \\ y_i (\langle w, x_i \rangle + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, \ell. \end{cases}$$

Для решения таких *условных* задач оптимизации с условиями в виде неравенств или равенств часто используют лагранжиан и двойственную задачу оптимизации. Этот подход исчерпывающе описан в классической книге Бойда по оптимизации [BV04], а на русском языке можно обратиться к конспекту Евгения Соколова. Также для понимания материала рекомендуется рассмотреть “игрушечный” пример решения задачи метода опорных векторов в случае линейно-разделимой выборки из 5 примеров.

Построим двойственную задачу к задаче метода опорных векторов. Запишем лагранжиан:

$$L(w, b, \xi, \lambda, \mu) = \frac{1}{2}\|w\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i [y_i (\langle w, x_i \rangle + b) - 1 + \xi_i] - \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i \xi_i.$$

Выпишем условия Куна-Таккера:

$$\nabla_w L = w - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i = 0 \implies w = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \quad (41.3)$$

$$\nabla_b L = - \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \implies \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0 \quad (41.4)$$

$$\nabla_{\xi_i} L = C - \lambda_i - \mu_i \implies \lambda_i + \mu_i = C \quad (41.5)$$

$$\lambda_i [y_i (\langle w, x_i \rangle + b) - 1 + \xi_i] = 0 \implies (\lambda_i = 0) \text{ или } (y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1 - \xi_i) \quad (41.6)$$

$$\mu_i \xi_i = 0 \implies (\mu_i = 0) \text{ или } (\xi_i = 0) \quad (41.7)$$

$$\xi_i \geq 0, \lambda_i \geq 0, \mu_i \geq 0. \quad (41.8)$$

Проанализируем полученные условия. Из (??) следует, что вектор весов, полученный в результате настройки SVM, можно записать как линейную комбинацию объектов, причем веса в этой линейной комбинации можно найти как решение двойственной задачи.

В зависимости от значений ξ_i и λ_i объекты x_i разбиваются на три категории:

- $\xi_i = 0, \lambda_i = 0$. Такие объекты не влияют решение w (входят в него с нулевым весом λ_i), правильно классифицируются ($\xi_i = 0$) и лежат вне разделяющей полосы. Объекты этой категории называются *периферийными*.
- $\xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C$. Из условия (??) следует, что $y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1$, то есть объект лежит строго на границе разделяющей полосы. Поскольку $\lambda_i > 0$, объект влияет на решение w . Объекты этой категории называются *опорными граничными*.
- $\xi_i > 0, \lambda_i = C$. Такие объекты могут лежать внутри разделяющей полосы ($0 < \xi_i < 2$) или выходить за ее пределы ($\xi_i \geq 2$). При этом если $0 < \xi_i < 1$, то объект классифицируется правильно, в противном случае – неправильно. Объекты этой категории называются *опорными нарушителями*.

Отметим, что варианта $\xi_i > 0, \lambda_i < C$ быть не может, поскольку при $\xi_i > 0$ из условия дополняющей нежесткости (??) следует, что $\mu_i = 0$, и отсюда из уравнения (??) получаем, что $\lambda_i = C$.

Итак, итоговый классификатор зависит только от объектов, лежащих на границе разделяющей полосы, и от объектов-нарушителей (с $\xi_i > 0$).

Построим двойственную функцию. Для этого подставим выражение (??) в лагранжиан и воспользуемся уравнениями (??) и (??) (даные три уравнения выполнены для точки минимума лагранжиана при любых фиксированных λ и μ):

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} \left\| \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i x_i \right\|^2 - \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - b \underbrace{\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i}_{0} + \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i + \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \underbrace{(C - \lambda_i - \mu_i)}_0 \\ &= \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle. \end{aligned}$$

Мы должны потребовать выполнения условий (??) и (??) (если они не выполнены, то двойственная функция обращается в минус бесконечность), а также неотрицательность двойственных переменных $\lambda_i \geq 0, \mu_i \geq 0$. Ограничение на μ_i и условие (??), можно объединить, получив $\lambda_i \leq C$. Приходим к следующей двойственной задаче:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle \rightarrow \max_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (41.9)$$

Она также является вогнутой, квадратичной и имеет единственный максимум.

41.7 Ядерный переход

Двойственная задача SVM (??) зависит только от скалярных произведений объектов – отдельные признаковые описания никак не входят в неё.

Note: Обратите внимание, как много это значит: решение SVM зависит только от скалярных произведений объектов (то есть *похожести*, если упрощать), но не от их признаковых описаний объектов. Это значит, что метод обобщается и на те случаи, когда признаковых описаний объектов нет или их получить очень дорого, но зато есть способ задать расстояние (то есть “измерить сходство”) между объектами.

Значит, можно сделать ядерный переход:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \lambda_i \lambda_j y_i y_j K(x_i, x_j) \rightarrow \max_{\lambda} \\ 0 \leq \lambda_i \leq C, \quad i = 1, \dots, \ell, \\ \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i = 0. \end{cases}$$

Здесь $K(x_i, x_j)$ – это функция-ядро, определенная на парах векторов, которая должна быть симметричной и неотрицательно определенной (теорема Мерсера).

Вернемся к тому, какое представление классификатора дает двойственная задача. Из уравнения (??) следует, что вектор весов w можно представить как линейную комбинацию объектов из обучающей выборки. Подставляя это представление w в классификатор, получаем

$$a(x) = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i y_i \langle x_i, x \rangle + b \right).$$

Таким образом, классификатор измеряет сходство нового объекта с объектами из обучающей выборки, вычисляя скалярное произведение между ними. Это выражение также зависит только от скалярных произведений, поэтому в нём тоже можно перейти к ядру.

Note: Опять подчеркнем, что классификация нового примера зависит только от скалярных произведений – “похожести” нового примера на примеры из обучающей выборки, и то не все, а только опорные.

Note: В указанном выше представлении фигурирует переменная сдвига b , которая не находится непосредственно в двойственной задаче. Однако ее легко восстановить по любому граничному опорному объекту x_i , для которого выполнено $\xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C$. Для него выполнено $y_i (\langle w, x_i \rangle + b) = 1$, откуда получаем

$$b = y_i - \langle w, x_i \rangle.$$

Как правило, для численной устойчивости берут медиану данной величины по всем граничным опорным объектам:

$$b = \text{med } y_i - \langle w, x_i \rangle, \xi_i = 0, 0 < \lambda_i < C.$$

Fig. ?? – пожалуй, самый известный рисунок в контексте SVM, он иллюстрирует ядерный трюк, в свою очередь, одну из самых красивых идей в истории машинного обучения. За счет ядерного перехода можно достигнуть линейной разделимости выборки даже в том случае, когда исходная обучающая выборка не является линейно разделимой.



Fig. 41.6: Пример разделимости в новом пространстве

Наиболее часто используемые ядра:

- *Линейное* $K(x, y) = \langle x, y \rangle$ – по сути, линейный SVM, рассмотренный выше;
- *Полиномиальное ядро* $K(x, y) = (\langle x, y \rangle + c)^d$, определенное для степени ядра d и параметра нормализации c ;
- *Гауссово ядро*, также известное как RBF (radial-basis functions) $K(x, y) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{\sigma^2}}$ с параметром ядра σ .

41.8 Плюсы и минусы SVM

Плюсы:

- хорошо изучены, есть важные теоретические результаты;
- красиво формулируется как задача оптимизации;
- линейный SVM быстрый, может работать на очень больших выборках;
- линейный SVM так же хорошо интерпретируется, как и прочие линейные модели;
- решение зависит только от скалярных произведений векторов, а идея “ядерного трюка” – одно из самых красивых в истории машинного обучения;
- нелинейный SVM обобщается на работу с самыми разными типами данных (последовательности, графы и т.д.) за счет специфичных ядер.

Минусы:

- нелинейный SVM имеет высокую вычислительную сложность и принципиально плохо масштабируется (оптимизационную задачу нельзя “решить на подвыборках” и как-то объединить решения);
- нелинейный SVM по сути не интерпретируется (“black box”);
- в задачах классификации часто хочется выдать вероятность отнесения к классу, SVM это не умеет делать, а эвристики, как правило, приводят к плохо откалиброванным вероятностям;
- ядерный SVM уступает специфичным нейронным сетям уже во многих задачах, например, в приложениях к графикам

Part XIII

Квантовые нейронные сети

О БЛОКЕ “КВАНТОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ”

Этот блок включает в себя обзор:

- квантовых нейронных сетей;
- сверточных вариационных квантовых схем.

КВАНТОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ

Автор(ы):

- Щуцкий Никита

43.1 Описание лекции

В этой лекции мы пройдёмся по расширению идеи нейронных сетей на квантовые компьютеры – мы уже прошли и *вариационные квантовые схемы (VQC)*, и комбинацию *квантовых и классических градиентов в них* в соответствующих блоках. Всё что осталось – это объединить всё изученное в общую картину и заняться обучением этих самых квантовых нейронных сетей. Для того чтобы лучше разобраться в том, какие ограничения и возможности предоставляет этот подход, мы приведём несколько публикаций о квантовых и гибридных генеративных состязательных сетях.

43.2 Введение

Как уже было упомянуто в *лекции по VQC*, на данный момент квантовые вычислители ещё недостаточно развиты для того, чтобы в одиночку решать большие задачи, имеющие практическое значение для индустрии – это в особенной степени актуально для нейронных сетей, которые и в классическом сценарии требуют значительных вычислительных ресурсов. Именно поэтому на данный момент наиболее популярна категория гибридных вариационных алгоритмов, которые обучают квантовую параметрическую схему (**QNN**) при помощи классической оптимизации, например, **VQ Eigensolvers** и **Quantum Approximate Optimization Algorithms**. В общем и целом идея гибридных алгоритмов заключается в оптимизации над некоторым классом параметрических вычислений для минимизации энергии волновой функции (**VQE/QAOA**), экстракции нелокальной информации (**QNN Classifiers**) или генерации данных, соответствующих квантовому распределению (**Quantum Generative Models**).

43.3 Применение

Лучше всего понять адекватность и применимость какой-то технологии, особенно основанной на комплексном научном базисе, позволяет как раз таки ее применение – чего удалось добиться кому-то на практике и насколько результаты пригодны для того, чтобы хвататься за технологию. Вместе с тем, практические результаты дадут нам глубже понять и в последствии объяснить, как гибридные сети работают под капотом. Приведём два примера, которые хорошо показывают разницу в ограничениях при использовании полностью квантовых и гибридных квантово-классических сетей.

В первом примере была построена полностью квантовая генеративная состязательная сеть, задачей которой являлось воспроизвести **MNIST**, однако у всего эксперимента был один нюанс. Из-за текущего размера

квантовых вычислителей было предложено уменьшить размерность MNIST с 784 до 4 при помощи метода главных компонент (PCA), чтобы его хоть как-то можно было отправить в квантовую схему. Очевидно, сеть такого размера не в состоянии тягаться с классическими сетями на десятки тысяч весов, поэтому конечным результатом стало сравнение по количеству весов при идентичных результатах. Полностью квантовая сеть смогла получить такие же результаты, как и классическая, при этом имея на 95% меньше параметров. Эти результаты всё ещё поднимают вопрос того, будут ли они справедливыми для моделей, адекватноправляющихся с задачей.



Fig. 43.1: Схема квантовой генеративной состязательной сети из публикации [SBC+21].

Во втором примере была построена гибридная квантово-классическая генеративная состязательная сеть, задачей которой являлось воспроизвести QM-9 – популярный датасет молекул до 9 атомов, представленный молекулярным графом в виде матрицы 9 на 9 и атомарным вектором из 9 элементов. Генеративная часть модели состояла из нескольких квантовых схем и, по большей части, классической сети, предсказывающей узлы и связи между ними. Дискриминативная часть была полностью классической во всех вариациях модели. В конечном итоге им удалось добиться снижения числа параметров по сравнению с полностью классической сетью на 85% и, при увеличении числа кубитов, на 98%. Таким образом они показали, что комбинация классических и квантовых схем должна соответствовать той же самой закономерности, что и полностью квантовые сети.



Fig. 43.2: Схема гибридной генеративной состязательной сети из публикации [LTG21].

За счёт большей актуальности на текущих практических задачах именно последнего, гибридного подхода, дальнейшая часть лекции будет рассматривать именно его.

43.4 Архитектура

В идеале этот подход подразумевал бы, что при помощи классического оптимизатора мы обучаем некоторую параметрическую схему на квантовом вычислителе, однако в текущих реалиях *NISQ* этот подход невозможен, поэтому большая часть параметрической схемы остается на классических вычислителях. В данном блоке мы поговорим о подходе, связанном с **QNN Classifiers**, которые следуют вышеупомянутому принципу и обучаются градиентным спуском практически так же, как и обычные классические сети, позволяя градиенту протекать между квантовой и классической частью сети.



Fig. 43.3: Схема обучения гибридной нейронной сети из [BVM+21].

На изображении гибридной сети процедура практически идентична классическому обучению сетей, в котором добавляется процесс кодирования классических данных в квантовые операторы и процесс измерения квантового состояния для того, чтобы передать уже классическую информацию для дальнейших вычислений на классическом устройстве, как это было описано в *лекции по VQC*.

43.5 Анзац

Зачастую в литературе по **VQC**, особенно когда речь идёт о нейронных сетях, упоминается такая вещь как **ansatz** – по своей сути это заранее подготовленные участки параметрической схемы, которые могут быть использованы как составные блоки сети. Если проводить параллели с классическим машинным обучением, то в рамках библиотеки PennyLane эти схемы называются **templates** (шаблоны) и могут представлять собой, например, свёрточный слой или эмбеддинг, а также более общие элементы квантовой схемы вроде подготовки состояний или перестановок между кубитами. Более подробно мы остановимся на них слегка позже в курсе, в одной из следующих глав, а пока что в общих чертах пройдёмся по обучению квантовых нейронных сетей без сложностей внутренней кухни.

Note: Интересно, но термин *ansatz* пришел в квантовые вычисления и QML из теоретической физики. Этот термин имеет немецкое происхождение, так как в первой половине XX века именно немецкие научные журналы были самыми передовыми. Частое употребление этого термина в отношении квантового машинного обучения объясняется тем, что большая часть специалистов в этой области это именно люди, занимающиеся теоретической физикой.



Fig. 43.4: Ansatz, соответствующий свёрточному слою нейронной сети в PennyLane. Источник

43.6 Функция потерь

Функция потерь работает таким же образом, как и в полностью классических сетях, так как оптимизация происходит на классическом железе. Единственное, что отличается, – это объединение квантовых и классических градиентов. Градиент по нашей квантовой схеме получается при помощи замера состояния, которое может варьироваться из-за вероятностной природы кубита, поэтому несколько замеров позволяют аппроксимировать ожидаемый градиент при помощи методов вроде *finite differences* или *parameter-shift*, после чего остаётся только совместить его с классическим градиентом.

43.7 Сеть от начала до конца

В конечном итоге мы имеем следующую последовательность действий для того, чтобы собрать гибридную нейронную сеть:

- трансформировать данные из классических в квантовые представления;
- отправить эти данные для вычисления на квантовой схеме;
- просэмплировать и замерить результат квантовой схемы;
- отправить результаты для вычисления на классической схеме;
- оценить ошибку, рассчитать градиенты и обновить параметры.



Fig. 43.5: Распространение градиентов от функции потерь в гибридной схеме.

43.8 Что мы узнали из лекции

- В ближайшие годы полностью квантовые нейронные сети не смогут решать задачи целиком, поэтому будут использоваться в качестве составляющей гибридного квантово-классического решения.
- Так же как и для полностью квантовых сетей, гибридные сети позволяют уменьшить количество необходимых параметров по сравнению с полностью классическими сетями.
- Обучение подобных сетей практически идентично обучению классических сетей за исключением нескольких трюков, необходимых для работы с параметрами квантовых схем.

СВЕРТОЧНЫЕ ВАРИАЦИОННЫЕ КВАНТОВЫЕ СХЕМЫ

Автор(ы):

- Петров Вадим

44.1 Описание лекции

На этой лекции мы рассмотрим аналог сверточных слоев нейронной сети и приведем пример их использования. Лекция расскажет:

- как работают “классические” свертки в нейронных сетях;
- что такое сверточные вариационные квантовые схемы;
- как их можно использовать для задач машинного обучения на примере датасета MNIST.

44.2 Сверточные нейронные сети

Данный тип нейронных сетей нацелен на обработку изображений и представляет из себя последовательный набор сверточных слоев, чередующиеся с другими вспомогательными слоями, например, с функциями нелинейного преобразования (активациями). Пример работы сверточного слоя представлен на рисунке ниже.

Свое название сверточный слой получил из-за наличия операции свертки (конволюции), суть которой в том, что каждый фрагмент входного изображения (input) умножается на матрицу (ядро размера 3x3, kernel) свертки поэлементно, а результат суммируется и записывается в аналогичную позицию выходного изображения (output).

Сверточные слои являются ключевыми элементами алгоритмов по распознаванию и классификации изображений. Большинство успехов в области компьютерного зрения за последнее десятилетие связано именно с ними.



Fig. 44.1: Классическая свертка

44.3 Квантовая свертка

Активное развитие квантовых вычислений создает запрос на построение квантового аналога светки. Работа (Henderson M. et.al., 2019), описывающая подобный подход, предлагает следующую схему реализации на основе вариационных квантовых схем:

- изображение разбивается на блоки размера 2x2;
- для каждого блока осуществляется кодирование входного сигнала к квантовому состоянию, которое в данной лекции осуществляется параметризованным вращением кубита из основного состояния;
- квантовые вычисления выполняются над входными кубитами посредством случайной квантовой цепи;
- проводится измерение квантовой системы для получения классических величин;
- выполняя данную процедуру для всех 2x2 областей на выходе получается многоканальное изображение (четырехканальное на примере ниже), которое будет использоваться в следующих слоях классической или квантовой нейронной сети.

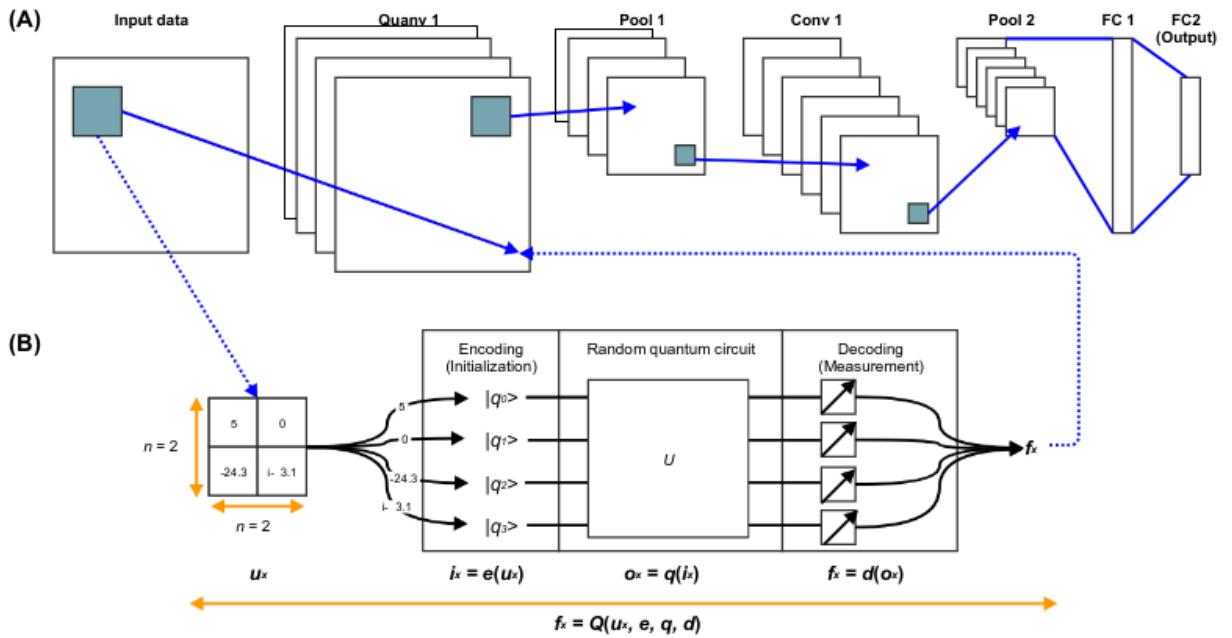


Fig. 44.2: Квантовая свертка

Основное отличие по отношению к классической свертке состоит в том, что квантовая схема может генерировать очень сложные ядра, вычисления которых могут быть классически невоспроизводимыми. Указанные сложные ядра, а именно ядра в высокоразмерном пространстве Гильберта, могут дать преимущества квантовым сверткам по отношению к классическим.

Пример реализации и работы такого блока квантовой свертки будет продемонстрирован ниже.

44.4 Подготовка модели и данных

Пример кода реализации гибридной квантово-классической сети с квантовым сверточным слоем взят из документации библиотеки PennyLane с небольшими изменениями.

Сначала загружаем библиотеки PennyLane для квантовых вычислений, tensorflow для обучения классификатора и matplotlib для отрисовки результатов.

```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np
from pennylane.templates import RandomLayers

import os
os.environ['TF_CPP_MIN_LOG_LEVEL'] = '2'
import tensorflow as tf
from tensorflow import keras

import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = 'retina'
```

/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_hack/_init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")

Устанавливаем параметры модели для обучения: число эпох, число слоев квантовой свертки и его выходных каналов, а также число тренировочных и тестовых примеров. Нужно использовать 4 кубита, для обработки каждого из 4 пикселей входного блока и генерации 4 каналов. Число примеров выбрано малым для увеличения скорости демонстрации. Также фиксируем инициализацию генераторов случайных чисел для numpy и tensorflow.

```
n_epochs = 20    # Количество эпох обучения
n_layers = 1     # Число случайных квантовых блоков
n_wires = 4      # Число выходных каналов после квантовых блоков
n_train = 20     # Размер тренировочного датасета
n_test = 10      # Размер тестового датасета

# Инициализация генераторов случайных чисел
np.random.seed(0)
tf.random.set_seed(255)
```

Для демонстрации используем датасет MNIST, который создан для предсказания цифры (от 0 до 9) по его изображению

```
mnist_dataset = keras.datasets.mnist
(train_images, train_labels), (test_images, test_labels) = mnist_dataset.load_data()

# Ограничение размера датасета
train_images = train_images[:n_train]
train_labels = train_labels[:n_train]
test_images = test_images[:n_test]
test_labels = test_labels[:n_test]

# Нормализация изображений из диапазона (0, 255) в (0, 1)
train_images = train_images / 255
test_images = test_images / 255
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
# Добавление дополнительной размерности к данным для сверточных каналов
train_images = np.array(train_images[..., tf.newaxis], requires_grad=False)
test_images = np.array(test_images[..., tf.newaxis], requires_grad=False)
```

Downloading data from <https://storage.googleapis.com/tensorflow/tf-keras-datasets/mnist.npz>

16384/11490434 [.....] - ETA: 0s

4341760/11490434 [=====>.....] - ETA: 0s

11493376/11490434 [=====] - 0s 0us/step

11501568/11490434 [=====] - 0s 0us/step

44.5 Случайная квантовая цепь

В качестве блока квантовой свертки используется **случайная квантовая цепь** (RandomLayers в PennyLane). Блок реализуется путем случайного выбора для части кубитов операций вращения, а для части пар кубитов парных квантовых гейтов. На последнем этапе генерации блока осуществляется случайное перемешивание очередности применения операций.

В нашем примере случайная квантовая цепь обрабатывает 4 кубита. Таким образом часть из 4 кубитов получит какие-либо операции вращения, а часть из 6 пар кубитов - гейты. Финальная очередьность операций будет случайной.

Следует заметить, что в нашем примере используется фиксированный (необучаемый) блок случайной квантовой цепи. Он будет использован как блок препроцессинга. В будущем, когда в библиотеке будет реализована возможность расчета градиентов и изменения параметров блока на их основании, указанный блок тоже можно будет обучать.

44.6 Реализация квантовой свертки

Далее создаем устройство, симулирующее работу 4 кубитов. Оно состоит из трех частей:

- кодировщик, преобразующий входные данные в квантовые состояния с помощью RY поворотов;
- случайная квантовая цепь;
- измерения, дающие 4 выходных значения.

```
dev = qml.device("default.qubit", wires=n_wires)

# Генерация значений параметров для квантовых слоев
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

rand_params = np.random.uniform(high=2 * np.pi, size=(n_layers, n_wires))

@qml.qnode(dev)
def circuit(phi):
    # Кодирование 4 классических входных данных
    for j in range(n_wires):
        qml.RY(np.pi * phi[j], wires=j)

    # Случайная квантовая цепь
    RandomLayers(rand_params, wires=list(range(n_wires)))

    # Измерения, которые дают 4 классических выходных значений для следующих слоев
    return [qml.expval(qml.PauliZ(j)) for j in range(n_wires)]

```

Следующая функция quanv определяет квантовую свертку по следующей схеме:

- разделение изображения на блоки 2x2 пикселей;
- обработку каждого блока квантовой цепью circuit, описанной выше;
- 4 выходных значения для каждого блока помещаются в 4 разных канала одного пикселя выходного изображения.

Описанный выше процесс уменьшает разрешение входного изображения в 2 раза, что эквивалентно классической свертки с ядром 2x2 и шагом 2

```

def quanv(image):
    """Функция квантовой свертки над входным изображением."""

    out = np.zeros((14, 14, n_wires))

    # Циклы по координатам верхнего левого пикселя блоков 2x2
    for j in range(0, 28, 2):
        for k in range(0, 28, 2):
            # Обработка блока 2x2 из изображения квантовой цепью
            q_results = circuit(
                [
                    image[j, k, 0],
                    image[j, k + 1, 0],
                    image[j + 1, k, 0],
                    image[j + 1, k + 1, 0]
                ]
            )
            # Запись результатов наблюдения в выходной пиксель (j/2, k/2)
            for c in range(n_wires):
                out[j // 2, k // 2, c] = q_results[c]

    return out

```

44.7 Подготовка датасета

Так как квантовый сверточный слой в нашем случае не обучается, то лучше провести предварительную обработку им всех используемых изображений из датасета. Подготовленные данные будут использоваться классической нейронной сетью для обучения модели классификатора.

```
q_train_images = []
for idx, img in enumerate(train_images):
    q_train_images.append(quanv(img))
q_train_images = np.asarray(q_train_images)
print("Препроцессинг тренировочных изображений квантовой сверткой выполнен.")

q_test_images = []
for idx, img in enumerate(test_images):
    q_test_images.append(quanv(img))
q_test_images = np.asarray(q_test_images)
print("Препроцессинг тестовых изображений квантовой сверткой выполнен.")
```

Препроцессинг тренировочных изображений квантовой сверткой выполнен.

Препроцессинг тестовых изображений квантовой сверткой выполнен.

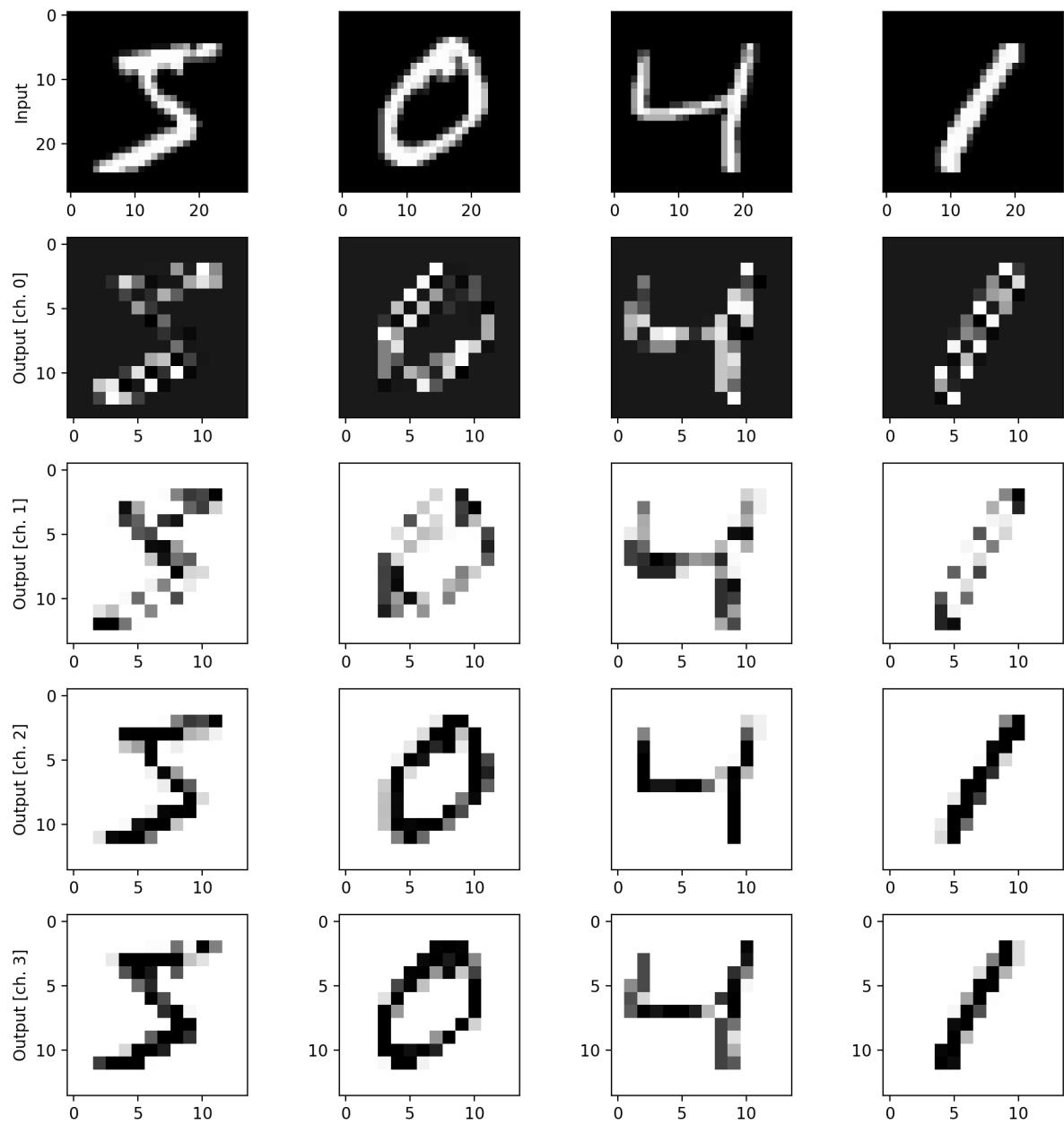
Давайте посмотрим на 4 первых тренировочных примера (первый ряд) и их 4 канала подготовленных данных (2-5 строки)

```
n_samples = 4
n_channels = n_wires
fig, axes = plt.subplots(1 + n_channels, n_samples, figsize=(10, 10))

for k in range(n_samples):
    axes[0, 0].set_ylabel("Input")
    if k != 0:
        axes[0, k].yaxis.set_visible(False)
        axes[0, k].imshow(train_images[k, :, :, 0], cmap="gray")

    # Отрисовка
    for c in range(n_channels):
        axes[c + 1, 0].set_ylabel(f"Output [ch. {c}]")
        if k != 0:
            axes[c, k].yaxis.set_visible(False)
            axes[c, k].imshow(q_train_images[k, :, :, c], cmap="gray")

plt.tight_layout()
plt.show()
```



По обработанным данным (последние 4 ряда) видно уменьшение разрешения в 2 раза, а также то, что пространственная структура цифр сохраняется, что и должно наблюдаться для сверточных слоев

44.8 Гибридная квантово-классическая модель

Ниже опишем классическую часть нейронной сети, которая будет обучена для классификации 10 цифр. Будет использована очень простая модель, основанная на одном полно связном слое и финальном применении функции softmax, которая выдает вероятности представленных 10 классов.

Обучение будет осуществлено с помощью оптимизатора Adam по функции потерь, в качестве которой используется кросс-энтропия.

```
def MyModel():
    """Функция инициализирует и возвращает keras модель, готовая к обучению"""

    model = keras.models.Sequential([
        keras.layers.Flatten(),
        keras.layers.Dense(10, activation="softmax")
    ])

    model.compile(
        optimizer='adam',
        loss="sparse_categorical_crossentropy",
        metrics=["accuracy"],
    )
    return model
```

44.9 Тренировка моделей

Сначала обучим модель на данных, подготовленных с помощью квантовой цепи.

```
q_model = MyModel()

q_history = q_model.fit(
    q_train_images,
    train_labels,
    validation_data=(q_test_images, test_labels),
    batch_size=4,
    epochs=n_epochs,
    verbose=0,
)
```

Для сравнения с результатами чисто классической модели проведем ее обучение на входных необработанных картинках.

```
c_model = MyModel()

c_history = c_model.fit(
    train_images,
    train_labels,
    validation_data=(test_images, test_labels),
    batch_size=4,
    epochs=n_epochs,
    verbose=0,
)
```

44.10 Сравнение результатов

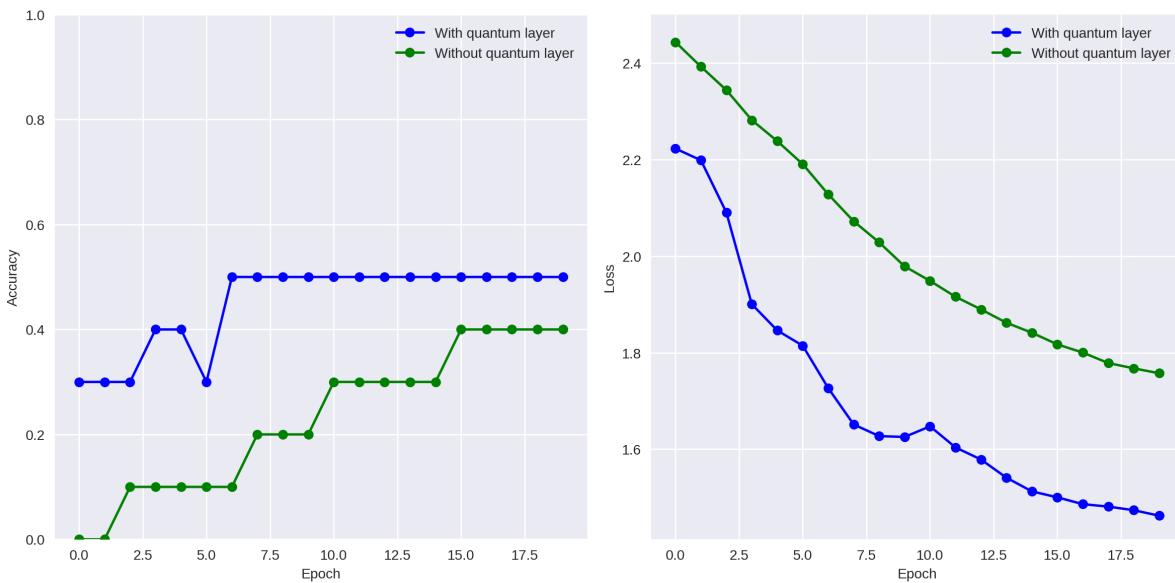
Сравнение проведем на основе тестовой точности и значению функции потерь в зависимости от номера эпохи

```
plt.style.use("seaborn")
fig, (ax1, ax2) = plt.subplots(1, 2, figsize=(12, 6))

ax1.plot(q_history.history["val_accuracy"], "-ob", label="With quantum layer")
ax1.plot(c_history.history["val_accuracy"], "-og", label="Without quantum layer")
ax1.set_ylabel("Accuracy")
ax1.set_ylim([0, 1])
ax1.set_xlabel("Epoch")
ax1.legend()

ax2.plot(q_history.history["val_loss"], "-ob", label="With quantum layer")
ax2.plot(c_history.history["val_loss"], "-og", label="Without quantum layer")
ax2.set_ylabel("Loss")
ax2.set_ylim(top=2.5)
ax2.set_xlabel("Epoch")
ax2.legend()
plt.tight_layout()
plt.show()
```

```
/tmp/ipykernel_4460/1050205299.py:1: MatplotlibDeprecationWarning: The seaborn_
`-styles shipped by Matplotlib are deprecated since 3.6, as they no longer_
`correspond to the styles shipped by seaborn. However, they will remain available_
`as 'seaborn-v0_8-<style>'. Alternatively, directly use the seaborn API instead.
plt.style.use("seaborn")
```



Из рисунков видно наличие сильного сходства результатов для двух моделей: гибридной и чисто классической. В наших малых экспериментах достигнута довольно низкая точность в 50% (классический аналог - 40%). Однако при увеличении числа используемых примеров точность должна быть существенно выше.

44.11 Замечания

- в статье авторов подхода ([Henderson M. et.al., 2019](#)) для гибридной и чисто классической сети с большим количеством слоев (см. [схему сети](#)) и большим объемом данных, достигнута ожидаемая высокая точность выше 95%;
- блоки квантовой свертки сейчас особо интересны, так как они ориентированы на использование малого количества кубитов, которое доступно в текущий период времени для устройств с промежуточным количеством кубитов (NISQ).

44.12 Что мы узнали из лекции

- существует аналог сверточных нейронных сетей для квантовых вычислений;
- аналог квантовой свертки может быть реализован с использованием случайной квантовой цепи;
- использование квантовой свертки позволяет достичь результатов схожих с классическими сетями;
- основное преимущество квантовой свертки по отношению к классической в том, что первая является более широкой операцией, которая не может быть описана классическим случаем.

Part XIV

Проблемы квантового машинного обучения

О БЛОКЕ “ПРОБЛЕМЫ КВАНТОВОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ”

Этот блок будет полностью посвящен описанию тех задач реального мира, для которых использование квантового машинного обучения на NISQ-компьютерах выглядит наиболее перспективно.

Тут мы рассмотрим:

- основы квантовой химии;
- модель Изинга;
- задачи комбинаторной оптимизации.

Продвинутые темы блока более подробно расскажут об этих темах.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ. ВВЕДЕНИЕ.

Автор(ы):

- Зимка Борис

46.1 Описание лекции

Из этой лекции узнаем:

- что такое квантовая химия, что с ее помощью можно сделать, а что – нельзя;
- как устроена самая простая теория, описывающая квантовую физику атома;
- какие у этой теории есть ограничения.

46.2 Введение

В предыдущих лекциях говорили о применении квантовой механики для вычислений и обработки информации. Однако, исторически квантовая теория развивалась в первую очередь из-за того, что классическая физика не могла объяснить некоторые наблюдаемые эффекты: дискретный спектр излучения атомов, фотоэффект в металлах, интерференцию частиц на дифракционных щелях.

Считается, что квантовая механика дает полное и точное описание состояния и эволюции любой системы при нерелятивистских условиях – по крайней мере, на сегодняшний день этому нет экспериментальных или теоретических противоречий. Это значит, что в теории возможно для любой системы частиц записать уравнения Шредингера, решить их и предсказать, как себя поведет система. Между тем, на практике оказывается, что в реальных задачах вроде моделирования лекарств и материалов, просто “взять и посчитать” – задача весьма сложная, а иногда – неразрешимая.

Проблемами применения квантовой механики к химии и материаловедению занимается квантовая химия. Она делает это уже около 100 лет, по теме написаны толстые книжки с многоэтажными формулами, так что в лекции будут даны основы и простые примеры без полного вывода.

Предполагается, что читатель знаком с уравнением Шредингера и основными операторами (импульса, эволюции), бра-кет нотацией, а также помнит основы физики и химии на уровне старших классов школы.

46.3 Атом водорода

46.3.1 В чем проблема?

Спектр излучения и поглощения атомов – то есть на какой длине волны происходит поглощение и излучение света веществом – был одной из первых “нерешаемых” проблем, приведших в итоге к появлению квантовой физики. Для простых веществ в газообразной форме спектр является дискретным, и для атома водорода спектры поглощения и излучения в видимом диапазоне выглядят так:

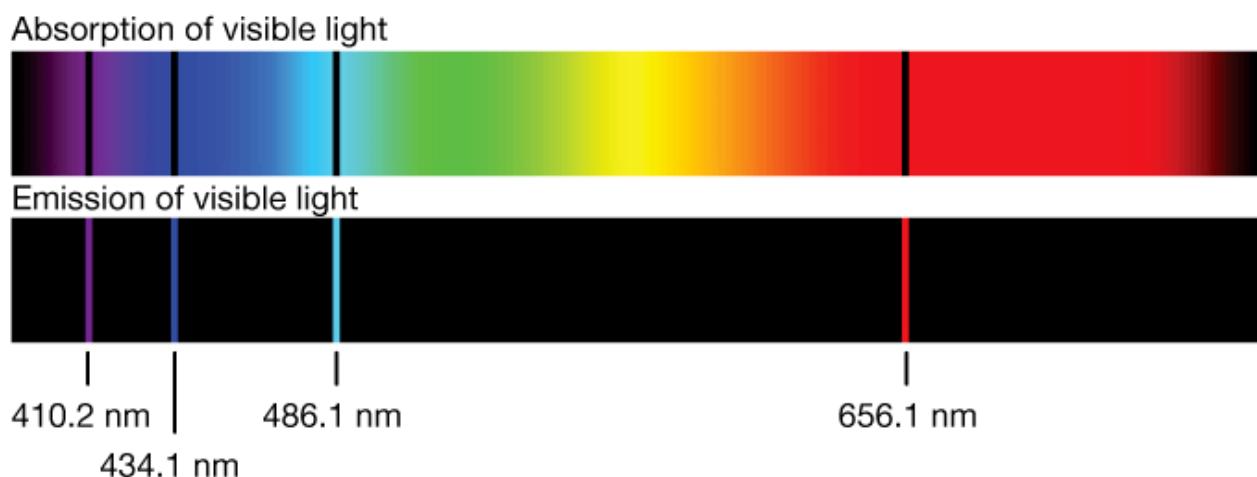


Fig. 46.1: Спектр поглощения и излучения водорода в видимом диапазоне

В конце 19 века было уже известно, что атом водорода состоит из двух заряженных частиц – протона и электрона, но из классической физики следовало, что спектр излучения такой системы должен быть непрерывным, что никак не стыковалось с наблюдениями (дискретные линии на графике). Попробуем вслед за исследователями квантовой физики начала 20 века разобраться с этой проблемой.

Про имена

“Квантовая физика” и “квантовая механика” – связанные понятия, но не тождественные.

Квантовая механика – это теория (а точнее, множество теорий с различающимися терминологиями), в основе которой лежит аксиоматика о том, что сущности описываются волновыми функциями, что они эволюционируют и, зная эти функции, можно посчитать физические величины – например, энергию.

Квантовая физика – это область физики, исследующая квантовые эффекты, при этом она местами может не иметь строгого обоснования – лишь бы предсказания работали.

С квантовой химией тоже есть некоторая путаница – в двадцатом веке под ней имели в виду аналитические и численные методы решения задач квантовой механики применительно к молекулам и кристаллам. Но с развитием квантовых компьютеров эту область стали иногда называть вычислительной химией, а квантовой химией – применение квантовых компьютеров к этой области.

46.3.2 Быстрое и неправильное решение

Первой теорией в квантовой физике была “Боровская теория” – почти классическая теория, основанная на постуатах, разрешающих противоречия классической физики с экспериментами на уровне “хардкода”. Главный постулат заключается в том, что момент импульса может принимать только определенные дискретные значения (кванты), а не произвольные:

$$p \cdot r = n \cdot \hbar,$$

и отсюда

$$p = \frac{n \cdot \hbar}{r},$$

где $p = mv$ – импульс электрона, r – радиус орбиты электрона, \hbar – постоянная Планка, n – любое целое число. Если применить этот постулат к атому водорода – паре из протона и электрона, то получится, что:

- электрон вокруг протона “летает по орбите”;
- спектр (уровни энергии электрона) – дискретный.

Можно показать это следующим образом.

Во-первых, поскольку частиц две и протон имеет массу много больше массы электрона, можно перейти в почти инерциальную систему отсчета протона, где он неподвижен, и решить задачу только для электрона.

Из классической механики берем [теорему о вирiale](#) (“для стабильной системы из двух частиц, связанных потенциальными силами, в среднем кинетическая энергия равна половине потенциальной”):

$$\begin{aligned} E_k &= -E_p/2 \\ E &= E_k + E_p = E_p/2 \end{aligned}$$

Записываем кинетическую энергию и потенциал Кулона для электрона в поле протона (в СИ):

$$\frac{p^2}{2m} = k \frac{e^2}{2R},$$

где k – постоянная из закона Кулона.

Используем постулат Бора и выразим “радиус” орбиты:

$$\begin{aligned} \frac{n^2 \hbar^2}{2mR^2} &= k \frac{e^2}{2R} \\ R &= \frac{n^2 \hbar^2}{k m e^2} \end{aligned}$$

Находим полную энергию:

$$E = E_p/2 = -\frac{ke^2}{2R} = -\frac{k^2 m e^4}{n^2 2\hbar^2} \quad (46.1)$$

Уровни энергии пропорциональны $\frac{1}{n^2}$ и именно [такая зависимость](#) наблюдается в эксперименте.

Посчитаем минимальную энергию ($n = 1$):

```
from scipy import constants as consts

# ПОСТОЯННАЯ КУЛОНА
k = (1 / (4 * consts.pi * consts.epsilon_0))
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
# энергия в Джоулях
E1 = - k**2 * consts.m_e * consts.e**4 / (2 * consts.hbar ** 2)

# энергия в электрон-вольтах
E1_ev = E1 / consts.e

print(f"Hydrogen Bohr ground state energy: {E1_ev} eV")
```

```
Hydrogen Bohr ground state energy: -13.605693122885837 eV
```

Получившийся ответ (13.6 eV) в точности совпадает с экспериментальным значением энергии ионизации водорода.

Итого: постулировав несколько очень удачных гипотез (главная – что момент импульса квантуется, то есть принимает только дискретные значения), удалось разрешить фундаментальную нестыковку между классической теорией и экспериментом: энергия стала дискретной, линии спектра (длины волн) стали обратно пропорциональны $\left(\frac{1}{n_{final}^2} - \frac{1}{n_{initial}^2}\right)$, значения энергии ионизации совпадают с реальными измерениями.

Казалось бы, замечательно, проблема решена! Однако теория Бора имеет ряд проблем. Главная из них заключается в том, что теория работает только для “водородоподобных” атомов, то есть состоящих из ядра и одного электрона на внешней оболочке. Уже для атома гелия спектр не согласуется с боровской теорией.

Кроме того, с точки зрения науки, теория Бора – это в некотором смысле “читечество”. Выбрав удачные постулаты и подставив соответствующие формулы в законы классической физики, получили правильный результат. Но будь постулаты другими, результат получился бы тоже другой, так что фактически постулаты Бора – это гениальная догадка, позволившая угадать правильные результаты для некоторых систем.

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ. ТЕОРИЯ САМОСОГЛАСОВАННОГО ПОЛЯ.

Автор(ы):

- Зимка Борис

47.1 Описание лекции

Из этой лекции узнаем:

- как с помощью квантовой химии предсказать спектр атома водорода “из первых принципов”;
- как посчитать энергию атома с помощью Python;
- какие бывают волновые функции электронов и как их вычислять методом Self-Consistent Field;
- как посчитать энергию спирта.

47.1.1 Введение

Боровская теория оказалось недостаточной для описания таких сложных систем, как молекулы или не-водородоподобные атомы. В этой лекции разберемся с теорией самосогласованного поля – это один из первых вычислительных методов квантовой химии, пригодный на практике для моделирования разных систем (атомов, молекул, кристаллов).

Несмотря на то, что основа метода была разработана чуть ли не сто лет назад, он активно используется и сегодня, особенно с различными модификациями и дополнениями.

47.1.2 Что ищем?

С точки зрения квантовой химии, чаще всего хотим для произвольного набора частиц (атомов для молекулы или кристалла, протонов и электронов для атома) с известным потенциалом взаимодействия предсказывать стационарное состояние, т.е. находить стационарные волновые функции всех частиц системы. Квантовая механика постулирует, что для любой наблюдаемой физической величины существует оператор, которым можем подействовать на волновую функцию и получить измеренное значение этой величины.

Например, если волновые функции электронов и ядер в кристалле известны, то можно предсказать теплопроводность кристалла. Или электрическую проводимость, или еще что-нибудь – поэтому основной задачей квантовой химии является поиск волновых функций-решений уравнения Шредингера для системы частиц.

47.1.3 Долгое и правильное решение, часть 1

Начнем с атома водорода и определения его уровней энергии – их можно сравнить с экспериментальными данными, а также результатами Боровской теории. Квантовая механика позволяет решить эту задачу, исходя только из “первых принципов”, то есть аксиоматики квантовой механики. При этом после некоторых усилий решения успешно обобщаются с атома водорода на любой другой.

Давайте опишем атом водорода – систему из электрона и протона – на языке квантовой механики, то есть в виде уравнения Шредингера, и посмотрим, что получится.

Электрон находится в потенциале протона, и его волновая функция должна зависеть от расстояния до протона.

Уравнение Шредингера для электрона будет следующим:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t, \vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}) \right) \Psi(t, \vec{r})$$

Мы ищем решение, в котором электрон остается в атоме, то есть решаем стационарное уравнение, в котором Ψ не зависит от времени. Тогда оператор эволюции (в левой части уравнения Шредингера) при применении к Ψ должен вернуть нам тот же вектор Ψ , умноженный на E (энергия частицы).

С точки зрения математики, искомая волновая функция является собственным вектором оператора эволюции, а энергия – собственным значением (подробнее в разделе *Матрицы*). Если объяснять “на пальцах”, то оператор эволюции при применении к волновой функции должен вернуть нам новую (эволюционированную или изменившуюся во времени) волновую функцию. Если ищем стационарную – не меняющуюся во времени – волновую функцию, то при применении к ней оператора эволюции она не должна изменяться, иначе будет уже не стационарной.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t, \vec{r}) \equiv i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\vec{r}) \equiv E\Psi(\vec{r})$$

Оператор импульса раскрывается через градиент так:

$$\hat{p} = i\hbar \nabla$$

Потенциал взаимодействия двух частиц с противоположными единичными зарядами раскрывается так:

$$\hat{V}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r}$$

Итого имеем:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (47.1)$$

Прежде чем погружаться глубже в решение этого уравнения, нам надо разобраться с квантовыми числами.

47.1.4 Про квантовые числа

Теория Бора базируется на идее квантования импульса, и ее следствием является возникшее в формуле энергии (??) число n . Каждое число n соответствует определенному состоянию, в котором может находиться электрон, и эти состояния отличаются энергией.

Идея, что электрон может находиться в одном состоянии из некоторого конечного набора вариантов, характеризуемого дискретными (квантовыми) числами, оказалась правильной. В дальнейшем она получила развитие в квантовой механике.

Число n называется главным **квантовым числом**, оно определяет энергетический уровень электрона.

Из анализа свойств операторов гамильтониана и момента импульса в квантовой механике выводятся еще три квантовых числа:

- ℓ – орбитальное квантовое число, $0 \leq \ell \leq n - 1$;
- m – магнитное квантовое число, $-\ell \leq m \leq \ell$;
- s – спиновое квантовое число, $s = 0|1$ (для атома водорода оно не играет роли, так как электрон только один).

В химии они [используются](#) в другой форме записи для описания орбиталей электронов в атоме.

Эти числа нам скоро понадобятся, чтобы описывать электрон в атоме.

Любая функция Ψ , для которой уравнение (??) верно, описывает электрон, который стабильно находится где-то около ядра и не покидает его, то есть образует с ним атом. При этом функций-решений у уравнения на самом деле много, что физически соответствует тому, что электрон может находиться на разных орбитах. Каждая орбиталь характеризуется квантовыми числами – n , ℓ , m и s , и обозначается как $\Psi_{n\ell m}$. Ψ (орбиталь) с минимальной энергией E соответствует основному состоянию (ground state) – она описывает невозбужденный электрон. У водорода только один электрон, поэтому единственная Ψ с минимальной энергией соответствует невозбужденному атому водорода.

В целом, основная задача квантовой химии – найти ground state произвольной системы частиц. В реальности материя редко находится непосредственно в ground state состоянии, т.к. при ненулевой температуре какие-то флуктуации неизбежно возникают. Тем не менее, ground state обычно в наибольшей степени определяет поведение системы, а другие состояния являются “поправками” к нему.

Частицы могут переходить из одного состояния в другое: если электрону в основном состоянии придать энергии, например, попасть в него другой частицей, то он может перейти на другую орбиталь, при этом оставшись частью атома. Со временем возбужденные атомы рано или поздно переходят в основное состояние, выбрасывая лишнюю энергию в виде фотона, что и дает спектр излучения атома.

Итого: $\Psi_{n\ell m}(\vec{r})$ – это функция, соответствующая какой-то стабильной “траектории” (распределению плотности вероятности) электрона вокруг ядра, она является решением уравнения Шредингера, то есть собственной функцией гамильтониана. Соответствующее ей собственное число – энергия электрона на этой орбитали. Для всех волновых функций с одним n энергия одинакова, но одной энергии может соответствовать несколько волновых функций, каждая – со своим уникальным набором волновых чисел.

Если электрон описывается такой волновой функцией, то он часть атома, и если какой-либо электрон – часть атома, то он описывается такой волновой функцией. Электрон может переходить между этими волновыми функциями, получая и отдавая энергию, оставаясь при этом частью атома.

Волновая функция Ψ_{100} (т.е. с числами $n = 1, \ell = 0, m = 0$) соответствует минимальной энергии для единственного электрона в атоме водорода. Т.к. в атоме водорода есть лишь один электрон, и других вкладов в энергию нет – весь атом водорода в такой конфигурации имеет минимальную энергию.

47.1.5 Долгое и правильное решение, часть 2

А зачем нам вообще сдался спектр и энергии?

Вслед за физиками двадцатого века нам приходится проридаться через дебри уравнений, абстракций и формул. Дело это непростое и может возникнуть резонный вопрос – а зачем оно все надо?

Помимо фундаментальной ценности в виде лучшего понимания устройства мира, объясняющая спектр теория дает крутую возможность: по измеренному спектру понять, что за вещество перед нами и какие процессы в нем протекают. Например, изучение спектров – один из немногих способов узнать что-то про процессы в звездах или биологических клетках. Для совсем практиков: спектроскопия также используется для детекции взрывчатых и наркотических веществ в малых дозах, а полевые транзисторы (основа большинства современных вычислительных устройств) работают на основе туннельного эффекта – квантового явления. Так что можно сказать, что квантовая механика используется сплошь и рядом!

Если перейти в уравнении (??) в сферические координаты со следующей параметризацией $\Psi(\vec{r}) = \frac{\chi(r)}{r} Y(\theta, \phi)$ и воспользоваться несколькими волшебными выводами квантмеха [89], то получится:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} - E\right)\chi(r) = 0$$

Все константы (массы, заряда, импульса, энергии) можно убрать, если перейти в кулоновские единицы измерений, где они приняты за единицу (то есть 1 единица заряда = заряд электрона, 1 единица массы = масса электрона).

$$-\frac{\chi''(r)}{2} + \left(\frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{1}{r}\right)\chi(r) = 0$$

Опустим несколько страниц выкладок [15a], учтем граничные условия и получим следующее решение:

$$R_{n\ell}(r) = r^\ell \cdot e^{-r/n} \cdot \sum_{k=0}^{n-\ell-1} \frac{(-2r/n)^k}{(2\ell+2+k)!(n-\ell-k-1)!k!} \cdot C$$

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi),$$

где $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ – сферические функции.

Если подставить это решение в уравнение Шредингера и найти энергию, то получим:

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

То есть получим ту же формулу, что и в теории Бора, и тот же численный результат – 13.6 eV.

Здесь начинает проступать основная проблема квантовой химии – математическая и вычислительная сложность. Пока что проблема только концептуальная (сложно разобраться в формулах и уравнениях), но при росте числа частиц в системе даже отличное владение матаппаратом окажется недостаточным.

47.1.6 От теории к практике

Вернемся из начала двадцатого века обратно в день сегодняшний. Сто лет назад невычислимые аналитически интегралы и замороченные дифференциальные уравнения были почти непреодолимыми препятствиями, поэтому поначалу теория квантовой химии развивалась в сторону более хитрых приближений и упрощений, позволяющих решить эти уравнения аналитически.

Сегодня реальные научные задачи решаются численно – и для этого написано множество высокопроизводительных пакетов, позволяющих на основе входных данных и ограничений вычислить определенным методом желаемые характеристики.

Как и в задачах машинного обучения, в первом приближении достаточно подготовить данные, скормить их волшебному программному пакету-вычислителю и забрать ответ, но без понимания происходящего под капотом есть шансы получить что-то неправильное.

В этой лекции воспользуемся Python-пакетом `pyscf`, который реализует алгоритмы квантовой химии с верхнеуровневым API на Python.

Note: Другим известным Python-пакетом с численными алгоритмами квантовой химии является `psi4`. Однако он имеет ряд сложностей с установкой, поэтому интерактивные ячейки в этой лекции будут приведены на `pyscf`, а код на `psi4` будет приведен как альтернатива. Библиотека `psi4` не устанавливается вместе с данной книгой и, если хотите попробовать ее, то рекомендуется создать новое виртуальное окружение (подробнее о виртуальных окружениях было в вводных главах про Python).

Посчитаем с помощью `pyscf` энергию основного состояния атома водорода. Некоторые параметры сейчас придется использовать, “поверив на слово”. Их смысл будет объяснен в дальнейшем.

```
from pyscf import gto, scf

h_atom = gto.Mole()
h_atom.build(
    atom="H 0 0 0",
    basis="STO-3G",
    spin=1,
)
```

```
<pyscf.gto.mole.Mole at 0x7fdc48ed0d90>
```

Задали атом водорода, по умолчанию атом помещается в начало координат. Можно заметить параметр `basis="STO-3G"` в задании атома. Тут уже поинтереснее – объяснение этих параметров пока отложим и вернемся после объяснения теории. В целом они определяют, каким именно методом и в каком базисе нужно численно решить уравнение Шредингера.

```
from scipy.constants import physical_constants

mf = scf.ROHF(h_atom)
e_in_ht = mf.kernel()

h2ev = physical_constants["hartree-electron volt relationship"]

def e_in_ev(energy_in_ht: float) -> float:
    return energy_in_ht * h2ev[0]

print(f"Hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")
```

```
converged SCF energy = -0.466581849557275
```

```
Hydrogen ground state energy: -12.696338923670483 eV
```

Здесь посчитали энергию в единицах Хартри – специальной физической системе единиц, где истинная энергия атома водорода равна $1/2$, и перевели ее в электрон-вольты. Результат не очень точный (правильный, как помним, равен 13.6 eV), и мы его улучшим после того как разберемся, что и как только что посчитали. Это будет удобнее сделать на примере атома гелия, потому что в атоме водорода есть только один электрон, а в любой реальной системе – больше одного.

Решение на psi4

Такой же результат можно получить и в библиотеке `psi4`. Правда в данном случае Python API выглядит немного иначе.

```
import psi4
psi4.core.be_quiet() # отключаем логирование в stdout

h_atom = psi4.geometry("H")

psi4.set_options({
    "basis": "STO-3G",
    "reference": "rohf",
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

    })

from scipy.constants import physical_constants

h2ev = physical_constants["hartree-electron volt relationship"]

def e_in_ev(energy_in_ht):
    return energy_in_ht * h2ev[0]

# энергия в единицах Hartree
e_in_ht = psi4.energy("scf")

print(f"Hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")

```

Hydrogen ground state energy: -12.696338923670487 eV

47.2 Теория самосогласованного поля

47.2.1 Атом гелия

Следующим “по простоте” после атома водорода идет атом гелия – как говорит нам школьная химия, это атом из двух протонов, двух нейтронов и двух электронов. Протоны и нейтроны находятся близко друг к другу в ядре и имеют почти одинаковую массу, так что можно просто считать, что есть ядро с зарядом +2 и массой 4. А вот с электронами все сложнее: с одной стороны, это независимые частицы, а с другой – они взаимодействуют друг с другом по закону Кулона, так как оба имеют отрицательный заряд.

Note: Для гравитационного взаимодействия “проблема трех тел” не имеет известного аналитического решения. Это означает, что если мы знаем, что где-то в глубоком космосе вдалеке от остального мира есть три объекта с известными массами, импульсами и координатами, то, увы, в общем случае не сможем предсказать их движение аналитически (хотя сможем предсказать численно, либо найти приближенное аналитическое решение, если масса одного объекта много больше других, например).

Для трех классических тел с кулоновским потенциалом все тоже сложно – можно посмотреть [тут](#), как поведет себя система трех тел с различными зарядами.

Запишем уравнение Шредингера для системы из ядра и двух электронов:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(t, \vec{r}_A, \vec{r}_B) = \left(\frac{\hat{p}_A^2}{2m} - \frac{2e \cdot e}{r_A} + \frac{\hat{p}_B^2}{2m} - \frac{2e \cdot e}{r_B} + \frac{e \cdot e}{|\vec{r}_A - \vec{r}_B|} \right) \Psi(t, \vec{r}_A, \vec{r}_B)$$

Оно состоит из кинетической и потенциальной энергии двух электронов в поле ядра и (последнее слагаемое) потенциала взаимодействия двух электронов. Учитывая, что уравнение примерно такое же, как у водорода, только еще более сложное, решение стоит искать численно и с использованием приближений, а не аналитически.

Если бы не последний член гамильтонiana, то можно было бы разбить все выражение на две независимых части – с переменными электрона A и с переменными электрона B . Так как это дифференциальное уравнение, можно было бы воспользоваться разделением переменных и найти отдельные решения для двух электронов – задача аналогична атому водорода, а ее мы уже решили.

Но из-за потенциала взаимодействия решение существенно усложняется, поскольку электроны влияют друг на друга. Придется прибегнуть к упрощениям – одним из наиболее популярных подходов является *теория самосогласованного поля* (Self-Consistent Field).

47.2.2 Теория самосогласованного поля

Теория самосогласованного поля (self-consistent field theory) – это подход итеративного решения уравнения Шредингера для многочастичной системы, на основе которого построено много квантово-химических методов, наиболее известный из которых – метод Хартри-Фока. В снппете выше строчка `scf.ROHF(h_atom)` (`psi4.energy('scf')`) означает, что энергия посчитана этим методом.

Основная идея теории заключается в следующем.

Есть несколько частиц, которые взаимодействуют между собой, и найти цельное решение уравнения Шредингера для всех сразу не получается. Тогда вместо этого будем рассматривать частицы по очереди и считать, что все остальные действуют “в среднем” на выбранную частицу. То есть будем считать усредненный по пространству потенциал вместо точного.

Для электрона в атоме гелия нам нужно учесть усредненное влияние электрона B . Можем для электрона B взять волновую функцию от атома водорода, посчитать на ее основе усредненное влияние на электрон :

$$(h_A + \hat{V}_{eff})\psi_A = (h_A + \psi_B \frac{e^2}{r_{AB}} \psi_B)\psi_A = \epsilon_A \psi_A,$$

где h_A – это кинетическая энергия и потенциал ядра для электрона A , V_{eff} – влияние электрона B на электрон и вычисляется как влияние усредненной электронной плотности, распределенной в соответствии с ψ_B .

На этом шаге считаем, что ψ_B – фиксированная волновая функция и находим “переменную” ψ_A . Однако ψ_A тоже будет влиять на ψ_B и, записав аналогичное уравнение для частицы B , следующим шагом найдем новую ψ_B .

После изменения волновых функций каждого электрона можем заново записать их уравнения с новыми волновыми функциями и так по кругу, пока волновые функции и их энергии не сойдутся к какому-то стабильному (самосогласованному) решению.

Все вместе это создает итеративную процедуру:

1. на основе имеющихся волновых функций посчитать среднее поле, которое создают частицы (например, электрон B для электрона);
2. решить уравнение Шредингера с потенциалом, учитывающим среднее поле, то есть вычислить энергию и новые волновые функции;
3. вернуться к шагу 1.

Для инициализации можно взять какие-то приблизительные волновые функции для всех частиц (двух электронов гелия), например, решения из уравнения водорода, то есть водородоподобные волновые функции. Далее итерацию повторяют, пока волновые функции и их энергии не перестанут изменяться, то есть самосогласуются.

Система таких уравнений, записанных для каждого электрона, называется **уравнениями Хартри**. На основе таких волновых функций для отдельных электронов можно собрать общую волновую функцию $\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B)$, самый простой вариант – это $\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) = \psi_A(\vec{r}_A)\psi_B(\vec{r}_B)$, он и был предложен первоначально. Однако есть проблема: такая Ψ получается не антисимметричной, а только такие волновые функции для системы электронов являются “физичными”, то есть могут существовать в реальности.

Note: Один из основополагающих принципов квантовой механики – тождественность частиц и их неразличимость. Принцип означает, что все частицы одного типа (например, электроны) одинаковы и характеризуются только своим состоянием. Например, если мы “переставим местами” два электрона в атоме (не только пространственно, но и в смысле их состояния и энергий), то получившийся атом будет неотличим от исходного.

Из принципа тождественности следует, что при перестановке не должна меняться плотность вероятности:

$$|\Psi(X_A, X_B)|^2 = |\Psi(X_B, X_A)|^2$$

Кроме того, представим что мы обменяли частицы дважды: A с B и обратно. Никакие физические свойства системы из-за этого измениться не должны. В общем случае, из этого не следует что волновая функция не изменилась – например, так как глобальная фаза волновой функции неизмерима, то могли получить $\Psi' = e^{2i\pi\theta}\Psi$.

Но, если работаем больше чем в двух пространственных измерениях, то такой двойной обмен эквивалентен отсутствию обмена. Для начала представим, что обмениваем частицы медленно, описывая полукруг частицей A вокруг частицы B и потом сдвигая обе частицы. Тогда двойной обмен значит, что частица A описывает полный круг вокруг частицы B . Также, если непрерывно изменим ее маршрут не приближая ее к частице B , то ожидаем получить тот же результат.

Итак, какие замкнутые маршруты можем получить непрерывно деформируя маршрут в евклидовом пространстве без точки (B)? Ответ для любого измерения больше 2 – [любые](#). Следовательно двойной обмен должен давать такой же результат как и если бы просто оставили частицу на месте [[NSS+08](#)]. Это свойство задает ограничение на то, какими могут быть волновые функции.

У этого ограничения есть два решения: либо $\Psi(X_A, X_B) = \Psi(X_B, X_A)$ (симметричность), либо $\Psi(X_A, X_B) = -\Psi(X_B, X_A)$ (антисимметричность). У антисимметричных функций есть интересное свойство: если функция $f(x_1, x_2)$ антисимметрична, то $f(x_1 = X, x_2 = X) = 0$, то есть антисимметричная функция равна нулю, если ее аргументы одинаковы. В этом легко убедиться на примере $f = x_1 - x_2$.

Для антисимметричной волновой функции это означает, что две частицы не могут иметь полностью одинаковое состояние – волновая функция (и вероятность) такой конфигурации равна нулю.

В эксперименте это строго выполняется для всех частиц с полуцелым спином (фермионов), к которым относятся электроны, а частицы с целым спином (бозоны), например, фотоны, имеют симметричную волновую функцию и могут иметь одинаковые состояния.

Для квантовой химии это все имеет одно важное следствие: электроны – это фермионы и волновая функция, описывающая всю систему электронов целиком, должна быть антисимметрична относительно перестановки (замены пары индексов). Любое не антисимметричное решение не физично, поскольку допускает существование электронов в одинаковом состоянии, а такого не бывает. В химии этот вывод называется [принцип запрета Паули](#).

Чтобы сделать волновую функцию системы из двух электронов антисимметричной, используется такой прием:

$$\Psi(X_A, X_B) = \psi_A(X_A)\psi_B(X_B) - \psi_B(X_A)\psi_A(X_B)$$

Во-первых, легко проверить, что если поменять местами X_A и X_B , то вся функция просто изменит знак. Во-вторых, можно заметить, что формулу можно записать как определитель матрицы:

$$\Psi(X_A, X_B) = \begin{vmatrix} \psi_A(X_A) & \psi_B(X_A) \\ \psi_A(X_B) & \psi_B(X_B) \end{vmatrix}$$

Из курса линейной алгебры можно вспомнить, что определитель меняет знак при перестановке двух столбцов или двух строк – это свойство позволяет делать антисимметричные волновые функции систем из N волновых функций отдельных электронов, если использовать метод Хартри не для атома гелия, а для системы с большим числом электронов. Для этого составляется определитель $N \times N$ по аналогии с формулой выше: элемент в строке i , столбце j – это i -я волновая функция с параметрами j -го электрона в качестве аргумента. Волновая функция системы частиц вычисляется как нормированный определитель матрицы, а определитель всегда антисимметричен. Такой вариант сборки волновой функции системы частиц называется “определитель Слэтера”.

Так как весь подход является аппроксимацией, не любая система может быть точно представлена таким детерминантом, но он является очень распространенным методом “сборки” волновой функции системы электронов в квантовой химии. Его использование также немного меняет вид одноэлектронных уравнений: чтобы корректно учесть антисимметрию, в эффективный потенциал добавляется так называемое “обменное взаимодействие”.

Все вместе составляет метод Хартри-Фока:

- итеративная процедура самосогласованного поля;
- усредненное действие электронов друг на друга, учет обменного взаимодействия;
- детерминант Слетеера.

47.2.3 SCF в python

Теперь можно вернуться к коду и взглянуть на него чуть более осмысленно. При вычислении энергии явно передаем, что хотим посчитать ее методом Self-Consistent Field:

```
h_atom = gto.Mole()
h_atom.build(
    atom="H 0 0 0",
    basis="STO-3G",
    spin=1,
)

mf = scf.RHF(h_atom)
e_in_ht = mf.kernel()
```

```
converged SCF energy = -0.466581849557275
```

Но что тут происходит, пока по-прежнему неясно.

Начнем с параметра `basis`. `STO-3G` – не стандарт связи, а Slater Type Orbital с 3 Гауссианами в базисном наборе, то есть базис на основе детерминанта Слетеера. В описании метода SCF собирались начинать итерации с водородоподобных волновых функций, но так как весь метод является аппроксимирующим, никто не мешает выбрать другие волновые функции, если результаты лучше согласуются с экспериментом. Выбор базиса может существенно влиять на результат вычислений и современные базисы сложнее, чем Слетеевский детерминант – он просто один из первых и наиболее популярных.

Параметр `spin=1` задает общий спиновый момент атома. Это очень важно, так как любые ограничения улучшают сходимость метода **SCF**. Ну а когда пишем `scf.RHF`, то (в это случае) используем `Restricted Open Shell Hartree-Fock`, так как у атома водорода только один электрон и его оболочка не заполнена (на уровне энергии $n = 1$ для этого нужно 2 электрона).

Повторим вычисления, например, с более “современным” базисом.

```
h_atom = gto.Mole()
h_atom.build(
    atom="H 0 0 0",
    basis="augccpv5z",
    spin=1,
)

mf = scf.RHF(h_atom)
e_in_ht = mf.kernel()
print(f"Better hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")
```

```
converged SCF energy = -0.499994784583708
```

```
Better hydrogen ground state energy: -13.605551204286837 eV
```

Та-дам! Используя более прокачанные базисы, получили правильный ответ.

Посмотрим, что еще можно сделать с помощью self-consistent field.

SCF с использованием psi4

Используем более “модный” базис в psi4 и также получим более точное решение для атома водорода:

```
psi4.core.clean()

he_atom = psi4.geometry("H")

psi4.set_options({
    "basis": "d-aug-cc-pv5z", # разбор этого базиса выходит за рамки этого интроверса
    "scf_type": "pk",
    "reference": "rohf",
})

e_in_ht = psi4.energy("scf")

print(f"Better hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")
```

```
Better hydrogen ground state energy: -13.605551648965216 eV
```

47.2.4 Атом Гелия (численно)

Раз разобрали SCF на примере атома гелия, то наверняка можно посчитать его энергию в pyscf.

```
he_atom = gto.Mole()
he_atom.build(
    atom="He 0 0 0",
    basis="STO-3G",
    spin=0,
)

mf = scf.ROHF(he_atom)
e_in_ht = mf.kernel()
print(f"Helium ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")
```

```
converged SCF energy = -2.80778395753997
```

```
Helium ground state energy: -76.403693763909 eV
```

Атом гелия в psi4

Ну и то же самое в psi4:

```
psi4.core.clean()

he_atom = psi4.geometry("He")

psi4.set_options({
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

    "basis": "STO-3G",
    "reference": "rohf",
})

e_in_ht = psi4.energy("scf")

print(f"Helium ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")

```

Helium ground state energy: -76.403693763909 eV

Экспериментальное значение энергии атома гелия **равно** -79.0 eV.

47.2.5 Молекула водорода

Пока рассматривали только атомы, но SCF можно использовать и для молекул – потенциалы становятся сложнее, электронов больше, но общая логика не меняется.

```

h_mol = gto.Mole()
h_mol.build(
    atom="H 0 0 0; H 0 0 0.74",
    basis="STO-3G",
    spin=0,
)

mf = scf.RHF(h_mol)
e_in_ht = mf.kernel()
print(f"Hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht)} eV")

```

converged SCF energy = -1.11675930739643

Hydrogen ground state energy: -30.388568857366177 eV

Здесь задали явно координаты обоих атомов водорода в молекуле и энергия электронов была высчитана в предположении, что ядра водородов неподвижны. Здесь расстояние в 0.74 Ангстрема взято из [экспериментальных данных](#). Если бы задали неправильные координаты, то рассчитанная энергия окажется неверной. Точнее, она соответствовала бы нефизичной ситуации, когда неведомая сила “удерживает” ядра водорода на месте.

Молекула водорода в psi4

Несложно сделать тоже самое и в psi4:

```

psi4.core.clean()

# задаем 2 атома водорода с явными координатами
h_mol = psi4.geometry("""
    H 0 0 0
    H 0 0 0.74
""")

```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

psi4.set_options({
    "basis": "STO-3G",
    "reference": "rohf",
})

e_in_ht_h = psi4.energy("scf", molecule=h_mol)

print(f"Hydrogen ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_h)} eV")

```

Hydrogen ground state energy: -30.388568856869096 eV

47.2.6 Оптимизация геометрии молекулы

В pyscf (а также и в psi4) есть встроенная возможность оптимизации молекулы: `pyscf.geomopt.berny_solver.optimize` (`psi4.optimize`). В этом случае оптимизатор не фиксирует положение ядер и возвращает минимальную возможную энергию с учетом вариации положения атомов. Вычисления с оптимизацией геометрии занимают значительно больше времени.

Note: В pyscf оптимизация выполняется при помощи сторонней библиотеки Pyberny, которая не является зависимостью и должна быть установлена отдельно: `pip install -U pyberny`.

```

from pyscf.geomopt.berny_solver import optimize

h_mol_bad = gto.Mole()
h_mol_bad.build(
    atom="H 0 0 0; H 0 0 1.5",
    basis="STO-3G",
    spin=0,
)

mf = scf.RHF(h_mol_bad)
e_in_ht_h_bad = mf.kernel()

mol_eq = optimize(mf)
mf_right = scf.RHF(mol_eq)
e_in_ht_h_optimized = mf_right.kernel()

print(f"Hydrogen molecule, incorrect ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_h_bad)} eV
      →")
print(f"Hydrogen molecule, optimized ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_h_
      →optimized)} eV")

```

converged SCF energy = -0.910873554594387

Geometry optimization cycle 1

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates	dX	dY	dZ
------	-----------------	----	----	----

(continues on next page)

(continued from previous page)

H	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
H	0.000000	0.000000	1.500000	0.000000	0.000000	0.000000

converged SCF energy = -0.910873554594387

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.1583976826
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.1583976826

cycle 1: E = -0.910873554594 dE = -0.910874 norm(grad) = 0.224008

Geometry optimization cycle 2

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.079377	0.000000	0.000000	0.079377
H	0.000000	0.000000	1.420623	0.000000	0.000000	-0.079377

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from [chkfile](#)

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -0.959976948556178

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.1678535564
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.1678535564

cycle 2: E = -0.959976948556 dE = -0.0491034 norm(grad) = 0.237381

Geometry optimization cycle 3

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.238130	0.000000	0.000000	0.158753
H	0.000000	0.000000	1.261870	0.000000	0.000000	-0.158753

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from [chkfile](#)

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -1.05934476925058

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.1528552490
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.1528552490

cycle 3: E = -1.05934476925 dE = -0.0993678 norm(grad) = 0.21617

Geometry optimization cycle 4

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.481967	0.000000	0.000000	0.243837
H	0.000000	0.000000	1.018033	0.000000	0.000000	-0.243837

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↳chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -1.07060402057946

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	0.3424691642
1 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.3424691642

cycle 4: E = -1.07060402058 dE = -0.0112593 norm(grad) = 0.484325

Geometry optimization cycle 5

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.331032	0.000000	0.000000	-0.150935
H	0.000000	0.000000	1.168968	0.000000	0.000000	0.150935

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↳chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -1.104755003306

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0954526877
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0954526877

```
cycle 5: E = -1.10475500331 dE = -0.034151 norm(grad) = 0.13499
```

Geometry optimization cycle 6

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates	dX	dY	dZ
H	0.000000 0.000000 0.364363	0.000000	0.000000	0.033331
H	0.000000 0.000000 1.135637	0.000000	0.000000	-0.033331

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↵chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

```
converged SCF energy = -1.11432815053439
```

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0537746620
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0537746620

```
cycle 6: E = -1.11432815053 dE = -0.00957315 norm(grad) = 0.0760489
```

Geometry optimization cycle 7

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates	dX	dY	dZ
H	0.000000 0.000000 0.407339	0.000000	0.000000	0.042976
H	0.000000 0.000000 1.092661	0.000000	0.000000	-0.042976

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↵chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

```
converged SCF energy = -1.11672330760192
```

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0316379732
1 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0316379732

```
cycle 7: E = -1.1167233076 dE = -0.00239516 norm(grad) = 0.0447429
```

Geometry optimization cycle 8

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.391420	0.000000	0.000000	-0.015919
H	0.000000	0.000000	1.108580	0.000000	0.000000	0.015919

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↵chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -1.11748127474604

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0052580454
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0052580454

```
cycle 8: E = -1.11748127475 dE = -0.000757967 norm(grad) = 0.007436
```

Geometry optimization cycle 9

Cartesian coordinates (Angstrom)

Atom	New coordinates			dX	dY	dZ
H	0.000000	0.000000	0.393689	0.000000	0.000000	0.002269
H	0.000000	0.000000	1.106311	0.000000	0.000000	-0.002269

WARN: Large deviations found between the input molecule and the molecule from
 ↵chkfile

Initial guess density matrix may have large error.

converged SCF energy = -1.11750572804771

----- SCF_Scanner gradients -----

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0004239054
1 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0004239054

```
cycle 9: E = -1.11750572805 dE = -2.44533e-05 norm(grad) = 0.000599493
```

Geometry optimization cycle 10

```
Cartesian coordinates (Angstrom)
Atom      New coordinates           dX      dY      dZ
H        0.000000  0.000000  0.393888  0.000000  0.000000  0.000199
H        0.000000  0.000000  1.106112  0.000000  0.000000 -0.000199
```

```
converged SCF energy = -1.11750588508088
```

```
----- SCF_Scanner gradients -----
```

	x	y	z
0 H	0.0000000000	0.0000000000	0.0000063561
1 H	0.0000000000	0.0000000000	-0.0000063561

```
cycle 10: E = -1.11750588508   dE = -1.57033e-07  norm(grad) = 8.9889e-06
```

```
converged SCF energy = -1.11750588508088
```

Hydrogen molecule, incorrect ground state energy: -24.78613211532389 eV
 Hydrogen molecule, optimized ground state energy: -30.408884271100387 eV

Для некорректной геометрии получилась завышенная энергия, а после оптимизации – почти что такая же энергия, как при вычислении с фиксированным расстоянием 0.74. В оптимальном состоянии энергия системы должна быть минимальна, так что результаты вполне разумны.

Подобный метод можно использовать и для поиска геометрии куда более сложных молекул.

Оптимизация в psi4

```
psi4.core.clean()

h_mol_bad = psi4.geometry("""
    H 0 0
    H 0 0 1.5
""")
# 1.5 – неверное расстояние в ангстремах, верное – 0.74

psi4.set_options({
    "basis": "STO-3G",
    "reference": "rohf",
})

# рассчитываем энергию "в точке" с неправильной геометрией
e_in_ht_h_bad = psi4.energy("scf", molecule=h_mol_bad)

# рассчитываем энергию, оптимизируя по ходу геометрии
e_in_ht_h_optimized = psi4.optimize("scf", molecule=h_mol_bad)
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
print(f"Hydrogen molecule, incorrect ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_h_bad)} eV
      ↵")
print(f"Hydrogen molecule, optimized ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_h_
optimized)} eV")
```

Optimizer: Optimization complete!
 Hydrogen molecule, incorrect ground state energy: -24.786132109551886 eV
 Hydrogen molecule, optimized ground state energy: -30.408884269506693 eV

47.2.7 Молекула этилового спирта

Молекула водорода – это все еще почти игрушечный пример. Давайте попробуем обсчитать молекулу этанола.

Задавать руками геометрию молекулы C_2H_5OH можно, но будет явно сложнее, чем для молекулы водорода. К счастью, это необязательно: psi4 умеет скачивать геометрию из базы данных PubChem по номенклатурному имени либо уникальному ChemId.

Note: Возможность поиска геометрии в PubChem – это уникальная “фишка” psi4. В pysc, в данном случае, пришлось бы искать молекулу в базе вручную, а потом самому забивать в код все координаты.

```
psi4.core.clean()

eth = psi4.geometry("pubchem:ethanol")

psi4.set_options({
    "basis": "STO-3G",
    "reference": "rohf",
})

e_in_ht_eth = psi4.energy("scf", molecule=eth)

print(f"Ethanol ground state energy: {e_in_ev(e_in_ht_eth)} eV")
```

Searching PubChem database **for** ethanol (single best match returned)
 Found 1 result(s)
 Ethanol ground state energy: -4139.64590826589 eV

47.3 Что узнали?

Разобрались с базовой теорией квантовой химии:

- как записать уравнение Шредингера для атома;
- какое получается аналитическое решение для атома водорода;
- как устроен метод Self-Consistent Field для вычисления волновых функций и энергии для задачи многих тел;
- как использовать SCF в python пакетах pyscf и psi4.

В примерах везде вычисляли ground state энергию, но, конечно, зная волновые функции, можно посчитать много чего еще. Например, можно вычислить спектр поглощения и энергию ионизации (энергии возбужденных состояний), моделировать взаимодействие молекул (найти равновесное состояние для двух систем), с помощью плагинов можно смоделировать рассеяние рентгена на молекуле... Квантовая механика постулирует, что любая измеримая величина является усреднением определенного оператора по волновой функции, поэтому в теории любой физической величину можно посчитать, зная волновую функцию. Возможности ограничены в основном вычислительной сложностью, а не теорией.

Для более глубокого погружения в практику квантовой химии можно пройти лабораторные работы [psi4: раз](#), [два](#).

CHAPTER
FORTYEIGHT

МОДЕЛЬ ИЗИНГА

Автор(ы):

- Синченко Семен

В этой лекции познакомимся с моделью Изинга, которая изначально была разработана для описания магнетизма, но оказалась настолько удачной и универсальной, что сегодня к решению именно этой задачи стараются свести многие проблемы реального мира, причем не только из физики. В следующем блоке подробно покажем, как к гамильтонианам типа Изинга, или, по-другому, “спиновым стеклам” могут быть сведены задачи комбинаторной оптимизации и квантовой химии. Так что знакомство с этой удивительной моделью, а также описывающим ее гамильтонианом нам просто необходимо!

Note: Специальные квантовые компьютеры компании D-Wave сконструированы так, что они могут решать вообще только одну задачу – нахождения основного состояния гамильтонианов типа Изинга. Но эта задача настолько распространена и важна, что эти компьютеры стали первыми в мире коммерческими квантовыми компьютерами! Кстати, далее этим компьютерам у нас посвящена *отдельная лекция*.

Ближайшее время посвятим довольно много времени объяснению этой модели. Это может показаться скучным и занудным, но это важно для понимания того, как это все работает и как решать с помощью вариационных квантовых алгоритмов реальные задачи!

48.1 Задача Изинга в одномерном случае

Note: Ниже попробуем на пальцах объяснить модель Изинга. Пробовать будем через цепочку атомов антиферромагнетика во внешнем магнитном поле. Ели вы плохо помните физику и вам это объяснение покажется сложным, то не расстраивайтесь – дальше также объясним задачу Изинга как задачу о поиске максимального разреза в графе – известную задачу комбинаторной оптимизации.

Пусть у нас есть, например, цепочка атомов, которые обладают магнитным моментом. Например, цепочка атомов антиферромагнетика. И мы прикладываем к этой цепочке внешнее магнитное поле.

Тогда, если поле маленькое, наши атомы будут стараться выстроиться в антиферромагнитный порядок, когда соседние из них имеют моменты, направленные в разные стороны. Но если поле уже большое, то оно будет стремиться “поворнуть” моменты по своему направлению. А если еще вспомнить, что магнитный момент атома является квантовой величиной и может быть в суперпозиции состояний в одну сторону и в противоположную, то не очень маленькое, но и не слишком большое поле будет переводить часть атомов именно в такие суперпозиции.

Reminder о квантовой физике

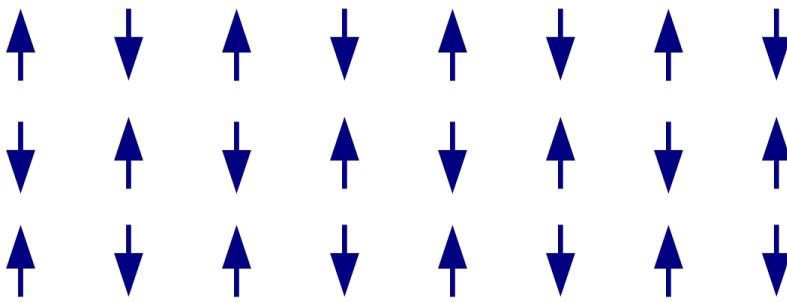


Fig. 48.1: Иллюстрация антиферромагнитного порядка

В квантовой механике есть фундаментальное уравнение, которое описывает динамику квантовых систем. Оно называется уравнением Шредингера: $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$, где \hat{H} – это оператор Гамильтона, или гамильтониан. Также его называют оператором полной энергии системы, так как в общем случае он равен сумме операторов кинетической и потенциальной энергии. Начиная с этой лекции будем очень часто обращаться к этому оператору, но в целом в нем нет ничего принципиально сложного. Это такой же эрмитов оператор, как и другие. А наблюдаемая величина, которую получаем при [измерении](#) этого оператора – это энергия системы.

Давайте теперь запишем гамильтониан такой системы. Для представления магнитных моментов будем использовать оператор σ^z – другими словами, спин в направлении оси Z . Если кто-то забыл, как выглядит оператор σ^z , то рекомендуем еще раз просмотреть раздел про [операторы Паули](#) первой лекции. Далее будем очень активно использовать эти матрицы для представления задач реального мира!

Для начала, в случае если внешнего поля нет, мы должны записать взаимодействие соседних атомов. Так как у нас антиферромагнетик, минимальная энергия достигается в случае, если каждый спин направлен с соседними. Это просто оператор $\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$, который действует на все пары соседних спинов. Ну и сразу введем некоторую константу обменного взаимодействия J , чтобы потом нам было удобно сравнивать ее с внешним полем. В итоге, для цепочки из N спинов, получаем:

$$\hat{H}_{h=0} = J \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$$

А теперь давайте добавим внешнее поле h . В этом случае поле просто действует на все спины и пытается выстроить их в зависимости от своего направления, например, вниз. Тогда полный гамильтониан такой системы можно записать в виде:

$$\hat{H}_{h \neq 0} = J \sum_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - h \sum_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^z$$

48.2 Задача Изинга как задача о максимальном разрезе в графе

Задача о максимальном разрезе в графе – это очень известная задача комбинаторики. Она относится к классу NP -трудных, и к ней можно свести все другие NP задачи. При этом ее формулировка одна из самых простых среди всего класса задач. Формулируется она следующим образом.

Нам дан график – набор вершин V и связывающих их ребер E . Нам надо найти такое разделение вершин V на два непересекающихся набора V_1, V_2 , что число ребер между вершинами из разных наборов будет максимально.

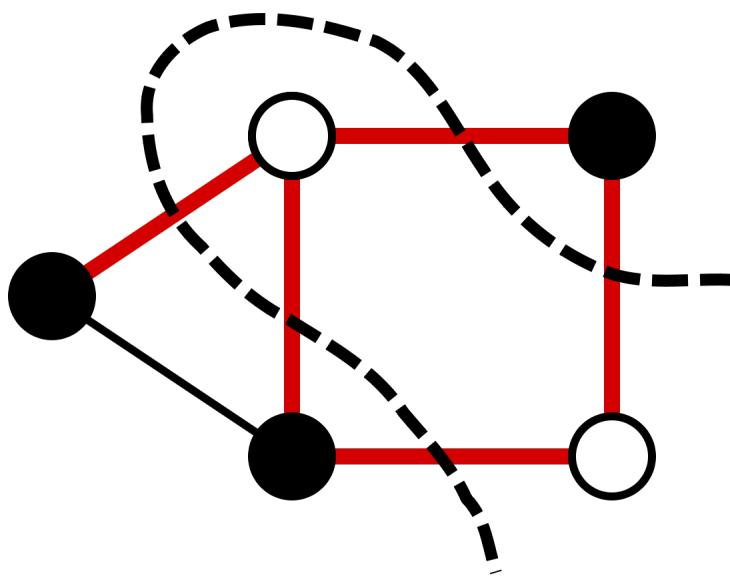


Fig. 48.2: Иллюстрация задачи о максимальном разрезе в графе

Теперь давайте представим, что каждой вершине нашего графа сопоставили кубит. Для этих кубитов можем производить измерения по оси Z , чтобы понять, как направлен тот или иной спин. И давайте запишем вот такой гамильтониан и внимательно на него посмотрим:

$$\hat{H} = \sum_{u,v \in E} \hat{\sigma}_u^z \hat{\sigma}_v^z$$

Тут суммирование $u, v \in E$ идет по всем ребрам графа, а u, v – вершины инцидентные ребрам. Если вспомнить, что собственные значения σ^z это ± 1 для, соответственно, спина “вверх” и спина “вниз”, то не трудно понять, в каком случае у нас будет минимум энергии этого гамильтониана. А будет он тогда, когда максимальное число пар вершин u, v имеют разную ориентацию своих спинов. Ведь если они имеют одинаковую направленность (причем не важно, $+1$ или -1), их произведение будет равно 1, но если направленность разная, то их произведение даст нам -1 . Таким образом, минимум энергии такого гамильтониана достигается тогда, когда мы разбили наши вершины на две группы – спин “вверх” и спин “вниз” – причем число ребер между этими группами максимальное. А это в чистом виде формулировка задачи о максимальном разрезе в графе!

Note: Тематика квантовой физики мало обсуждалась в первых лекциях, но нам пока достаточно знать лишь то, что для любой физической системы (включая квантовую) стремится в состояние с минимальной энергией. Например, тело, подброшенное вверх, стремится упасть на землю, а возбужденный атом стремится релаксировать в невозбужденное состояние.

При этом из квантовой физики помним, что для реальных физических систем наиболее вероятными являются состояния с минимальной энергии и системы стремятся в эти состояния прийти. Теперь для простоты предположим, что наш граф – это просто цепочка, то есть ребра есть лишь между соседними в одномерном пространстве вершинами. Ну и теперь давайте сформулируем нашу задачу о максимальном разрезе чуточку сложнее – нам надо найти не просто максимальный разрез, а такой разрез, который самый большой при наименьшем числе вершин в наборе V_1 . И поскольку теперь у нас два вклада в стоимость, то нам нужны коэффициенты, которые покажут, что важнее. Пусть это будут J и h . Тогда гамильтониан соответствующей модели Изинга можно записать так:

$$\hat{H} = J \sum_{i=0}^{N-1} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - h \sum_{i=0}^N \hat{\sigma}_i^z$$

Как видно, это тот же самый гамильтониан, который получили и для моделирования антиферромагнетиков. То есть задача об основном состоянии цепочки антиферромагнитных частиц во внешнем поле эквивалентна задаче о максимальном разрезе в графе-цепочке при некотором штрафе за одно из выделенных направлений спинов. Эквивалентность в данном случае значит, что:

- решив задачу о максимальном разрезе, можно найти и основное состояние физической системы;
- как-то смоделировав физическую систему, подождав пока она релаксирует, после чего измерив ее, получим конфигурацию, отвечающую решению задачи о максимальном разрезе.

Note: Одномерная цепочка атомов, или поиск максимального разреза в графе-цепочке, является простым случаем и не является NP -задачей. Однако уже в двумерном случае эта задача становится сильно сложнее, как и, например, если в цепочке атомов ферромагнетика добавим взаимодействие не только соседних спинов, но и взаимодействие с соседями соседа. Аналогично, модель вида Изинга сильно усложняется при добавлении недиагональных (off-diagonal elements) элементов гамильтониана, например, когда внешнее поле направлено в другом направлении и второй член гамильтониана принимает вид $h \sum_{i=N} \sigma_i^x$. Более подробное исследование данной модели приводится в *этой продвинутой лекции*.

48.3 Модель Изинга на чистом NumPy

Давайте попробуем реализовать одномерный гамильтониан Изинга на чистом NumPy/SciPy в виде разреженной матрицы. Для этого вспомним, что действуя оператором σ^z на i -й кубит, одновременно действуем единичным оператором на все остальные, а потом перемножаем все операторы произведением Кронекера. Из *лекций по линейной алгебре* помним также об ассоциативности произведения Кронекера, чем и воспользуемся:

```
import numpy as np
from scipy import sparse
from scipy.sparse import linalg as sl

def sigmaz_k(k: int, n: int) -> (sparse.csr_matrix):
    left_part = sparse.eye(2 ** k)
    right_part = sparse.eye(2 ** (n - 1 - k))

    return sparse.kron(
        sparse.kron(
            left_part,
            sparse.csr_matrix(np.array([[1, 0], [0, -1], [0, 0]]))
        ),
        right_part
    )
```

А теперь можем реализовать и сам оператор Изинга:

```
def ising(j: float, h: float, n: int) -> (sparse.csr_matrix):
    res = sparse.csr_matrix((2 ** n, 2 ** n), dtype=np.complex64)

    for i in range(n - 1):
        res += j * sigmaz_k(i, n) * sigmaz_k(i + 1, n)
        res -= h * sigmaz_k(i, n)

    res -= h * sigmaz_k(n - 1, n)

    return res
```

Если внешнего поля нет, спины выстраиваются в полный антиферромагнитный порядок, в чем легко убедиться. Создадим оператор для такой модели и, например, 10 спинов (или 10 вершин в графе, если говорим в терминах Max-Cut):

```
op = ising(1, 0, 10)
solution = sl.eigs(op, which="SR", k=1, return_eigenvectors=True)
print(f"Energy: {solution[0][0]}")
```

```
Energy: (-9.000000000000018-2.208468631860285e-16j)
```

Note: Тут пользуемся функциями из ARPACK – набором рутин для линейной алгебры разреженных систем. Более подробно о способах и алгоритмах классических решений задачи о собственных значениях расскажем в [одной из следующих лекций](#), полностью посвященной этой теме. Пока же просто используем эту рутину как “черный ящик”. Более подробное описание этой функции и ее аргументов можно посмотреть в [документации библиотеки SciPy](#).

Эта энергия соответствует антиферромагнитному порядку, в этом легко убедиться, нарисовав спины и формулу на бумажке. Внимательный читатель заметил, что в этот раз вернули также и первый собственный вектор, который в нашем случае является волновой функцией основного состояния. А как знаем, квадраты элементов вектора волновой функции дают нам вероятности соответствующих битовых строк (если для вас это все звучит дико, то очень рекомендуем вернуться к [лекции про кубит](#)). Давайте посмотрим на эту битовую строку, иначе на порядок наших спинов в решении (или на разбиение вершин графа на два подмножества в терминах Max-Cut):

```
def probs2bit_str(probs: np.array) -> (str):
    size = int(np.log2(probs.shape[0]))
    bit_s_num = np.where(probs == probs.max())[0][0]

    s = f"{bit_s_num:b}"
    s = "0" * (size - len(s)) + s

    return s

probs = solution[1] * solution[1].conj()
print(probs2bit_str(probs))
```

```
0101010101
```

Теперь давайте попробуем добавить внешнее поле с коэффициентом, равным удвоенному значению константы обменного взаимодействия. В терминах комбинаторной задачи, добавляем штраф, равный 2 умножить на число спинов, направленных вверх.

```
def external_field(j: float, h: float, n: int) -> (None):
    op = ising(j, h, n)
    solution = sl.eigs(op, which="SR", k=1, return_eigenvectors=True)
    print(f"Energy: {solution[0][0]}")

    probs = solution[1] * solution[1].conj()
    print(probs2bit_str(probs))

external_field(1, 2, 10)
```

```
Energy: (-11.00000000000007-1.05712250567288e-16j)
0101010010
```

Видим, что теперь наш антиферромагнитный порядок уже не полный. В целом, данная модель довольно интересная, так как при некотором отношении $\frac{h}{J}$ у нас происходит фазовый переход от полной упорядоченности, а при дальнейшем росте h приходим к одинаковой ориентации всех спинов, в чем легко убедиться, взяв, например, $h = 100$:

```
external_field(1, 100, 10)
```

```
Energy: (-991.000000000039-3.488261257113687e-14j)
0000000000
```

48.4 Заключение

В этой лекции на базовом уровне познакомились с моделью Изинга – очень важным концептом в квантовом машинном обучении. Узнали, что:

- модель Изинга изначально была создана для объяснения магнетизма;
- нахождение решений для модели Изинга в общем случае – *NP-полная* задача;
- модель Изинга также может быть сформулирована в терминах задачи о максимальном разрезе в графе (и наоборот);
- в классической модели Изинга существуют интересные фазовые переходы;
- модель Изинга легко реализовать в коде, используя SciPy, но размерность задачи растет очень быстро.

ТОЧНОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА. МЕТОД ТРАНСФЕР-МАТРИЦЫ.

Автор(ы):

- Бажанов Дмитрий

В этой лекции более подробно обсудим модель Изинга, *рассмотренную ранее*. Чуть глубже погрузимся в физику этой модели, а также рассмотрим ее частные случаи, которые имеют точные аналитические решения. Для этого также познакомимся с методом *трансфер-матрицы*.

49.1 Модель Изинга

Модель Изинга представляет собой широко распространенную математическую модель статистической физики, которая может применяться в различных областях человеческой деятельности.

Note: Несмотря на свою известность, многие не знают, что модель названа в честь Эрнеста Изинга – автора работы, опубликованной в 1925 г. [Isi25], в которой он впервые представил данную модель и которая стала его первой и по сути *единственной* публикацией.

Суть самой модели можно постичь, например, при стремлении описать свойства намагничивания материала. Представим себе, что имеется магнитная решетка (она может быть одномерной, двумерной или трехмерной) каждой вершине которой сопоставляется число называемое *спином* (σ) и принимающее значение +1 или -1 (соответственно поле “↑” или поле “↓”). Каждому из 2^N (где N – число вершин решетки) возможных вариантов расположения спинов (или намагниченности) приписывается энергия, величина которой определяется условиями попарного взаимодействия спинов соседних вершин. Например, энергия одномерной модели Изинга, в которой спины взаимодействуют только с ближайшими соседями (посредством параметра обменного взаимодействия J) и с однородным внешним полем (H), имеет вид:

$$E(\{\sigma\}) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (49.1)$$

Note: Обратите внимание, что в этой лекции используется терминология из физики (а не области квантовых вычислений, которая используется в большинстве других лекций): H – это внешнее поле, не гамильтониан, или энергия. А энергия обозначается классическим для физики E .

Это выражение соответствует периодическим граничным условиям, при которых первый и $N + 1$ -й спины отождествляются, то есть

$$\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1.$$



Fig. 49.1: Эрнст Изинг, 1900-1998

В этом случае можно считать, что система спинов находится на окружности, то есть первый и N -й спины являются ближайшими соседями и взаимодействуют между собой. Для описания такой системы необходимо найти статистическую сумму Z , в которой содержится полная информация о всех состояниях системы. Тогда другие характеристики системы, такие как удельная энергия, свободная энергия, энтропия, намагниченность, магнитная восприимчивость и др. вычисляются через статистическую сумму или ее производные.

Статистическая сумма рассматриваемой модели при температуре θ есть сумма по всем спиновым конфигурациям $\{\sigma\}$:

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}}. \quad (49.2)$$

Сумму по состояниям $\{\sigma\}$ можно понимать как последовательное суммирование по значениям всех переменных σ_i :

$$\sum_{\{\sigma\}} \equiv \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} .$$

Следует заметить, что количество членов статистической суммы экспоненциально растет с увеличением числа вершин, соответственно увеличивается и время расчета термодинамических параметров для большого количества частиц.

49.2 Матричный подход

Для аналитического решения модели Изинга как правило применяется матричный подход. В рамках такого подхода статистическая сумма многих решеточных моделей Изинга может быть записана в виде следа некоторой степени *трансфер-матрицы*. Чтобы выразить статистическую сумму (??) через трансфер-матрицу, сначала представим гиббсовскую экспоненту в виде произведения N множителей

$$e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}} = T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-1} \sigma_N} T_{\sigma_N \sigma_1} = \prod_{j=1}^N T_{\sigma_j, \sigma_{j+1}}, \quad (49.3)$$

где

$$T_{\sigma\sigma'} = \langle \sigma | T | \sigma' \rangle = e^{t\sigma\sigma' + \frac{h}{2}(\sigma+\sigma')}, \quad (49.4)$$

а t и h введены для более компактного написания формул и выражаются через J , H и θ следующим образом

$$t = \frac{J}{\theta}, \quad h = \frac{H}{\theta}.$$

Числа $T_{\sigma\sigma'}$ (??) будем дальше рассматривать как матричные элементы матрицы T , строки и столбцы которой вместо натуральных чисел нумеруются изинговскими переменными σ и σ' . Так как изинговские переменные принимают два значения: $\sigma, \sigma' = \pm 1$, то матрица T является квадратной матрицей размера 2×2 . Договоримся дальше считать, что значение $\sigma = 1$ ($\sigma' = 1$) соответствует первой строке (первому столбцу), а значение $\sigma = -1$ ($\sigma' = -1$) соответствует второй строке (второму столбцу). Матрица T с элементами (??) в таком случае имеет следующий явный вид:

$$T = \begin{pmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{t+h} & e^{-t} \\ e^{-t} & e^{t-h} \end{pmatrix} \quad (49.5)$$

Матрица T называется *трансфер-матрицей Крамерса–Ваннье*.

Равенство (??) позволяет записать статистическую сумму (??) в следующем виде

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \sum_{\sigma_N=\pm 1} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} T_{\sigma_N\sigma_1}. \quad (49.6)$$

Структура слагаемых позволяет переписать сумму в правой части последнего равенства следующим образом:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} \sum_{\sigma_N=\pm 1} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} T_{\sigma_N\sigma_1} = \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}=\pm 1} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}} \sum_{\sigma_N=\pm 1} T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} T_{\sigma_N\sigma_1} \end{aligned} \quad (49.7)$$

Теперь, поскольку $T_{\sigma\sigma'}$ являются матричными элементами матрицы T , заметим, что сумма

$$\sum_{\sigma_N=\pm 1} T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} T_{\sigma_N\sigma_1}$$

равна $T_{\sigma_{N-1}\sigma_1}^2$, то есть матричному элементу матрицы T^2 , которая получается в результате (матричного) умножения двух матриц T (является квадратом матрицы T). Тогда сумма в правой части равенства (??) равна

$$\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-1}} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}} T_{\sigma_{N-1}\sigma_1}^2. \quad (49.8)$$

Дальше используем равенство

$$\sum_{\sigma_{N-1}} T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}} T_{\sigma_{N-1}\sigma_1}^2 = T_{\sigma_{N-2}\sigma_1}^3,$$

где $T^3 = T \cdot T^2$ – куб матрицы T , и перепишем выражение (??) в виде

$$\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_{N-2}} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-3}\sigma_{N-2}} T_{\sigma_{N-2}\sigma_1}^3.$$

Продолжим этот процесс и просуммируем последовательно по всем σ_i , $i = 2, \dots, N$, кроме σ_1 , тогда равенство (??) преобразуется к виду

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} T_{\sigma_1\sigma_1}^N$$

В последнем равенстве суммируются диагональные элементы матрицы T^N , которая есть матрица T в степени N . Сумма диагональных элементов матрицы – это след данной матрицы. Таким образом, окончательно получаем для статистической суммы одномерной модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей и внешним полем, при периодических граничных условиях, следующую формулу:

$$Z(\theta, H, N) = \text{Tr } T^N. \quad (49.9)$$

Отметим несколько обстоятельств, связанных с полученным выражением для статистической суммы:

1. формула (??) является следствием трансляционной инвариантности рассматриваемой системы. Трансляционная инвариантность в данном случае означает, что энергия системы спинов не изменяется при пространственном сдвиге, то есть спиновые конфигурации $\{\sigma\}$ и $\{\sigma'\}$, где $\sigma'_i = \sigma_{i+1}$, имеют одинаковые энергии;
2. представление гиббсовской экспоненты в виде произведения (??), где множители $T_{\sigma\sigma'}$ имеют вид (??), не является единственным возможным. Можно выбрать трансфер-матрицу по-другому. Например, если взять $\tilde{T}_{\sigma\sigma'} = e^{t\sigma\sigma' + h\sigma}$, то тогда: $e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}} = \prod_{j=1}^N \tilde{T}_{\sigma_j \sigma_{j+1}}$. Таким образом, в выборе трансфер-матрицы существует некоторый произвол. Значение статистической суммы не зависит от этого произвола, поэтому им естественно распорядиться исходя из каких-то дополнительных соображений, например так, чтобы матрица обладала какой-то симметрией, что упрощает вычисления. Для рассмотренной выше одномерной модели Изинга трансфер-матрица была выбрана вещественной симметричной (то есть эрмитовой);
3. если выбранная нами трансфер-матрица T является эрмитовой, то с помощью унитарного преобразования U ее можно преобразовать к диагональной форме:

$$\hat{T} = U^{-1} T U = \text{dgn}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r\},$$

где символом dgn обозначена диагональная матрица, на главной диагонали которой расположены ее собственные значения. В общем случае размерность такой матрицы равна величине $r = s^n$, где s – число состояний спина в вершине, а n – число обменных взаимодействий спинов цепочки (в рассматриваемой нами одномерной модели Изинга $s = 2$ и $n = 1$). В этом случае статистическая сумма (??) переписывается к следующему виду:

$$Z(\theta, H, N) = \text{Tr } \hat{T}^N = \sum_i^r \lambda_i^N, \quad (49.10)$$

При этом величина статистической суммы не меняется, поскольку след матрицы является ее инвариантом. Отметим, что процедуру диагонализации трансфер-матрицы можно провести множеством способов. В зависимости от подбора диагонализирующей матрицы U её можно провести таким образом, что на первом месте в матрице \hat{T} будет стоять её главное (единственное максимальное вещественное) собственное значение, которое всегда существует по теореме Фробениуса–Перрона. Если на первое место в спектре трансфер-матрицы поставить ее главное собственное значение, то статистическую сумму (??) можно переписать как:

$$Z(\theta, H, N) = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N + \dots + \left(\frac{\lambda_r}{\lambda_1} \right)^N \right] \quad (49.11)$$

Тогда при переходе к термодинамическому пределу ($N \rightarrow \infty$) в выражении (??) все слагаемые, кроме первого, стремятся к нулю,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N = 0, \quad i = 2, 3, \dots, r \quad (49.12)$$

и выражение для статистической суммы преобразуется к виду $Z = \lambda_1^N$.

В результате все термодинамические и магнитные функции системы – свободная энергия системы, приходящаяся на один спин,

$$F = -\frac{\theta}{N} \ln Z = -\theta \ln \lambda_1, \quad (49.13)$$

энтропия

$$S = -\frac{\partial F}{\partial \theta} = \ln \lambda_1 + \frac{\theta}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta}, \quad (49.14)$$

теплоемкость

$$C = -\theta \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} = 2 \frac{\theta}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta} + \frac{\theta^2}{\lambda_1} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta^2} - \frac{\theta^2}{\lambda_1^2} \left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta} \right)^2, \quad (49.15)$$

намагниченность

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\theta}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial H}, \quad (49.16)$$

и магнитная восприимчивость

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{\theta}{\lambda_1^2} \left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial H} \right)^2 + \frac{\theta}{\lambda_1} \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial H^2} \quad (49.17)$$

определяются только через главное собственное значение трансфер-матрицы.

49.3 Решение одномерной модели

Теперь вернемся к аналитическому решению рассматриваемой нами классической одномерной модели Изинга ($s = 2$ и $n = 1$). Как показали выше, задача сводится к сведению трансфер-матрицы (??) диагональному виду. Для этого воспользуемся правилами линейной алгебры и решим характеристическое уравнение для трансфер-матрицы и найдем её собственные значения:

$$\det(T - \lambda I) = \det \left(T - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = 0, \quad (49.18)$$

где I – единичная матрица, λ – действительная переменная. Раскрывая определитель (??), находим искомое характеристическое уравнение:

$$\lambda^2 - \lambda(e^{t+h} + e^{t-h}) + e^{2t} - e^{-2t} = 0 \quad (49.19)$$

решением которого являются два собственных значения:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} e^t (e^h + e^{-h}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{e^{2t} (e^h + e^{-h})^2 - 4e^{2t} + 4e^{-2t}} = e^t \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2t} \sinh^2(h) + e^{-2t}}, \quad (49.20)$$

где $\cosh(h) = \frac{e^h + e^{-h}}{2}$ – гиперболический косинус и $\sinh(h) = \frac{e^h - e^{-h}}{2}$ – гиперболический синус. Следовательно статистическая сумма рассматриваемой модели записывается в следующем виде:

$$Z = \text{Tr} T^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N.$$

Здесь следует отметить, что для всех физических значений параметров t и h ($\in \mathbb{R}, < \infty$) выполняется условие: $|\lambda_+| > |\lambda_-|$. Тогда в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) значение λ_+ преобладает над λ_- и удовлетворяет (??), а статистическая сумма преобразуется к виду: $Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N \sim \lambda_+^N$. Отсюда можно получить выражение для удельной свободной энергии системы, приходящейся на один спин (??) (с точностью до множителя $(-\theta)$):

$$f(t, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{N} = \ln \lambda_+ = t + \ln \left(\cosh(h) + \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}} \right)$$

и для намагниченности (??):

$$m = -\frac{\partial f(t, h)}{\partial h} = \frac{\cosh(h) + \frac{\sinh(h) \cosh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}}}{\cosh(h) + \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}} = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}},$$

которая является аналитической функцией h и исчезает при $h \rightarrow 0$ (так как $\sinh(h) \rightarrow 0$). Таким образом рассматриваемая модель не допускает фазового перехода при любой положительной температуре ($\theta > 0$). Она претерпевает *paramagnитный-ферромагнитный* фазовый переход только при $\theta = 0$, в этом случае спонтанная намагниченность равна $|m| = 1$.

49.4 Заключение

В этой лекции ознакомились с аналитическим решением одномерной модели Изинга методом *трансфер-матрицы*. В заключении хотелось бы сказать, что модель Изинга поддается многим обобщениям, будь то более высокие измерения, различные решетки или модифицированные взаимодействия.

ЗАДАЧИ КОМБИНАТОРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Автор(ы):

- Синченко Семен

В обзоре квантовых алгоритмов мы уже касались темы задач, для которых не существует эффективных классических алгоритмов, а сегодня разберем еще больше примеров. В конце кратко обсудим пару способов, как решать такие задачи на классических компьютерах, а также в чем их принципиальные проблемы и ограничения.

Лекция будет построена так:

- задача о максимальном разрезе в графе;
- задача о выделении сообществ в графе;
- задача о Гамильтоновых циклах и коммивояжере;
- задача о рюкзаке;
- жадные алгоритмы;
- метод имитации отжига.

Какого-то сложного кода или больших формул с дираковскими значками из квантовой механики тут не будет, так что можно немного передохнуть, расслабиться и насладиться чтением. Для тех, кто хорошо знаком с задачами целочисленной оптимизации, в этой лекции точно не будет ничего нового, и ее можно будет пропускать, ну или пролистать по диагонали.

50.1 Задача о максимальном разрезе в графе

Мы уже немного говорили об этой задаче в лекции про модель Изинга из-за их очень большого сходства. Но давайте еще раз вспомним, что это за модель такая. Ну и сразу рассмотрим ее максимально общий случай. Итак, у нас есть граф на множестве вершин V , связанных множеством ребер E . Каждое ребро имеет две инцидентных вершины u, v ; в общем случае порядок u, v важен, тогда мы говорим о направленном (*directed*) графе. Каждому ребру можно также сопоставить действительное число w , тогда у нас будет так называемый *взвешенный* граф. Наша цель – разбить множество вершин V на два непересекающихся сообщества V_1, V_2 . Давайте сформулируем функцию стоимости:

$$C = \sum_{u,v,w \in E} w(\mathbf{1}(u \in V_1, v \in V_2) + \mathbf{1}(u \in V_2, v \in V_1))$$

То есть в общем случае это просто сумма всех весов ребер между двумя сообществами. В общем случае эта задача является NP -полной. В теории к этой задаче можно также свести любую другую NP задачу за полиномиальное время.

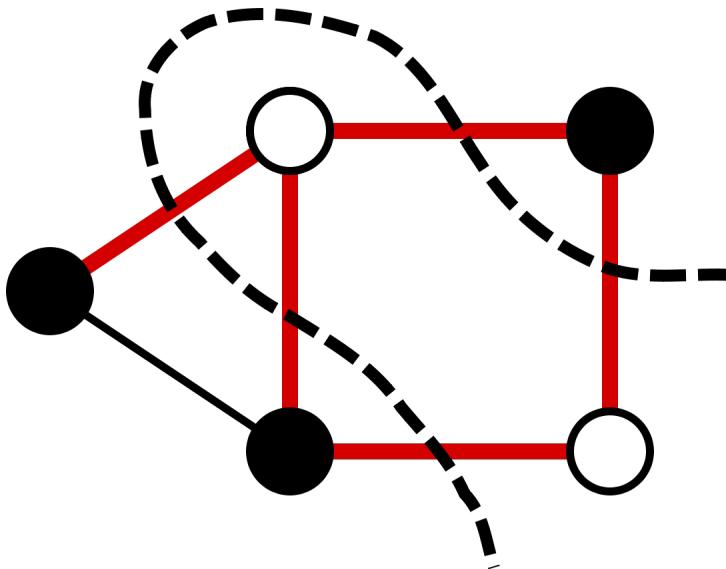


Fig. 50.1: Иллюстрация задачи о максимальном разрезе в графе

50.2 Задача о выделении сообществ в графах

Задача о выделении сообщества в графах это уже более практическая и понятная задача. Она находит применение во многих областях, но одно из самых очевидных применений – это социология (в том числе анализ социальных сетей), когда мы хотим, анализируя контакты людей, выделить из них сообщества для дальнейшего анализа. Эта задача также является NP -трудной, так как существует экспоненциально много способов разбить вершины на множества и при этом для общего случая не существует полиномиального алгоритма решения. Ну и даже если мы найдем какое-то решение, то проверка того, что оно лучшее возможна также лишь за экспоненциальное время. Хотя для этой задачи известны относительно быстрые приближенные алгоритмы, нам очень трудно понять, насколько хорошее решение они дают для действительно больших графов.

Note: Для работы с графами мы будем пользоваться библиотекой NetworkX. Она написана на чистом Python и плохо подходит для работы с большими графиками, зато имеет простой интерфейс и легко устанавливается на любую систему. Ее можно установить из репозитория PyPI, используя команду

```
pip install networkx
```

Одним из первых известных наборов данных для задачи выделения сообществ является “Клуб каратэ Захарии” (Zachary’s Karate Club) [Zac77]. Для этого набора данных точно известно, к какому из двух сообществ принадлежит каждая из вершин. В этом клубе каратэ был внутренний конфликт, и одна часть людей была в группе одного из инструкторов (Mr. Hi), а другая – в группе администратора (Officer).

```
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = 'retina'

zachary = nx.generators.social.karate_club_graph()
nx.draw(
```

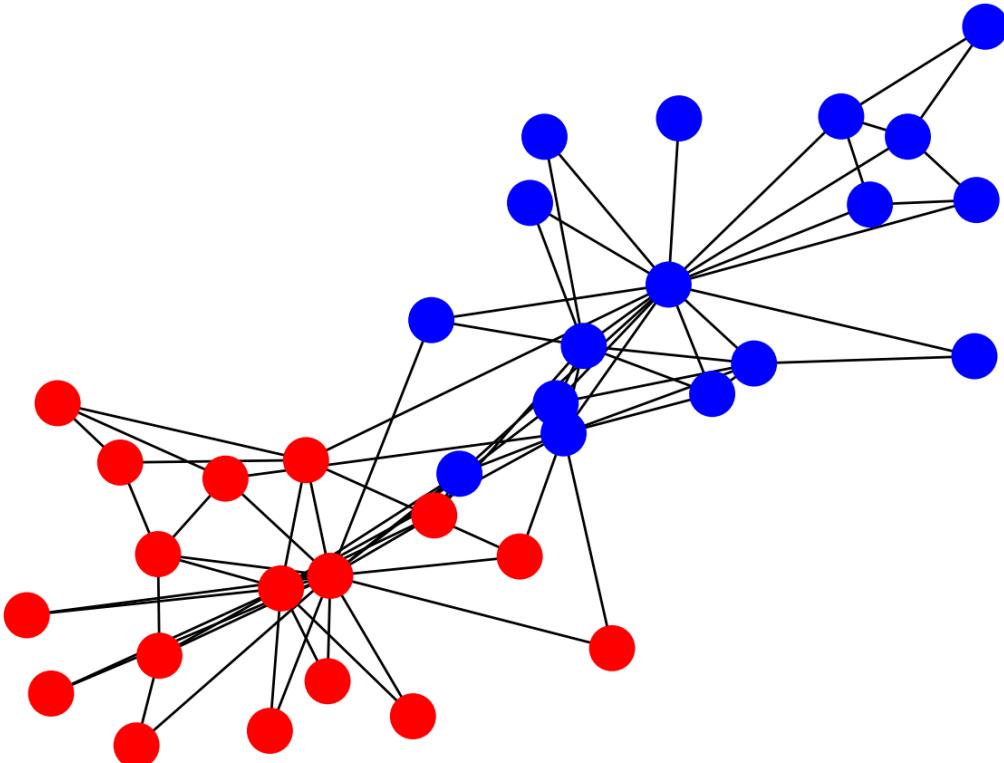
(continues on next page)

(continued from previous page)

```

zachary,
node_color=[
    {"Officer": "r", "Mr. Hi": "b"}.get(dt["club"]) for _, dt
in zachary.nodes(data=True)
],
plt.show()

```



Задачу о выделении сообществ в тривиальном случае разбиения графа на два подмножества можно свести к знакомой нам задаче о максимальном разрезе. Правда, в отличие от задачи о максимальном разрезе, в случае с сообществами мы хотим иметь минимальное число ребер между ними. Но это можно сделать просто поменяв пару символов в выражении для стоимости:

$$C = \sum_{u,v,w \in E} w(\mathbf{1}(u \in V_1, v \in V_1) + \mathbf{1}(u \in V_2, v \in V_2))$$

Но на самом деле мы только что свели более простую задачу о минимальном разрезе с неотрицательными весами к более сложной задаче Max-Cut. А еще выбранная нами метрика (количество ребер) – не самый лучший вариант для этой задачи. Гораздо лучше подойдет модулярность (modularity), предложенная физиком Марком Ньюманом [New06]:

$$Q(C) = \frac{1}{2|E|} \sum_{e \in E} B_{e_{src}, e_{dst}} \delta(c_{e_{src}}, c_{e_{dst}})$$

Тут B – это матрица модулярности (modularity matrix). Ее элементы определяются через степени d_i соответствующих вершин графа (степень вершины – это число ребер, связанных с данной вершиной) и матрицу

смежности A графа:

$$B_{ij} = A_{ij} - \frac{d_i d_j}{2|E|}$$

Условно, модулярность – это разница между числом ребер внутри сообществ в нашем графе и числом ребер внутри сообществ в графе с таким же числом ребер, но сгенерированным случайным образом. Это довольно сложное понятие, которое выходит за рамки нашего курса, но все равно потребуется нам, чтобы показать, что задача оптимизации модулярности может быть сформулирована как задача Изинга.

Note: Это интересно, но одним из первых алгоритмов для решения задачи о выделении сообществ в графах был алгоритм имитации отжига, который изначально был создан именно для решения проблемы гамильтонианов типа Изинга. Причина заключается в том, что модулярность очень схожа по виду с выражением энергии для магнетиков.

Мы тут пока описали лишь простой случай модулярности для не взвешенного и ненаправленного графа. Но даже в таком случае для задачи точной оптимизации модулярности не известно полиномиального алгоритма решения. Поэтому обычно применяют приближенные или жадные алгоритмы, и они вроде даже неплохо работают. Но мы почти не знаем, насколько действительно далеко они от самых оптимальных решений, особенно для больших графов.

50.3 Задача о Гамильтоновых циклах

Перед тем как перейти к интересной и важной задаче поиска Гамильтоновых циклов, мы вспомним задачу о мостах Кенингсберга (Калининграда). Ведь именно гуляя по этому городу и пытаясь решить эту задачу, Леонард Эйлер изобрел теорию графов. Суть задачи: нужно обойти все острова города, пройдя по каждому мосту лишь один раз, и вернуться на тот остров, откуда стартовал. Эйлер, создав математический аппарат теории графов, сумел доказать, что это невозможно, ну а дальше завертелось, и вот мы с вами тут.

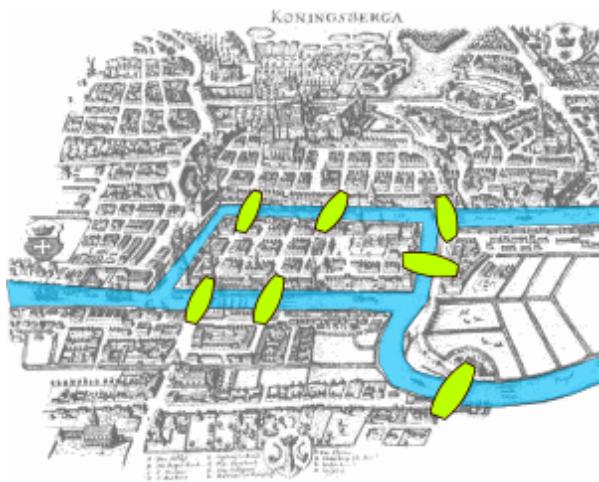


Fig. 50.2: Мосты Кенингсберга, думая о которых, Эйлер изобрел теорию графов

Такой путь в графе, когда мы проходим по каждому ребру лишь один раз, называется Эйлеров цикл. Но нам будет более интересен схожий класс циклов – Гамильтоновы циклы. Это такие циклы, которые проходят через каждую вершину графа ровно один раз.

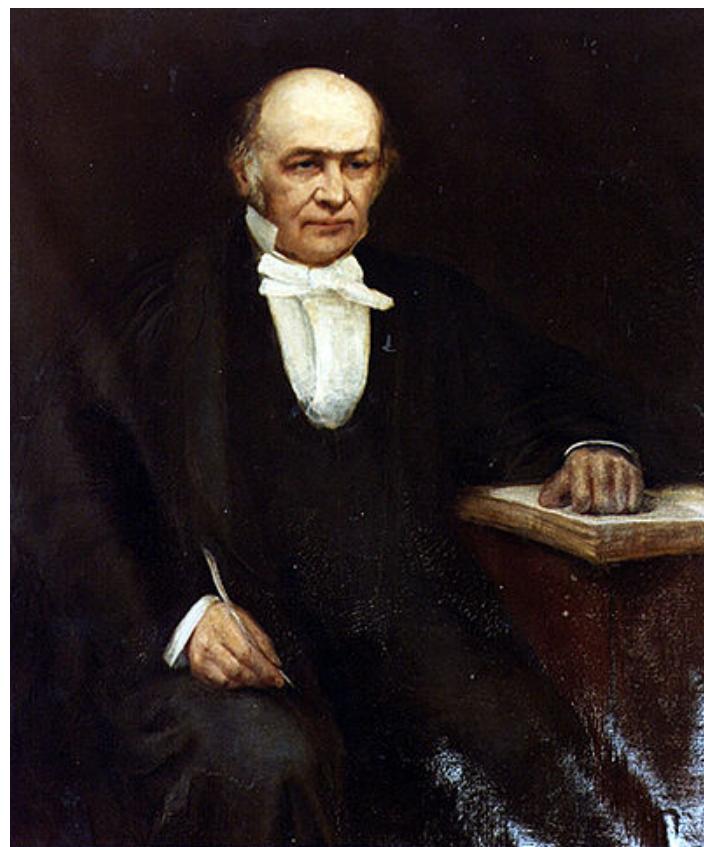


Fig. 50.3: Сер Уильям Роэн Гамильтон, 1805 - 1865

Для Гамильтонова цикла мы можем ввести N^2 бинарных переменных $x_{i,p}$. Каждая переменная $x_{i,p}$ равна 1, если i -я вершина находится на p -м шаге пути и 0 если нет. Тогда легко ввести условия существования такого цикла:

$$\begin{cases} \sum_p x_{i,p} = 1 & \forall i \\ \sum_i x_{i,p} = 1 & \forall p \\ (x_{i,p} = 1) \wedge (x_{j,p+1} = 0) & \forall i, j \notin E \end{cases}$$

Тут первое условие говорит нам о том, что каждая вершина должна попасть в путь. Второе условие – каждый шаг пути содержит строго одну вершину. Ну а третий шаг – просто утверждение о том, что между вершинами соседних шагов пути должно быть ребро. На самом деле, эти три условия можно переписать в единую функцию стоимости:

$$C = (1 - \sum_i x_{i,p})^2 + (1 - \sum_p x_{i,p})^2 + \sum_{u,v \notin E} x_{u,p} x_{v,p+1}$$

Правда, в этом случае мы должны минимизировать, а не максимизировать эту величину.

50.4 Задача коммивояжера

Задачу коммивояжера мы (а точнее наш смартфон) решаем каждый раз, когда строим в Google Maps маршрут, включающий несколько точек. Зная, как формулируется задача о гамильтоновых циклах, сформулировать задачу коммивояжера очень легко.

По сути нам требуется взять все Гамильтоновы циклы и выбрать из них тот, для которого сумма весов по содержащимся в нем ребрам будет минимальной. Но надо помнить, что цикл обязательно должен быть в первую очередь Гамильтоновым, поэтому мы добавим веса слагаемых в выражение для стоимости, причем веса, отвечающие за сам цикл, будут больше:

$$C = A(1 - \sum_i x_{i,p})^2 + A(1 - \sum_p x_{i,p})^2 + A \sum_{u,v \notin E} x_{u,p} x_{v,p+1} + B \sum_{u,v,w \in E} w x_{u,p} x_{v,p+1}$$

Тут A, B это веса, которые лучше выбирать так, что $0 < Bw < A \quad \forall u, v, w \in E$.

Note: Функции стоимости для задачи Гамильтоновых циклах и задачи коммивояжера являются все же приближением исходной формулировки, так как формально мы переходим от задачи с ограничениями к задаче без ограничений. В общем случае нет гарантии, что решение задачи без ограничений будет эквивалентно решению задачи с ограничениями. Но для целей нашей лекции и курса в целом мы опустим сложный момент исследования эквивалентности этих задач, потому что обычно оно работает вполне корректно.

50.5 Задача о рюкзаке

Довольно простая для понимания задача, к которой, однако, сводится огромное число куда более сложных задач. Например, именно задачей о рюкзаке является проблема оптимизации портфеля биржевых акций, или, например, оптимизации графиков работы сотрудников McDonald's, учитывая ожидаемое число посетителей и т.д.

Суть задачи заключается в том, что у нас есть рюкзак ограниченного объема. А еще есть набор разных предметов – каждый из них имеет свой объем и стоимость. Наша цель в данном случае заключается в том, чтобы найти оптимальный набор предметов так, чтобы они влезали в наш рюкзак, при этом их стоимость была бы максимально возможной.



Fig. 50.4: Иллюстрация задачи коммивояжера

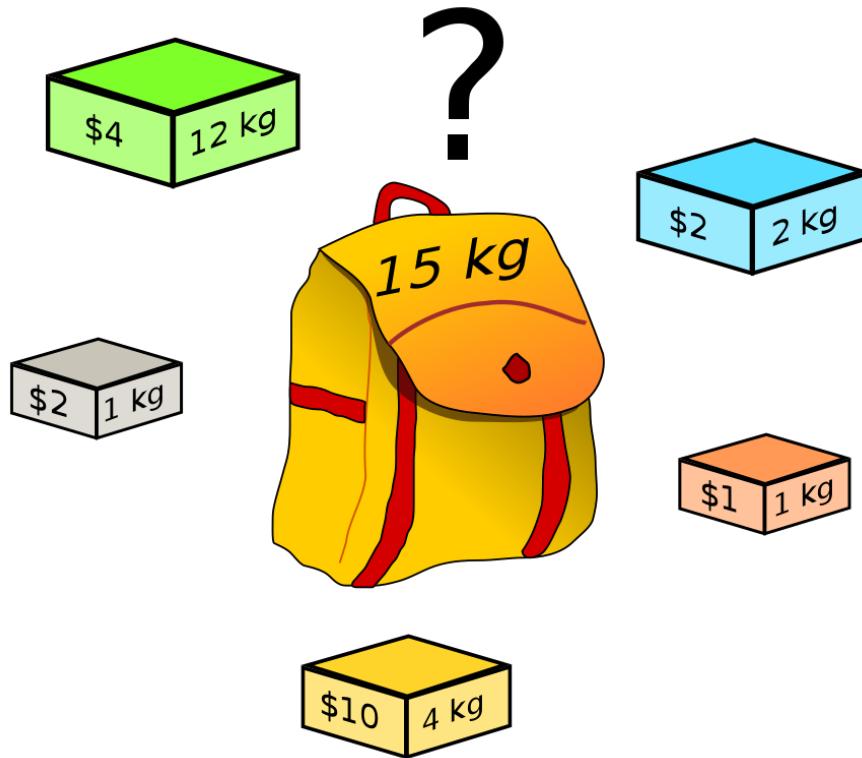


Fig. 50.5: Иллюстрация задачи о рюкзаке.

Формально это можно записать следующим образом. Пускай у нас есть рюкзак объема V . Давайте обозначим количество экземпляров i -й вещи в рюкзаке переменной x_i , а ее объем v_i . Ценность i -го предмета обозначим как s_i . Решением задачи будет вектор X из целых чисел x_i , которые при этом могут быть равны нулю – это будет значить, что i -я вещь не входит в оптимальный набор. Тогда нам необходимо решить следующую задачу:

$$\begin{cases} X = \operatorname{argmax} \left\{ \sum_i x_i \cdot s_i \right\} \\ \sum_i x_i \cdot v_i \leq W \end{cases}$$

50.6 Классические алгоритмы

Самый простой и очевидный вариант решения таких проблем – это просто перебор всех возможных комбинаций. Но так как сложность задач растет экспоненциально ($O(N) \sim e^N$), то очень быстро прямое решение (еще иногда говорят *brute force* решение, или *brute force* алгоритм) становится невозможным. Понятно, что можно воспользоваться какими-то эвристиками для конкретной задачи. Это приводит нас к алгоритмам типа *ветвей и границ* (*branch and bound*) [LD10], в которых мы обычно строим дерево возможных решений и пытаемся перебирать не все подряд, а лишь “перспективные” ветви этого дерева, отсекая те ветки, где хороших решений точно не будет. Но сложность таких алгоритмов все равно остается экспоненциальной. Другой вариант – это искать не обязательно самое лучшее решение, а хотя бы какое-то подходящее решение (*feasible solution*, решение, которое удовлетворяет ограничениям). Это приводит нас к аппроксимационным алгоритмам, которые каким-то образом пытаются свести экспоненциальную задачу к полиномиальной, пусть и теряя в гарантированном качестве итогового решения.

Важное замечание

Задачи комбинаторной оптимизации нельзя точно решить на квантовом компьютере! Квантовые компьютеры лишь дают нам потенциально очень эффективные *аппроксимационные* алгоритмы. Причем в основе этих алгоритмов лежит обычно как раз квантовое машинное обучение!

50.6.1 Общий вид алгоритма ветвей и границ

Давайте запишем как в общем виде выглядит алгоритм ветвей и границ ([источник](#)).

1. Найти любое решение xh проблемы, которое бы удовлетворяло ограничениям. Сохраним значение целевой функции для этого решения: $B = f(xh)$. Оно будет определять лучшее из известных на данный момент решений.
2. Инициализировать очередь для хранения частных решений. В этом случае разбиваем пространство возможных решений на маленькие подпространства и строим дерево потенциальных решений. Эта часть индивидуальная для каждой задачи. Например, в случае задачи о рюкзаке, можно взять начальное решение и построить две его ветви: одна будет содержать все решения, где больше одного предмета, а другая – где его будет меньше.
3. Выполняем итерации, пока наша очередь не пустая.
 - взять узел N из очереди;
 - если узел N представляет собой терминальный узел x дерева и $f(x) < B$, то это новое лучшее известное решение; сохраняем его $B = f(x)$;
 - если нет, то разбиваем N для создания новых узлов N_i :
 - если верхняя оценочная граница решений для этой ветки $bound(N_i)$ больше B , то ничего не делаем;
 - в противном случае добавляем N_i в очередь.

В данном случае нам необходимо реализовать для конкретной задачи следующие процедуры:

- построения дерева решения
- оценки верхней границы для ветви

В целом, данный алгоритм сегодня это, пожалуй, лучшее, что можем использовать, если нам необходимо точное решение. Также всегда есть опция остановить поиск до того, как мы достигнем оптимума – в этом варианте алгоритм становится аппроксимационным.

50.6.2 Жадные алгоритмы

Теперь давайте вернемся к аппроксимационным алгоритмам, которые работают относительно быстро, но, к сожалению, часто дают довольно плохие результаты. Ну и самым простым вариантом таких алгоритмов будет жадный алгоритм. Рассматривать его будем на примере задачи о рюкзаке. Пусть у нас есть рюкзак объема 30 и набор предметов с их стоимостью и объемом:

$$items = \{(4, 370), (9, 1950), (10, 3500), (21, 6700), (17, 6100), (3, 800), (27, 8300)\}$$

```
capacity = 30
items = [(4, 370), (9, 1950), (10, 3500), (21, 6700), (17, 6100), (3, 800), (27, 8300), ]
```

Наше решение будет максимально простым:

1. считаем удельную стоимость предметов, то есть стоимость единицы их массы;
2. набираем сначала самых дорогих предметов;
3. по остаточному принципу набираем остальные предметы, отдавая предпочтения тем, которые дороже по удельной стоимости.

```
items_and_score = sorted(
    [(it[0], it[1], it[1] / it[0]) for it in items],
    key=lambda x: x[2],
    reverse=True
)

print("Items, sorted by relative cost:")
for it in items_and_score:
    print(f"Weight: {it[0]}\tCost: {it[1]}\tRelative Cost: {it[2]}")
```

```
Items, sorted by relative cost:
Weight: 17      Cost: 6100      Relative Cost: 358.8235294117647
Weight: 10      Cost: 3500      Relative Cost: 350.0
Weight: 21      Cost: 6700      Relative Cost: 319.04761904761904
Weight: 27      Cost: 8300      Relative Cost: 307.4074074074074
Weight: 3       Cost: 800       Relative Cost: 266.66666666666667
Weight: 9       Cost: 1950      Relative Cost: 216.66666666666666
Weight: 4       Cost: 370       Relative Cost: 92.5
```

“Заполняем” рюкзак:

```
solution = []
w = capacity
min_weight = min([it[0] for it in items_and_score])

while True:
    if w < min_weight:
        break
    else:
        cand = [it for it in items_and_score if it[0] <= w][0]
        solution.append(cand)
        w -= cand[0]

final_score = sum([it[1] for it in solution])
final_weight = sum([it[0] for it in solution])

print(f"Final score: {final_score}")
print(f"Total weight of items: {final_weight}")
```

```
Final score: 10400
Total weight of items: 30
```

В данном случае это сработало неплохо – мы нашли действительно хорошее решение. Однако можно заметить, что решение из трех элементов (10, 3500) было бы более выгодным, так как итоговая ценность была бы 10500, что на 100 единиц больше жадного решения. Но в силу своей *жадности* наш алгоритм не смог найти это решение, хотя найденное им и лежит довольно близко к лучшему. Так что очень часто жадные алгоритмы находят очень плохие решения, причем качество решений сильно падает с ростом размерности проблемы.

50.6.3 Метод имитации отжига

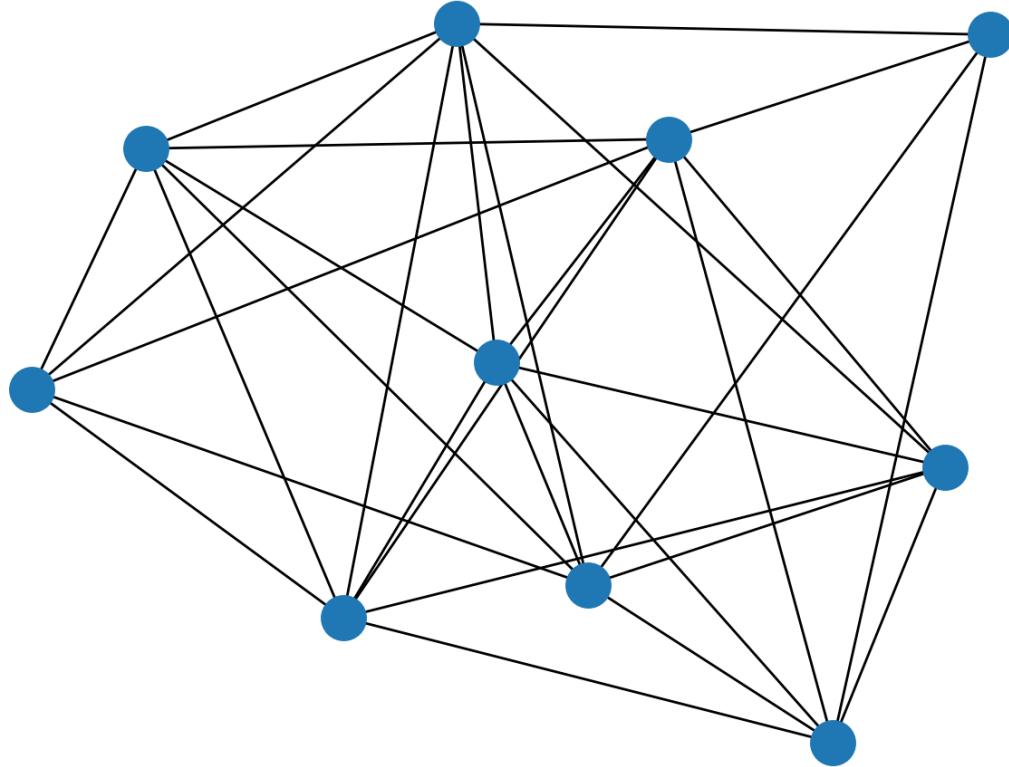
Это итеративный алгоритм, который очень часто способен найти действительно неплохое решение. Причем, в отличие от жадных алгоритмов, отжиг специально сделан так, чтобы не “застревать” в каких-то локально-хороших точках пространства решений, а наоборот, искать самое лучшее. Мы разберем работу отжига на примере задачи о максимальном разрезе в графе, а именно, реализуем подобие алгоритма Метрополиса-Гастиングса [Has70]. Но для начала давайте сгенерируем случайный граф:

```
import numpy as np
from typing import List
from typing import Union

np.random.seed(42)
rand_mat = np.random.rand(10, 10)
rand_adj = (rand_mat + rand_mat.T) / 2
rand_adj[rand_adj < 0.35] = 0.0
np.fill_diagonal(rand_adj, 0)

g = nx.Graph(rand_adj)
nx.draw(g)

plt.show()
```



Напомню, что цель состоит в том, чтобы разбить множество вершин на два подмножества так, чтобы сумма весов ребер между двумя подмножествами была максимальной. Для этого понадобится функция, которая считает

целевое значение для любого разбиения на два подмножества.

```
def score(g: nx.classes.graph.Graph, x: List[int]) -> (float):
    score = 0
    for e in g.edges(data=True):
        if x[e[0]] != x[e[1]]:
            score += e[2]["weight"]
    return score
```

Разобьем вершины на две группы случайным образом несколько раз и проверим, что функция работает корректно:

```
def split_random_node(random_seed: int) -> (List[int]):

    np.random.seed(random_seed)
    random_x = [
        1 if np.random.random() <= 0.5 else -1
        for _ in range(g.number_of_nodes())
    ]
    print(f"Random seed {random_seed}\nScore: {score(g, random_x):.2f}")

    return random_x

for random_seed in [2019, 2020, 2021]:
    random_x = split_random_node(random_seed)
```

Random seed 2019	Score: 7.78
Random seed 2020	Score: 7.23
Random seed 2021	Score: 9.38

Суть процесса отжига заключается в следующем:

1. генерируем начальное случайное решение (или получаем *feasible* при помощи эвристик);
2. задаем начальную “температуру” – некий глобальный метапараметр, суть которого станет ясна далее;
3. выполняем отжиг заданное число итераций;
 - выполняем случайную модификацию решения;
 - если значение функции стоимости для нового решения лучше, чем для старого, то принимаем его;
 - если нет, то все равно можем принять новое решение, но лишь с некоторой вероятностью, которая тем больше, чем выше температура и чем ближе друг к другу по оценке старое и новое решение.

Давайте реализуем это. В качестве функции, которая дает нам вероятность принять/отклонить новое решение, будем использовать распределение Больцмана:

$$P_{acceptance} = e^{\frac{E_{new}-E_{old}}{T}}$$

Видно, что эта величина может быть больше единицы в случае, когда новое решение лучше старого, но для нас это не проблема – это просто будет значить, что мы точно принимаем новое решение!

```
from copy import copy

e_history = []
x = random_x
T = T_0 = 100
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

e = score(g, x)
e_history.append(e)

def boltzman(e_old: float, e_new: float, T: Union[int, float]) -> (float):
    return np.exp((e_new - e_old) / T)

def permute(x: List[int]) -> (List[int]):
    i = np.random.randint(0, len(x) - 1)
    x_new = copy(x)
    x_new[i] *= -1

    return x_new

for i in range(1500):
    new_state = permute(x)
    new_e = score(g, new_state)

    if new_e > e:
        e = new_e
        x = new_state
    else:
        prob = boltzman(e, new_e, T)
        if np.random.rand() <= prob:
            e = new_e
            x = new_state

    e_history.append(e)
    T = T_0 / (i + 1)

print(f"Final energy: {e:.2f}")

```

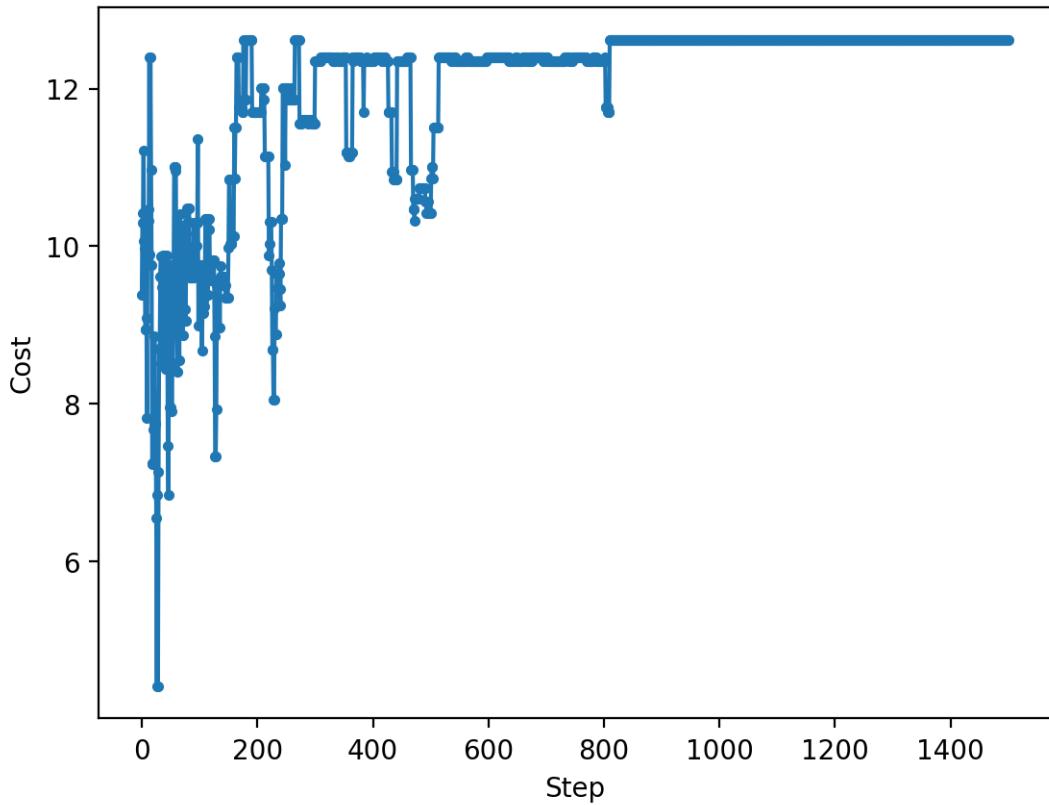
Final energy: 12.62

И посмотрим, как оно сходилось:

```

plt.plot(np.arange(len(e_history)), e_history, ".-")
plt.xlabel("Step")
plt.ylabel("Cost")
plt.show()

```



Видим, что в начале у нас был активный поиск решения, а ближе к концу переходы становились возможны, лишь если новое решение лучше. Этот процесс чем-то похож на кристаллизацию расплавов, когда изначально все частицы плавают в жидкости, но с уменьшением температуры они все более точно становятся в те позиции, которые обеспечивают минимум свободной энергии кристалла. Именно поэтому данный алгоритм называется *имитацией отжига* (*simulated annealing*).

Этот алгоритм неплохо находит оптимальные решения, но с ростом размерности задачи, а также пространства решений процесс “отжига” должен длиться все дольше и дольше, а температура уменьшаться все медленней.

50.7 Заключение

В этой лекции мы узнали, что же это за такие *NP*-задачи, а также познакомились с примерами некоторых из них. Посмотрели, как эти задачи можно решать на классическом компьютере, и какие при этом есть ограничения. В следующих лекциях мы узнаем:

- как задачи комбинаторной оптимизации можно свести к решению модели Изинга (подробнее об этой модели – в *отдельной лекции*)
- как задача Изинга переходит в задачу об основном состоянии квантовой системы
- как задачу об основном состоянии можно решать на квантовом компьютере разными способами:
 - через алгоритм *VQE*, основанном на *вариационных квантовых схемах*
 - через алгоритм *QAOA*, который является квантовым аналогом алгоритма имитации отжига
 - на специальных квантовых компьютерах – *квантовых аннилерах*

Part XV

От проблем к обучению

О БЛОКЕ “ОТ ЗАДАЧ К КВАНТОВЫМ АЛГОРИТМАМ”

Этот блок посвящен тому, как перейти от задач оптимизации или квантовой химии к квантовым алгоритмам. Блок содержит лекции о:

- преобразовании Жордана-Вигнера, где показывается, как перейти от фермионных операторов из квантовой химии к спиновым операторам и модели Изинга;
- формулировке задач комбинаторной оптимизации в терминах спиновых операторов и модели Изинга.

В заключении блока кратко затрагивается тема классических алгоритмов для решения задачи об основном состоянии модели Изинга и квантовых гамильтонианах – алгоритмы Арнольди/Ланкзоша, а также вариационный Монте-Карло и его модификации.

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ В ТЕРМИНАХ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Автор(ы):

- Синченко Семен

Не зря мы так глубоко изучали модель *Изинга* и анализировали ее решения – сегодня увидим, как в терминах этой модели можно сформулировать большинство важных задач комбинаторной оптимизации.

52.1 QUBO матрица

Но сначала кратко обсудим так называемую QUBO матрицу [GKD19] – это еще один способ записать задачу модели Изинга, и дальше по курсу иногда будем этим пользоваться.

QUBO – это сокращение от **Quadratic Unconstrained Binary Optimization**, или, если переводить, то это *задача квадратичной оптимизации без ограничений*. То есть это такие задачи, для которых нет отдельных ограничений, например, равенств или неравенств, а функция стоимости представима в виде многочлена второй степени от входных переменных. Решением такой задачи является бинарный вектор $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ такой, что $x_1, \dots, x_n \in \{0, 1\}$. В этом случае функцию стоимости C можно записать в виде:

$$C = a_1x_1^2 + a_2x_2^2 + \dots + a_nx_n^2 + b_1x_1 + \dots + b_nx_n + c_{1,2}x_1x_2 + c_{1,3}x_1x_3 + \dots + c_{n,n-1}x_nx_{n-1}$$

Но так как переменные бинарные, то разницы между x_i^2 и x_i нет – дальше будем использовать a_i как единственные коэффициенты, считая, что b_i уже и так включены в a_i . В этом случае можно представить функцию стоимости как матрицу размера $|X| \times |X|$, на диагонали которой стоят коэффициенты a_1, \dots, a_n , а вне диагонали стоят коэффициенты, с которыми в стоимость входят пары элементов:

$$Q = \begin{pmatrix} a_1 & c_{1,2} & \dots & c_{1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{n,1} & \dots & \dots & a_n \end{pmatrix}$$

Сама оптимизационная задача в этом случае формулируется следующим образом:

$$\arg \min_X X^T Q X$$

Note: Тут рассматриваем именно минимизацию функции стоимости. Но если исходная задача формулировалась в терминах максимизации чего-то, например, как задача о рюкзаке или максимальном разрезе в графе, то очевидно, что просто домножив стоимость на -1, перейдем от максимизации к минимизации. Далее это будет важно, так как будем рассматривать задачу поиска *основного состояния* квантомеханической системы, а такое состояние – это по определению состояние именно с *минимальной* энергией.

52.2 QUBO как квантовый гамильтониан

Если вспомнить, как [выглядит](#) модель Изинга, то легко заметить, что там, как и в QUBO-проблемах, есть лишь члены первой и второй степени. Вот только спиновые операторы (матрицы Паули) имеют собственные значения ± 1 , а не $\{0, 1\}$, которые фигурируют в QUBO. Это проблема, так как квадраты этих значений не равны им самим. Но это легко можно исправить введя “бинарный” оператор \hat{x} :

$$\hat{x} = \frac{1 + \hat{\sigma}^z}{2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Введя “промежуточные” переменные sz_i которые связаны с x_i через это выражение ($x_i = \frac{1+sz}{2}$), всегда можно свести выражение для C к следующему виду:

$$C = \sum_{i,j \in \{1, \dots, |X|\}} J_{i,j} sz_i sz_j + \sum_{i \in \{1, \dots, |X|\}} h_i sz_i$$

А это уже почти модель Изинга! Заменяем sz на операторы σ^z и получаем гамильтониан системы. Причем такой, что минимум его энергии будет совпадать с минимальным значением функции стоимости C :

$$\hat{H} = \sum_{i,j \in \{1, \dots, |X|\}} J_{i,j} \sigma_i^z \sigma_j^z + \sum_{i \in \{1, \dots, |X|\}} h_i \sigma_i^z$$

$$\Psi |\hat{H}| \Psi = \min X^T Q X = \min C, \quad \text{если } \Psi \text{ -- это основное состояние системы}$$

Причем в силу того, что у в выражении для \hat{H} фигурируют лишь σ^z , основное состояние гамильтониана является “классическим”, то есть все спины “ориентированы” либо вверх, либо вниз, но не находятся в суперпозиции. Другими словами, гамильтониан диагонализируется в \mathbf{Z} -базисе.

52.3 Поиск основного состояния

Как увидели, задачи, сформулированные в терминах QUBO, можно свести к задаче нахождения основного состояния квантовой системы, которая описывается некоторым оператором. Но что это вообще значит? И что это за гамильтониан такой, о котором все время говорим? Вообще говоря, гамильтониан – это оператор энергии:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U},$$

где T – это кинетическая энергия системы, а U – потенциальная энергия. Именно этот оператор определяет квантовую динамику в уравнении Шредингера. То есть это оператор, зная который (а также начальное состояние системы), можно посчитать волновую функцию системы ($\Psi(t)$) в любой момент времени в будущем. Правда, это лишь в теории, так как сложность интегрирования уравнения Шредингера очень быстро растет с ростом размера системы. Этой темы немного уже касались в [лекции про виды квантового машинного обучения](#), когда рассматривали, как нейросети помогают решать это самое уравнение.

Еще коснемся этой темы в следующих лекциях, но пока достаточно понимания того, что гамильтониан полностью описывает квантовую систему. С другой стороны, зная гамильтониан, всегда можем построить “в железе” квантовую систему, которую он описывает. Например, конфигурируя магнитные поля и двухчастичные обменные взаимодействия.

Таким образом, решение проблемы QUBO сводится к поиску Ψ_{GS} – волновой функции, отвечающей основному состоянию:

$$\arg \min_{\Psi} \hat{H}$$

А финальное решение получается просто как наиболее вероятная конфигурация спинов в состоянии Ψ_{GS} . Ну и останется лишь перейти от полученных собственных значений операторов σ_i^z к собственным значениям операторов \hat{x}_i .

Note: Кстати, справедлив и обратный переход, то есть решив проблему QUBO каким-нибудь из [классических алгоритмов](#) для решения комбинаторных задач, автоматически получим конфигурацию основного состояния соответствующей физической системы! Этот подход впервые был предложен аж в 1988-м году в работе [BGrotschelJungerR88]. Таким образом, приходим к пониманию **тесной связи задач квантовой физики и комбинаторной оптимизации**. Именно на этом и строится огромное число перспективных квантовых алгоритмов для решения задач реального мира. Особенно в *NISQ* эпоху!

Важное преимущество квантового представления QUBO-задач – в том, что наш мир устроен таким образом, что любая квантовая система всегда стремится в состояние с минимальной энергией, то есть основное. На этом построен даже целый класс квантовых аннилиров. Но и для вариационных квантовых алгоритмов это также дает свои преимущества.

52.4 Статья “Ising formulations of many NP problems”

Основным источником информации для нас будет статья “*Ising formulations of many NP problems*” [Luc14], вышедшая в 2014-м году (версия 3). В данной лекции рассмотрим лишь часть примеров из этой работы, хотя наше рассмотрение будет чуть более подробным. В целом эта статья может быть использована как прекрасный справочник.

52.5 Задача о максимальном разрезе в графе (повторение)

Уже рассматривали эту задачу в *лекции о модели Изинга* и в *лекции про задачи комбинаторной оптимизации*, но теперь повторим еще раз. Итак, есть граф на множестве вершин V , связанных множеством ребер E . Каждое ребро соединяет вершины u, v . Для простоты будем рассматривать случай ненаправленного графа. Каждое ребро имеет вес w . Цель – разбить множество вершин V на два непересекающихся сообщества V_1, V_2 таким образом, чтобы суммарный вес ребер, соединяющих вершины из разных сообществ, был максимальен:

$$\arg \max_{V_1, V_2} \sum_{u, v, w \in E} w(\mathbf{1}(u \in V_1, v \in V_2) + \mathbf{1}(u \in V_2, v \in V_1))$$

Эта задача уже является задачей без ограничений и может быть сразу сформулирована в терминах QUBO и модели Изинга.

52.5.1 QUBO матрица

QUBO матрица для этой задачи имеет размер $|V| \times |V|$, а вектор решения X это, соответственно, будет бинарный вектор длины $|V|$. Для простоты обозначим сообщество V_1 как вершины, для которых $x_i = 0$, а V_2 это будут вершины с $x_i = 1$. Еще хотим решать задачу минимизации вместо задачи максимизации. Запишем новую целевую функцию:

$$C = - \sum_{i, j \in \{1, \dots, |V|\}} w_{i,j} (x_i + x_j - 2x_i x_j)$$

Чтобы записать QUBO матрицу, будет удобнее работать с матрицей смежности графа, а не списком его ребер. Матрица смежности A (*adjacency matrix*) – это матрица размера $|V| \times |V|$, элементы которой это веса $w_{i,j}$, если в

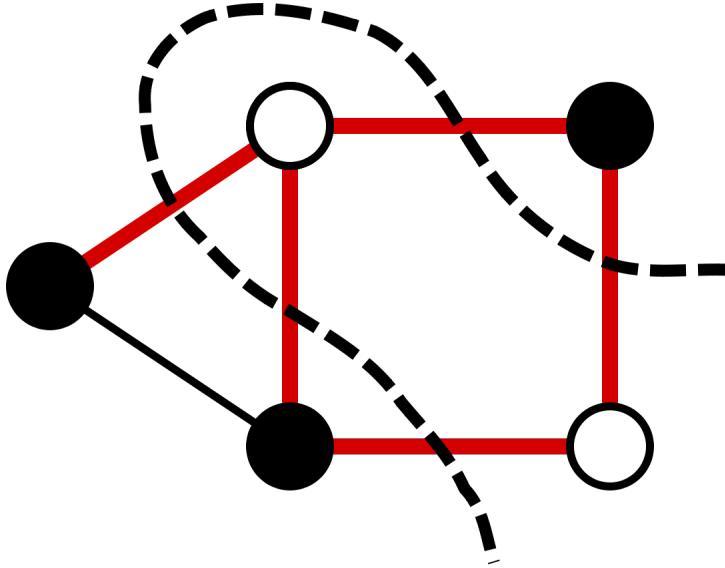


Fig. 52.1: Иллюстрация задачи о максимальном разрезе в графе

графе есть ребро между вершинами i и j , и 0, если ребра нет. Тогда матрица QUBO будет иметь следующий вид:

$$QUBO = \begin{pmatrix} \sum_{j=0}^{|V|-1} A_{0,j} & -2A_{0,1} & \dots & -2A_{0,|V|} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -2A_{|V|,0} & \dots & \dots & \sum_{j=0}^{|V|-1} A_{|V|,j} \end{pmatrix}$$

52.5.2 Гамильтониан Изинга

В случае этой задачи можно сказать, что она изначально имеет вид модели Изинга. И действительно, наиболее вероятная конфигурация спинов для основного состояния системы с гамильтонианом такого вида:

$$\hat{H} = \sum_{i,j \in \{1, \dots, |V|\}} (1 - \sigma_i^z \sigma_j^z)$$

будет в точности соответствовать решению задачи о максимальном разрезе. При этом численное значение энергии будет отличаться ровно на величину $|E|$, то есть на число ребер, так как величина $(1 - \sigma_i^z \sigma_j^z)$ будет равна нулю, если вершины находятся в разных сообществах, или единице, если они находятся в одном.

52.6 Задача коммивояжера

Задача коммивояжера обсуждалась в [лекции по комбинаторной оптимизации](#), где были получены выражения для представления данной задачи в виде “без ограничений”. Напомним, что удалось добиться этого, “внеся” ограничения в выражения для целевой функции в виде штрафа за отклонение от ограничений. А также добавили соответствующие коэффициенты. Полученное в той лекции выражение имеет вид:

$$C = A(1 - \sum_i x_{i,p})^2 + A(1 - \sum_p x_{i,p})^2 + A \sum_{u,v \notin E} x_{u,p} x_{v,p+1} + B \sum_{u,v,w \in E} w x_{u,p} x_{v,p+1}$$

Для нас удобно, что это уже задача минимизации. В данном случае QUBO-матрица получается при помощи явного раскрытия скобок в выражении для стоимости. Можно заметить, что в этом случае получаем также элементы 0-й степени, но формат QUBO-матрицы такого не предусматривает. Но во-первых, в данном случае легко можем определить разницу между $X^T Q X$ и минимумом C , а во-вторых, для нас это не столь важно – нам нужно решение, а значение энергии/функции стоимости получается без каких-либо проблем за полиномиальное время.

Note: Это довольно важное замечание, так как часто можно найти относительно простое представление задачи в виде QUBO, а вот учет всех констант может сильно усложнить ее вид. Более того, как увидим далее, не все представления QUBO одинаково эффективны, особенно когда переходят к решению на квантовом компьютере: для каких-то видов QUBO будет одна величина энергетической щели между основным и возбужденным состоянием в процессе решения, а для других QUBO-представлений той же задачи оно уже может стать больше!

52.7 Задача о выделении сообществ в графе

Уже говорили об этой задаче в лекции про комбинаторную оптимизацию. Для этой задачи было разработано немало эвристических алгоритмов поиска [SCBR14], а в этой части сосредоточимся на формулировке как задачи QUBO.

52.7.1 $k = 2$ сообществ

В случае всего двух сообществ будем использовать двоичные спиновые переменные $s_i \in \{-1, 1\}$ для кодирования того, к какому именно сообществу принадлежит вершина i . $\frac{1+s_i s_j}{2}$ будет равняться 1, если i и j принадлежат одному сообществу, и 0 – в противном случае. Модулярность при этом будет следующей

$$M = \frac{1}{4m} s^T B s \quad (52.1)$$

$$B_{ij} = (A_{ij} - \frac{g_i g_j}{2m}) \quad (52.2)$$

При $s_i = 2x_i - 1$ между спиновыми $s_i \in \{-1, 1\}$ и битовыми $x_i \in \{0, 1\}$ переменными соответственно, а также $\sum_{i,j} B_{i,j} = 0$, максимизация модулярности (??) может быть эквивалентна выражению задачи минимизации в форме QUBO с гамильтонианом $H = -\frac{1}{m} x^T B x$ и с QUBO матрицей $Q = -\frac{B}{m}$.

52.7.2 Множественные сообщества ($k > 2$)

Чтобы сформулировать задачу выделения k сообществ в канонической форме QUBO, сначала одновременно кодируем двоичные переменные x_i , а затем строим QUBO-гамильтониан.

Используем схему однократного кодирования (one-hot encoding), в которой задаем $x_{i,c} = 1$, если вершина $i \in c$, и $x_{i,c} = 0$ в противном случае, то есть,

$$x_{i,c} = \begin{cases} 1, & i \in c \\ 0, & \end{cases} \quad (52.3)$$

Тогда потребуется k переменных на логическую вершину, и размер двоичного вектора решений x увеличится с вектора длины N для случая $k = 2$ до $k \times N$ для k -сообществ. В частности, задаем $x = (x_{1,1}, x_{2,1}, \dots, x_{N,1}, \dots, x_{1,k}, x_{2,k}, \dots, x_{N,k})$.

$k > 2$ формулирует проблему как бинарную задачу минимизации, тогда возможно построить гамильтониан QUBO для k -сообществ с $H_M = -\frac{1}{m} \sum_{c=1}^k x_c^T B x_c$, в котором каждый член в сумме описывает бинарную задачу обнаружения сообщества для данного сообщества c .

Представляя обобщенную матрицу модулярности B размером $kN \times kN$ и блочно-диагональной формы с B вдоль диагонали (??), можем переписать задачу обнаружения k -сообщества как задачу двоичной минимизации в каноническом формате QUBO (где исходные многоклассовые переменные вложены в большее число двоичных переменных):

$$H_M = -\frac{1}{m} x^T B x$$

$$B = \begin{bmatrix} B & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & B \end{bmatrix} \quad (52.4)$$

Поскольку каждый узел $i = 1, \dots, N$ должен находиться ровно в одном сообществе $c = 1, \dots, k$, необходимо добавить штрафной член, чтобы ограничить решение для распределения сообществ. Формально это ограничение можно записать как $\sum_{c=1}^k x_{i,c} = 1$ при $i = 1, \dots, N$.

Это линейное ограничение можно добавить в задачу QUBO в виде квадратичного штрафного члена:

$$H_P = P \sum_{i=1}^N \left(\sum_{c=1}^k x_{i,c} - 1 \right)^2 \quad (52.5)$$

с положительным предварительным коэффициентом $P > 0$, обеспечивающим выполнение ограничений. Чтобы сформулировать штрафной член в (??) в QUBO-гамильтониан $H_P = x^T Q_P x$, перенумеруем двоичный вектор решений, используя один подстрочный индекс от 1 до kN , то есть $x = (x_{1,1}, x_{2,1}, \dots, x_{N,1}, \dots, x_{N,k}) = (x_1, x_2, \dots, x_N, \dots, x_{kN})$. Тогда штрафной член (??) может быть переписан как

$$H_P = P(Vx - b)^T(Vx - b) \quad (52.6)$$

где b – вектор всех единиц, а $V = [I_N, \dots, I_N]$ – высокоструктурированная матрица размера $N \times k_N$ с $N \times N$ матрицами тождества, сложенными горизонтально рядом друг с другом. Если вес P достаточно велик, например, находится в диапазоне от $1/N$ до $10/N$, то штрафной гамильтониан H_P будет стремиться к решению, в котором все ограничения удовлетворены $Vx = b$. Поскольку гамильтониан H_P квадратичен с точностью до константы, его можно переписать в канонической форме QUBO как $H_P = x^T Q_P x$, с $Q_P = P(V^T V - 2 \operatorname{diag}(V^T b))$.

Объединив модульности в уравнении (??) и штрафной гамильтониан в уравнении (??), получаем окончательный QUBO-гамильтониан для общего решения задачи о выделении k сообществ в графе

$$H = H_M + H_p$$

52.8 Заключение

Из этой лекции узнали, что такое QUBO матрица, а также как от такой формулировки оптимизационных задач можно перейти к задаче поиска основного состояния квантомеханической системы. В будущих лекциях познакомимся уже непосредственно с тремя основными методами решения этой задачи:

1. квантовый отжиг В этом случае реализуем модель Изинга буквально в железе. Это сразу дает ряд ограничений и особенностей, но с другой стороны мы получаем возможность хорошо масштабировать систему. И действительно, сегодня компьютеры фирмы D-Wave имеют порядка нескольких тысяч кубитов. Многие специалисты считают, что до появления универсальных квантовых компьютеров именно аналоговые машины D-Wave, решающие задачу Изинга, станут основным коммерческим инструментом в квантовых вычислениях.

2. вариационно-градиентные методы В этом подходе попытаемся закодировать волновую функцию основного состояния системы при помощи *вариационной квантовой схемы*, а дальше найти такие параметры, которые минимизируют результат измерения гамильтониана в таком состоянии. Этот метод называется *Variational Quantum Eigensolver*.
3. третий популярный подход соединяет идеи первых двух В этом случае также делаем квантовый отжиг, но для этого не строим целевую систему в железе, а производим симулацию квантовой динамики на кубитах при помощи специальных приближений из области квантовой механики. А параметры “отжига”, как и в **VQE**, подбираем при помощи градиентных методов. Такой подход носит название *Quantum Approximate Optimization Algorithm*.

Именно этим темам будет посвящена большая часть оставшихся лекций.

QUBO-ФОРМУЛИРОВКИ ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ, SVM И МЕТОДА К-СРЕДНИХ

Автор(ы):

- Бурдейный Дмитрий

53.1 Описание лекции

Здесь рассмотрим QUBO-формулировки трех задач ML (линейная регрессия, SVM, сбалансированная кластеризация методом k-средних) аналогично тому, как в *предыдущей лекции* было продемонстрировано сведение к QUBO задач о максимальном разрезе в графе, о коммивояжере и о выделении сообществ в графе. Изложение полностью основывается на статье [DAPN21].

Некоторые обозначения, которые будут использоваться в дальнейшем:

- \mathbb{R} – множество действительных чисел;
- N – количество объектов в обучающем наборе, $N \in \{1, 2, \dots\}$;
- d – количество признаков (*features*) для объектов в обучающем наборе, $d \in \{1, 2, \dots\}$;
- X – тренировочный набор, содержит по одному объекту в каждой из N строк, каждая строка содержит d значений признаков, $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$;
- Y – набор истинных “ответов” (*ground truth*), соответствующих тренировочным объектам из X ($Y \in \mathbb{R}^N$ в случае регрессии, $Y \in \{0, 1\}^N$ в случае бинарной классификации);
- \otimes – произведение Кронекера (тензорное произведение);
- \odot – произведение Адамара (поэлементное произведение).

Общая формулировка QUBO-задачи, которая используется в статье [DAPN21] и к которой всё сводится, выглядит так:

$$z^T A z + z^T b \rightarrow \min_{z \in \{0,1\}^M} \quad (53.1)$$

где M – натуральное число, z – бинарный вектор решения, $A \in \mathbb{R}^{M \times M}$ – QUBO-матрица с действительными элементами, $b \in \mathbb{R}^M$ – QUBO-вектор. Как отмечалось в предыдущей лекции, при $z_i \in \{0, 1\}$ выполняется равенство $z_i^2 = z_i$, так что линейные члены в (??) можно включить в квадратичные, но этого делать не будем, т.к. для целей этой лекции и для лучшего понимания удобнее сохранить минимизируемую квадратичную форму именно в виде (??).

53.2 Линейная регрессия

В задаче линейной регрессии предполагается, что зависимость истинных ответов от признаков тренировочных объектов приближенно линейная:

$$y_i^{(pred)} = w \cdot x_i + b, \quad y_i^{(pred)} \approx y_i,$$

где $y_i^{(pred)}$ – предсказываемое значение, y_i – истинное значение (из разметки), \cdot, \cdot – скалярное произведение. Удобно сразу избавиться от слагаемого b (*bias*), добавив единицу к набору признаков. Тогда *bias* окажется включенным в веса w , а тренировочный набор будет иметь по $(d+1)$ признаков на объект: $X \in \mathbb{R}^{N \times (d+1)}$. Требуется найти веса w , при которых квадрат евклидовой нормы невязки минимален:

$$E(w) = \|Xw - Y\|^2 \rightarrow \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \quad (53.2)$$

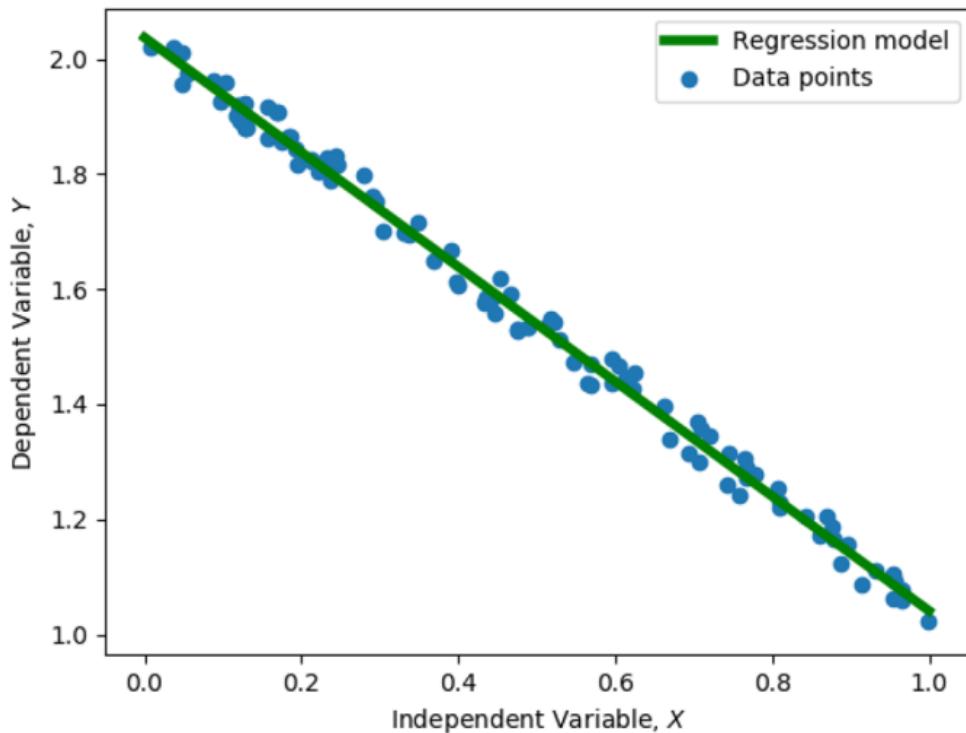


Fig. 53.1: Иллюстрация к задаче линейной регрессии.

Известно аналитическое решение задачи (??):

$$w = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Если $(X^T X)^{-1}$ не существует, нужно вычислить псевдообратную матрицу. Время сложность решения задачи линейной регрессии равна $\mathcal{O}(Nd^2)$, т.к. нужно $\mathcal{O}(Nd^2)$ для вычисления матрицы $X^T X$ и $\mathcal{O}(d^3)$ для вычисления обратной к ней (предполагаем, что $N \gg d$).

53.2.1 QUBO-формулировка

Перепишем выражение (??):

$$E(w) = w^T X^T X w - 2w^T X^T Y + Y^T Y \rightarrow \min_{w \in \mathbb{R}^{d+1}} \quad (53.3)$$

Наша цель – найти вектор w , компоненты которого – действительные числа. Но в QUBO-формулировке необходимо представить решение в виде вектора с бинарными компонентами. Как это сделать? Конечно, напрашивается идея использовать бинарное представление действительного числа w_i (будем отдельно записывать в бинарном виде целую часть, отдельно – дробную). Нужно помнить о том, что знак w_i может быть как положительным, так и отрицательным. Формат представления придется выбрать фиксированным (т.е. с фиксированной запятой, не с плавающей запятой). Пример:

$$\begin{aligned} \pm 110.101 &= \pm \underbrace{(0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^2)}_{\text{идем влево от разд. точки}} \pm \underbrace{(1 \cdot 2^{-1} + 0 \cdot 2^{-2} + 1 \cdot 2^{-3})}_{\text{идем вправо от разд. точки}} \\ &= \pm \left(2 + 4 + \frac{1}{2} \right) \text{ (53.3)} \\ &= \pm 6.5 \end{aligned} \quad (53.4)$$

Бинарные компоненты логично рассматривать как индикаторы наличия или отсутствия соответствующих степеней двойки в бинарном представлении каждого действительного числа. Введем вектор-столбец P , который отвечает за точность представления (*Precision vector*) и состоит из степеней двойки со знаками:

$$P = [-2^l, -2^{l-1}, \dots, -2^{-m+1}, -2^{-m}, 2^{-m}, 2^{-m+1}, \dots, 2^{l-1}, 2^l]^T,$$

этот вектор отсортирован по возрастанию элементов. Отводится l двоичных разрядов для целой части числа, m разрядов для дробной. l определяется максимальным по модулю действительным числом, которое хотим представлять; m определяется желаемой точностью представления. Число элементов вектора P равно $(m+1+l) \cdot 2 = K$.

Вводим вектор $\tilde{w}_i \in \{0, 1\}^K$ такой, что

$$\tilde{w}_i^T P = \sum_{k=1}^K p_k \tilde{w}_{ik} \approx w_i \in \mathbb{R}$$

Чтобы не было неоднозначности, нужно договориться о том, что для представления $w_i > 0$ используем только положительные элементы вектора P , а для $w_i < 0$ – только отрицательные.

Составляем бинарный вектор $\tilde{w} \in \{0, 1\}^{K(d+1)}$

$$\tilde{w} = [\underbrace{\tilde{w}_{11} \dots \tilde{w}_{1K}}_{\text{предст. } w_1} \underbrace{\tilde{w}_{21} \dots \tilde{w}_{2K}}_{\text{предст. } w_2} \dots \underbrace{\tilde{w}_{(d+1)1} \dots \tilde{w}_{(d+1)K}}_{\text{предст. } w_{d+1}}]^T$$

и матрицу точности \mathcal{P} (*Precision matrix*), которая задает переход к бинарному представлению векторов:

$$\mathcal{P} = I_{d+1} \otimes P^T,$$

где I_{d+1} – единичная матрица размера $(d+1)$. Матрица \mathcal{P} имеет размерность $(d+1) \times K(d+1)$. Исходный вектор весов можно записать как

$$w = \mathcal{P}\tilde{w}, \quad (53.7)$$

где знак “=” на самом деле означает приближенное равенство (наше fixed-point представление имеет конечную точность).

Всё готово для того, чтобы переписать исходную задачу (??) в QUBO-формулировке. Подставляем (??) в (??) и получаем

$$E(\tilde{w}) = \tilde{w}^T \mathcal{P}^T X^T X \mathcal{P} \tilde{w} - 2\tilde{w}^T \mathcal{P}^T X^T Y \rightarrow \min_{\tilde{w} \in \{0, 1\}^{(d+1)K}} \quad (53.8)$$

слагаемое $Y^T Y$ отброшено, т.к. это константа, никак не влияющая на решение задачи оптимизации без ограничений.

53.2.2 Оценка вычислительной сложности

Для исходной задачи регрессии (??) количество значений в датасете X равно $\mathcal{O}(Nd)$. Мы ввели K бинарных переменных для каждого из $(d + 1)$ весов. Значит, получилось $\mathcal{O}(Kd)$ переменных в QUBO-формулировке (??). Для решения задачи требуется $\mathcal{O}(K^2d^2)$ кубитов (см. [DPP19]), это пространственная сложность в рассматриваемом подходе.

Временная сложность в классической задаче $\mathcal{O}(Nd^2)$. В случае QUBO-задачи для временной оценки нужно рассмотреть три части:

1. Затраты времени для конвертации задачи регрессии в QUBO-формулировку. Здесь получаем $\mathcal{O}(NK^2d^2)$ (проверьте это, оценив число умножений, необходимых для вычисления $\mathcal{P}^T X^T X \mathcal{P}$).
2. Время для реализации QUBO-задачи в квантовом “железе”. Здесь потребуется $\mathcal{O}(K^2d^2)$, если использовать алгоритм из [DPP19].
3. Время для выполнения квантового отжига. Существуют теоретические оценки времени для получения точного решения, но более практично рассматривать случай, когда можно просто довольствоваться достаточно высокой вероятностью (скажем, 99%) получения оптимального решения. Для современных квантовых компьютеров D-Wave с ограниченным числом кубитов на практике получается, что время отжига и число повторений можно считать константами.

В итоге полная временная сложность решения QUBO-задачи на адиабатическом квантовом компьютере $\mathcal{O}(NK^2d^2)$. Может показаться, что это хуже, чем временная сложность классического решения, если считать K переменной. Но величина K определяется только шириной диапазона числовых значений и желаемой точностью представления, K не зависит от основных параметров задачи типа N и d . Поэтому можно считать K константой. Тогда число требуемых кубитов $\mathcal{O}(d^2)$, временная сложность $\mathcal{O}(Nd^2)$, это эквивалентно классическому случаю.

53.3 SVM

Классический SVM подробно описан в соответствующей лекции. Рассматривается тренировочный набор $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$ и набор истинных меток $Y \in \{-1, +1\}^N$. Нужно решить задачу бинарной классификации, найдя веса $w \in \mathbb{R}^d$ и константу $b \in \mathbb{R}$, при которых классификатор $a(x_i) = \text{sign}(w^T x_i + b)$ допускает как можно меньше ошибок на обучающей выборке.

Двойственная задача (??) в текущих обозначениях принимает вид

$$\begin{cases} \mathcal{L}(\lambda) = \sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle \rightarrow \max_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \\ \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (53.9)$$

53.3.1 QUBO-формулировка

Перепишем (??) как задачу минимизации:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{neg}(\lambda) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \langle x_i, x_j \rangle - \sum_{i=1}^N \lambda_i \rightarrow \min_{\lambda}, \\ 0 \leq \lambda_i \leq C \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \\ \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (53.10)$$

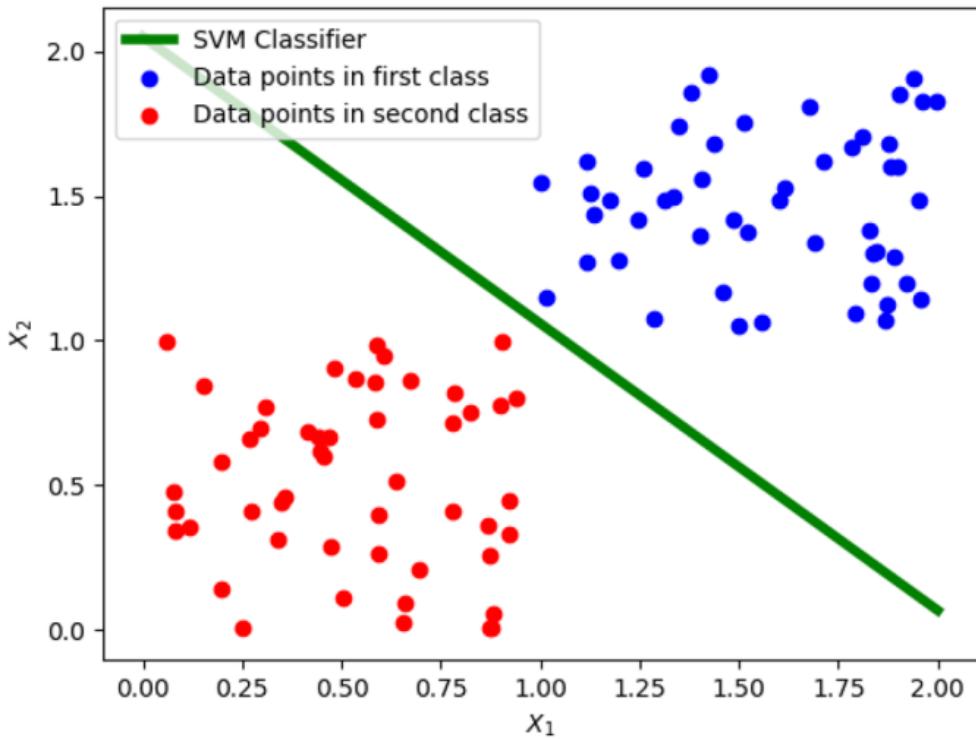


Fig. 53.2: Иллюстрация к задаче бинарной классификации с помощью SVM.

Тренировочные объекты x_i , соответствующие $\lambda_i = 0$, называются *периферийными*, от них решение

$$w = \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i x_i$$

не зависит. Объекты, соответствующие $\lambda_i > 0$, называются *опорными*.

Задача минимизации переписывается в виде

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{neg}(\lambda) = \frac{1}{2} \lambda^T (XX^T \odot YY^T) \lambda - \lambda^T 1_N \rightarrow \min_{\lambda}, \\ 0_N \leq \lambda \leq C_N, \\ \lambda^T Y = 0, \end{cases} \quad (53.11)$$

где 1_N – вектор, состоящий из N единиц (аналогичный смысл имеют 0_N и C_N), $\lambda \in \mathbb{R}^N$.

Как в задаче линейной регрессии, будем представлять каждую $\lambda_i \in \mathbb{R}$ бинарным вектором $\tilde{\lambda}_i \in \{0, 1\}^K$. Поскольку $\lambda_i \geq 0$, в *precision vector* P нужно включить только положительные значения:

$$P = [2^{-m}, 2^{-m+1}, \dots, 2^{l-1}, 2^l]^T$$

Вектор P содержит $m + l = K$ элементов (здесь K никак не связано с K из раздела про линейную регрессию, просто было решено не вводить новое обозначение для длины нового вектора P). При подходящем выборе m и l достаточно точно выполняется равенство

$$\lambda_i \approx \sum_{k=1}^K p_k \tilde{\lambda}_{ik} \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (53.12)$$

Выполняем конкатенацию всех $\tilde{\lambda}_{ik}$ по вертикали

$$\tilde{\lambda} = [\underbrace{\tilde{\lambda}_{11} \dots \tilde{\lambda}_{1K}}_{\text{предст. } \lambda_1} \underbrace{\tilde{\lambda}_{21} \dots \tilde{\lambda}_{2K}}_{\text{предст. } \lambda_2} \dots \underbrace{\tilde{\lambda}_{N1} \dots \tilde{\lambda}_{NK}}_{\text{предст. } \lambda_N}]^T$$

и вводим матрицу \mathcal{P} (*precision matrix*)

$$\mathcal{P} = I_N \otimes P^T$$

таким образом, что (приближенно)

$$\lambda = \mathcal{P}\tilde{\lambda}$$

Подставляя из этого выражения λ в (??), получаем:

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{neg}(\tilde{\lambda}) = \frac{1}{2} \tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T (XX^T \odot YY^T) \mathcal{P} \tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T \mathbf{1}_N \rightarrow \min_{\tilde{\lambda} \in \{0,1\}^{NK}} \\ (\mathcal{P}\tilde{\lambda})^T Y = 0 \end{cases} \quad (53.13)$$

Остается избавиться от ограничения в виде равенства в (??). Как обычно делается в таких случаях, вместо ограничения вводим соответствующий штраф за его нарушение:

$$Penalty^{(hp)} = \frac{\gamma}{2} \left((\mathcal{P}\tilde{\lambda})^T Y \right)^2 = \frac{\gamma}{2} \left((\tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T) Y \right)^2 = \frac{\gamma}{2} \tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T (YY^T) \mathcal{P} \tilde{\lambda},$$

где γ – достаточно большая константа, hp означает *hyperplane* (гиперплоскость).

Добавляем $Penalty^{(hp)}$ к $\mathcal{L}_{neg}(\tilde{\lambda})$ и получаем итоговую QUBO-формулировку:

$$\frac{1}{2} \tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T (XX^T \odot YY^T + \gamma YY^T) \mathcal{P} \tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}^T \mathcal{P}^T \mathbf{1}_N \rightarrow \min_{\tilde{\lambda} \in \{0,1\}^{NK}} \quad (53.14)$$

53.3.2 Оценка вычислительной сложности

Задача (??) содержит $\mathcal{O}(Nd)$ значений в данных и $\mathcal{O}(N)$ параметров (λ). QUBO-формулировка (??) содержит то же количество данных, а число параметров в K раз больше, т.е. $\mathcal{O}(KN)$. Значит, потребуется $\mathcal{O}(N^2 K^2)$ кубитов.

Временная сложность классического SVM в типичных реализациях (например, [LIBSVM](#)) равна $\mathcal{O}(N^3)$. Для оценки временной сложности QUBO рассматриваем три составляющие (как в задаче линейной регрессии):

1. Затраты времени для конвертации в QUBO-формулировку. Из (??) и (??) следует, что оценка времени $\mathcal{O}(N^2 K^2)$.
2. Для реализации QUBO-задачи в квантовом “железе” потребуется $\mathcal{O}(N^2 K^2)$.
3. Время для выполнения квантового отжига и число повторений можно считать константами (см. комментарии к тому же пункту в обсуждении линейной регрессии).

В итоге временная сложность $\mathcal{O}(N^2 K^2)$. K можно считать константой, т.к. она зависит только от диапазона и желаемой точности представления λ и не зависит от параметров самой задачи классификации. Тогда получается временная сложность $\mathcal{O}(N^2)$, что гораздо лучше оценки $\mathcal{O}(N^3)$ в классическом случае.

53.4 Сбалансированная кластеризация методом k-средних

Кластеризация методом k-средних – ML-задача обучения без учителя (*unsupervised*). Требуется распределить тренировочные объекты по k кластерам так, чтобы суммарное отклонение тренировочных объектов, принадлежащих кластерам, от центроидов (центров масс) соответствующих кластеров было минимальным. Сбалансированная кластеризация методом k-средних – частный случай, в котором каждый кластер содержит примерно одно и то же количество объектов N/k , как показано на Fig. ??.

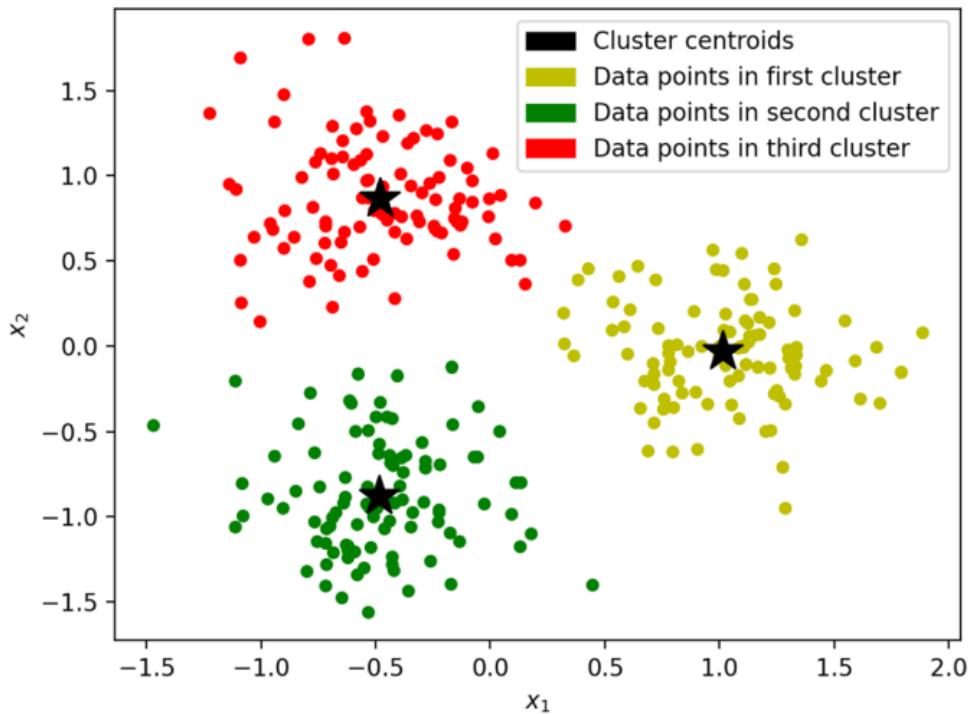


Fig. 53.3: Иллюстрация к задаче сбалансированной кластеризации методом k-средних.

Нужно распределить N объектов из тренировочного набора $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$ по k кластерам $\Phi = \{\phi_1, \dots, \phi_k\}$. Пусть μ_i – центройд кластера ϕ_i . В общем случае задача кластеризации методом k-средних формулируется так:

$$\sum_{i=1}^k \frac{1}{2|\phi_i|} \sum_{x,y \in \phi_i} \|x - y\|^2 \rightarrow \min_{\Phi} \quad (53.15)$$

Если размеры $|\phi_i|$ всех кластеров одинаковые, то формулировка переписывается так:

$$\sum_{i=1}^k \sum_{x,y \in \phi_i} \|x - y\|^2 \rightarrow \min_{\Phi} \quad (53.16)$$

В прикладных задачах кластеризации размеры кластеров только приближенно равны друг другу, поэтому решение задачи (??) не является точным решением задачи (??). Для решения задачи кластеризации методом k-средних можно использовать, например, алгоритм Ллойда. Существует модификация алгоритма Ллойда для случая сбалансированной кластеризации.

53.4.1 QUBO-формулировка

Вводим матрицу $D \in \mathbb{R}^{N \times N}$, элементы которой равны квадратам попарных расстояний между тренировочными объектами:

$$d_{ij} = \|x_i - x_j\|^2$$

Также вводим бинарную матрицу $\tilde{W} \in \{0, 1\}^{N \times k}$, каждый элемент которой $\tilde{w}_{ij} = 1$ в том и только в том случае, когда объект x_i принадлежит кластеру ϕ_j . Очевидно, есть два ограничения на \tilde{W} :

1. Поскольку мы предполагаем, что все кластеры содержат примерно одно и тоже количество объектов, каждый столбец \tilde{W} должен содержать примерно N/k единиц.
2. Каждый объект принадлежит ровно одному кластеру, поэтому каждая строка \tilde{W} должна содержать ровно одну единицу.

Для получения QUBO-формулировки задачи нам потребуется избавиться от этих ограничений. Для этого, как обычно, введем в минимизируемую квадратичную форму штрафы за нарушение ограничений. Вернемся к этому через пару абзацев.

Используя D и \tilde{W} , мы можем переписать внутреннюю сумму в (??) в виде

$$\sum_{x,y \in \phi_i} \|x - y\|^2 = \tilde{w}_j'^T D \tilde{w}_j,$$

где \tilde{w}_j' – столбец номер j в \tilde{W} . Чтобы переписать в бинарных переменных полную (двойную) сумму в (??), составим вектор-столбец из всех Nk элементов матрицы \tilde{W} :

$$\tilde{w} = [\tilde{w}_{11} \dots \tilde{w}_{N1} \tilde{w}_{12} \dots \tilde{w}_{N2} \dots \tilde{w}_{1k} \dots \tilde{w}_{Nk}]^T$$

При условии, что ограничения на \tilde{w} выполнены, запишем задачу (??) в эквивалентном виде

$$\tilde{w}^T (I_k \otimes D) \tilde{w} \rightarrow \min_{\tilde{w}} \quad (53.17)$$

Теперь разбираемся с ограничениями на \tilde{w} .

Во-первых, каждый столбец \tilde{W} должен содержать примерно N/k единиц. Введем штраф, непосредственно отражающий это требование:

$$Penalty_j^{(col)} = \alpha \left(\tilde{w}_j'^T \tilde{w}_j - \frac{N}{k} \right)^2,$$

где α – достаточно большая константа. Раскрыв скобки в предыдущем выражении, можно убедиться, что

$$Penalty_j^{(col)} = \tilde{w}_j'^T \alpha \underbrace{\left(1_N - \frac{2N}{k} I_N \right)}_{\text{обозначим как } F} \tilde{w}_j + \text{const}$$

Сумма всех штрафов для столбцов равна

$$Penalty^{(col)} = \sum_j Penalty_j^{(col)} = \tilde{w}^T (I_k \otimes \alpha F) \tilde{w}$$

Во-вторых, каждая строка \tilde{W} должна содержать ровно одну единицу. Соответствующий штраф

$$Penalty_i^{(row)} = \beta (\tilde{w}_i^T \tilde{w}_i - 1)^2,$$

где β – достаточно большая константа. Раскрыв скобки в предыдущем выражении, получаем

$$Penalty_i^{(row)} = \tilde{w}_i^T \beta \underbrace{(1_k - 2I_k)}_{\text{обозначим как } G} \tilde{w}_i + \text{const}$$

Чтобы найти сумму $\text{Penalty}^{(row)} = \sum_i \text{Penalty}_i^{(row)}$, преобразуем бинарный вектор \tilde{w} в другой бинарный вектор \tilde{v} , получающийся из \tilde{w} определенной перестановкой элементов:

$$\tilde{v} = [\tilde{w}_{11} \dots \tilde{w}_{1k} \tilde{w}_{21} \dots \tilde{w}_{2k} \dots \tilde{w}_{N1} \dots \tilde{w}_{Nk}]^T$$

Переход от \tilde{w} к \tilde{v} можно представить как линейное преобразование

$$\tilde{v} = Q\tilde{w}$$

с некоторой матрицей $Q \in \{0,1\}^{Nk \times Nk}$ (матрица Q в свою очередь получается из единичной матрицы I_{Nk} определенной перестановкой элементов).

Сумма штрафов для строк равна

$$\text{Penalty}^{(row)} = \sum_i \text{Penalty}_i^{(row)} = \tilde{v}^T (I_N \otimes \beta G) \tilde{v} = \tilde{w}^T Q^T (I_N \otimes \beta G) Q \tilde{w}$$

Соберем вместе квадратичную форму (??) (записанную без учета ограничений) и штрафы $\text{Penalty}^{(col)}$, $\text{Penalty}^{(row)}$ в одно финальное выражение, которое и является QUBO-формулировкой задачи о сбалансированной кластеризации методом k-средних:

$$\tilde{w}^T (I_k \otimes (D + \alpha F) + Q^T (I_N \otimes \beta G) Q) \tilde{w} \rightarrow \min_{\tilde{w}} \quad (53.18)$$

53.4.2 Оценка вычислительной сложности

Задача (??) содержит $\mathcal{O}(Nd)$ значений в данных и $\mathcal{O}(N)$ переменных. В QUBO-формулировке вводим по k бинарных переменных для каждой исходной. Получается $\mathcal{O}(Nk)$ переменных, а значит, требуется $\mathcal{O}(N^2k^2)$ кубитов.

Известно, что классический алгоритм сбалансированной кластеризации методом k-средних сходится за время $\mathcal{O}(N^{3.5}k^{3.5})$ в худшем случае (см. ссылки в статье [DAPN21]). Для оценки временнОй сложности QUBO рассматриваем три составляющие:

1. Затраты времени для конвертации в QUBO-формулировку. В выражении (??) по вычислительной сложности доминирует слагаемое, содержащее $I_k \otimes D$. Соответствующая вычислительная сложность $\mathcal{O}(N^2kd)$.
2. Для реализации QUBO-задачи в квантовом “железе” потребуется $\mathcal{O}(N^2k^2)$.
3. Время для выполнения квантового отжига и число повторений можно считать константами (см. комментарии к тому же пункту в обсуждении линейной регрессии).

В итоге получаем полную вычислительную сложность $\mathcal{O}(N^2k(d+k))$. Это лучше, чем результат классического алгоритма в худшем случае. Но количество итераций в классическом алгоритме сильно зависит от “удачности” начального приближения для центроидов кластеров. Классический алгоритм может оказаться и быстрее квантового.

53.5 Заключение

В этой лекции были рассмотрены три важные задачи машинного обучения, которые можно переформулировать в виде QUBO (*Quadratic Unconstrained Binary Optimization*) для решения на квантовом аннилере путем сведения к задаче нахождения основного состояния квантовой системы. Общий подход заключается в том, что минимизируемый в классической формулировке функционал переписывается в виде квадратичной формы относительно бинарных переменных, а вместо условий-ограничений в финальную квадратичную форму QUBO-задачи вводятся штрафы за нарушение этих ограничений. Есть надежда на то, что при некотором количестве кубитов квантовые алгоритмы будут иметь преимущество перед классическими по времени выполнения.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЖОРДАНА-ВИГНЕРА

Автор(ы):

- Желтоножский Евгений

54.1 Описание лекции

В этой лекции мы узнаем как реально существующей системе (например, электронам на решетке) сопоставить систему состоящую из спинов (кубитов), для того чтобы просимулировать ее на квантовом компьютере. Для этого мы сначала изучим альтернативный, зачастую более удобный подход к описанию многочастичных квантовых систем, который называется “вторичное квантование”.

54.2 Введение

Для того чтобы просимулировать квантовую систему на квантовом же компьютере (например, посчитать энергию основного состояния какого-нибудь атома), нам необходимо закодировать состояние системы и действующие на нее операторы: найти соответствие между состояниями системы и состояниями нашего компьютера (т.е., кубитов).

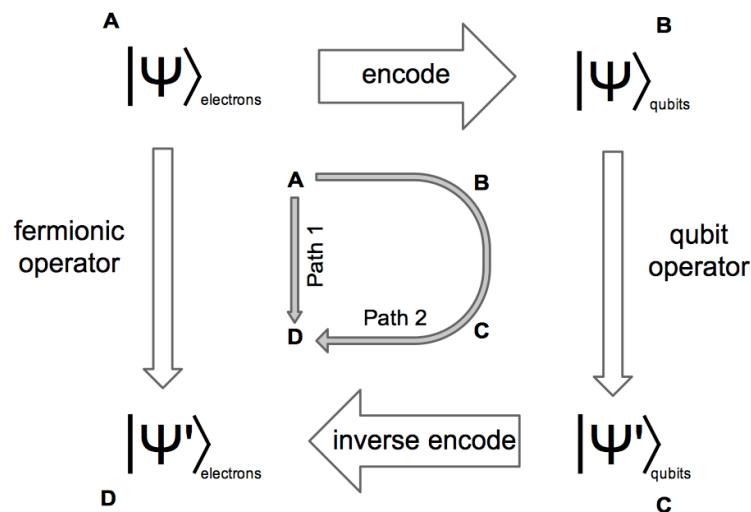


Fig. 54.1: Общая схема симуляции квантовой системы на квантовом компьютере (взято из [SRL12]).

54.3 Спины, фермионы и бозоны

Как мы помним из *лекции по квантовой химии*, квантовые частицы могут быть либо бозонами, либо фермионами. Одно из различий между ними состоит в том, что при перестановки двух бозонов волновая функция не меняется, а при перестановке двух фермионов – меняет знак. Эта классификация следует из того, что квантовые частицы неотличимы.

Несмотря на то, что наши кубиты состоят из каких-то частиц (бозонов или фермионов), обычно они отличимы (например, зафиксированы на своих позициях) и, следовательно, не являются ни бозонами, ни фермионами. Так как мы используем два состояния кубита ($|0\rangle$ и $|1\rangle$), каждый кубит может быть описан как система со спином 1/2.

54.4 Вторичное квантование

В квантовой механике мы [можем описать](#) состояние нескольких частиц как тензорное произведение состояний каждой из частиц. Например, если у нас есть две частицы, и их квантовое состояние описывается положением частицы в пространстве, r_i , мы можем записать состояние частиц как

$$|\psi\rangle = |r_1\rangle \otimes |r_2\rangle.$$

У этого подхода есть два главных недостатка – во первых, работать с системами в которых разное количество частиц, или где это количество может меняться, не очень удобно. Во-вторых, не учитывается неразличимость квантовых частиц.

Обе эти проблемы решаются вторичным квантованием, где вместо использования состояния каждой частицы мы описываем систему количеством частиц в каждом из возможных состояний. Так как частицы неразличимы, такое описание достаточно для полного описания системы. Вместо Гильбертова пространства фиксированной размерности наши состояния теперь являются элементами пространства Фока (суммы Гильбертовых пространств для всех возможных значений количества частиц). Основное состояние, или вакуум, теперь это состояние с 0 частиц.

Note: Несмотря на название, мы не квантуем систему повторно, а просто избавляемся от избыточности в описании.

Мы так же можем определить операторы, которые добавляют или убирают частицу в определенном состоянии из системы. На языке первой квантизации:

$$\begin{aligned} b_\alpha^\dagger |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N+1}} |\psi_\alpha\rangle \otimes |\Psi\rangle \\ b_\alpha (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\Psi\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{N}} |\Psi\rangle. \end{aligned}$$

Note: До сих пор операторы которые мы видели действовали из гильбертова пространства с определенным количеством частиц в него самого. Оператор создания действует из гильбертова пространства с n частиц в гильбертово пространства с $n + 1$ частиц (оба этих пространства являются частью пространства Фока).

Тут b_α^\dagger называется оператором создания (creation), а b_α – уничтожения (annihilation). Заметим, что эти операторы не эрмитовы, т.е., $b_\alpha^\dagger \neq b_\alpha$. Нормализация операторов выбрана таким образом, что собственные значения (эрмитова) оператора $b_\alpha^\dagger b_\alpha$ – количество частиц в состоянии α .

Note: Наблюдаемые величины соответствуют эрмитовым операторам, следовательно b_α не соответствует никакой наблюдаемой величине. В частности, такой член сам по себе не может быть частью гамильтониана (но может быть частью эрмитова члена, например $b_\alpha + b_\alpha^\dagger$.

Если в системе нет ни одной частицы в состоянии α , то оператор уничтожения уничтожает состояние:

$$b_\alpha |\Psi\rangle = 0.$$

0 тут это нулевой вектор, в отличии от $|0\rangle$, вакуума. Так как 0 это не физическое состояние (например, если бы мы захотели измерить какую-нибудь величину X , то вероятность найти систему в любом собственном состоянии $|x\rangle$ будет равно нулю), мы можем интерпретировать это как тот факт, что нельзя уничтожить частицу которой нет.

Note: Хотя стандартная конвенция говорит о том, что векторы состояния нормализованы ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$), после применения оператора (эрмитова или нет) мы не обязаны получить нормализованное состояние. Можно считать что после каждого применения оператора мы нормализуем состояние, либо, чуть более математически, что мы рассматриваем проективное гильбертово пространство, которое задается классом эквивалентности $v \sim kv$ для комплексного числа $k \in \mathbb{C}$ и любого вектора $v \in \mathcal{H}$ т.е. все параллельные векторы эквивалентны.

В зависимости от типа частиц, операторы создания и уничтожения подчиняются определенным отношениям. В случае бозонов, разные операторы коммутируют:

$$\begin{aligned} [b_i^\dagger, b_j] &= \delta_{ij} \\ [b_i^\dagger, b_j^\dagger] &= [b_i, b_j] = 0. \end{aligned}$$

В случае фермионов, операторы антисимметричны:

$$\begin{aligned} \{b_i^\dagger, b_j\} &= \delta_{ij} \\ \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} &= \{c_i, c_j\} = 0. \end{aligned}$$

В частности,

$$\{c_j^\dagger, c_j^\dagger\} = 2(c_j^\dagger)^2 = 0,$$

и, следовательно, в системе не может быть больше одного фермиона в одном состоянии (в соответствии с принципом запрета Паули). Из этого так же следует что $c_j^2 = 0$, так как независимо от состояния системы, после первого оператора в ней не останется фермиона который можно было бы уничтожить.

54.5 Переход от спинов к фермионам

Пронумеруем возможные состояния частиц индексом i : например, это могут быть электроны в состояниях, отвечающих гауссианам из STO-3G или находящиеся в разных узлах цепочки атомов. Мы можем попробовать сопоставить спину фермион: если спин с индексом i направлен вниз то фермион с индексом i существует, а если спин направлен вверх – то фермион не существует (количество фермионов с определенным индексом может быть только 1 или 0). Другими словами, используя оператор количества частиц $\hat{n}_i = c_i^\dagger c_i$, где c_i^\dagger и c_i это операторы создания и уничтожения соответственно, мы хотели бы сопоставить

$$\hat{\sigma}_i^z = 1 - 2\hat{n}_i$$

Тогда лестничные (ladder) операторы $\sigma^- = (\hat{\sigma}_i^x - i\hat{\sigma}_i^y)/2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ и $\sigma^+ = (\hat{\sigma}_i^x + i\hat{\sigma}_i^y)/2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, соответствуют операторам создания и уничтожения.

Note: Заметим что оператор σ^- переводит состояние “спин вверх” в состоянии “спин вниз”, а состояние “спин вниз” уничтожает. σ^+ переводит состояние “спин вниз” в состоянии “спин вверх” (а состояние “спин вверх” уничтожает). Оба этих оператора неэрмитовы.

Действительно, в одном состоянии (если индексы двух операторов равны) эти операторы выполняют фермионное антисимметрическое отношение

$$\{\sigma_j^+, \sigma_j^-\} = 1.$$

К сожалению, на разных узлах эти операторы коммутируют, а не антисимметрически. Чтобы это исправить, мы “прикрепляем” к каждому фермиону “нить” (string):

$$\begin{aligned}\sigma_i^+ &= \left[\prod_{j < i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] c_i \\ \sigma_i^- &= \left[\prod_{j < i} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] c_i^\dagger.\end{aligned}$$

Оператор $\prod_{j_i} (1 - 2c_j^\dagger c_j)$ равен ± 1 в зависимости от четности количества фермионов слева от узла i .

Заметим, что c_k антисимметрически коммутирует с $(1 - 2c_k^\dagger c_k)$:

$$\begin{aligned}\{c_j, (1 - 2c_j^\dagger c_j)\} &= c_j(1 - 2c_j^\dagger c_j) + c_j(1 - 2c_j^\dagger c_j)c_j = \\ &\quad c_j - 2 \underbrace{c_j c_j^\dagger}_{1 - c_j^\dagger c_j} c_j + c_j - 2c_j^\dagger \underbrace{c_j c_j}_{0} = \\ &\quad c_j - 2c_j + 2c_j^\dagger \underbrace{c_j c_j}_{0} + c_j = 0,\end{aligned}$$

и, следовательно, с нитью $\prod_{j_i} (1 - 2c_j^\dagger c_j)$ (интуитивно, если сначала разрушить фермион, то четность изменится).

Пусть, без ограничения общности, $\ell > k$:

$$\sigma_k^+ \sigma_\ell^- = \left[\prod_{j < k} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] c_k \left[\prod_{m < \ell} (1 - 2c_m^\dagger c_m) \right] c_\ell^\dagger.$$

Если мы перенесем c_k вправо, то выражение умножится на -1 дважды (один раз из-за изменения четности ℓ -нити, и один раз из-за обмена с c_ℓ^\dagger). В то же время, i -нить коммутирует со всем, поэтому ее мы можем перенести вправо без изменений:

$$\sigma_k^+ \sigma_\ell^- = \left[\prod_{j < k} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] c_k \left[\prod_{m < \ell} (1 - 2c_m^\dagger c_m) \right] c_\ell^\dagger = \left[\prod_{m < \ell} (1 - 2c_m^\dagger c_m) \right] c_\ell^\dagger \left[\prod_{j < k} (1 - 2c_j^\dagger c_j) \right] c_k = \sigma_\ell^- \sigma_k^+,$$

как и требовалось. Мы так же можем записать обратное отношение:

$$\begin{aligned}c_i &= \prod_{j < i} \sigma_j^z \sigma_i^+ \\ c_i^\dagger &= \prod_{j < i} \sigma_j^z \sigma_i^-.\end{aligned}$$

Проверка антисимметрического отношения оставляется читателю в качестве упражнения.

Таким образом мы установили соответствие между фермионной и спиновой системами, но операторы в обоих случаях очень нелокальны. В частности, один фермионный оператор соответствует произведению $\mathcal{O}(N)$ спиновых операторов (и наоборот).

Note: Существуют и другие способы сопоставления фермионной и спиновой систем, например, Bravyi–Kitaev transform [BK02]. Также существует способ сопоставить бозоны и фермионы – бозонизация [VDS98].

54.5.1 Пример. Модель Хаббарда

Одной из важных моделей в физике твёрдого тела является модель Хаббарда, описывающая взаимодействие электронов на решётке. В соответствии с принципом Паули, на каждом узле может быть максимум два электрона (один со спином вверх и один со спином вниз).

Гамильтониан модели Хаббарда состоит из двух членов. Первый, кинетический, описывает движение электрона по решётке:

$$H_k = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.},$$

где $\langle i,j \rangle$ означает что i и j индексы соседних узлов решётки, σ обозначает спин электрона, а *h.c.* (hermtian conjugate) обозначает слагаемое, эрмитово сопряжённое написанному.

Оператор $c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$ уничтожает электрон на узле j и создает электрон с таким же спином на узле i , то есть, фактически, перемещает электрон с узла j на узел i .

Note: Эрмитово сопряжённый оператор $(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma})^\dagger = c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ перемещает электрон с узла i на узел j .

Так как этот член квадратичный, мы можем точно решить гамильтониан содержащий только его.

Второй член содержит отталкивающее взаимодействие двух электронов на одном узле, соответствующее отталкиванию двух зарядов:

$$H_U = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} = U \sum_i c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow}$$

Полный гамильтониан

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}.$$

Для того чтобы описать соответствующий спиновый Гамильтониан, каждому узлу мы сопоставим два кубита (один для каждого фермиона). Для простоты, рассмотрим одномерную цепочку:

$$\begin{aligned} c_{i,\downarrow} &= \prod_{k<2i} \sigma_k^z \sigma_{2i}^+ \\ c_{i,\uparrow} &= \prod_{k<2i+1} \sigma_k^z \sigma_{2i+1}^+ \end{aligned}$$

Следовательно, кинетическая часть равна

$$H_k = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{h.c.} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \prod_{\ell<2j} \sigma_\ell^z \sigma_{2j}^- \prod_{k<2i} \sigma_k^z \sigma_{2i}^+ + \text{h.c.}$$

Заметим, что хоть каждый оператор создания/уничтожения сильно не локален, в их произведении большая часть произведения отменяется (так как $(\sigma_j^z)^2 = 1$):

$$\begin{aligned} H_k &= -t \sum_j \sigma_{2j}^- \sigma_{2j}^z \sigma_{2j+1}^z \sigma_{2j+2}^+ + \sigma_{2j}^+ \sigma_{2j}^z \sigma_{2j+1}^z \sigma_{2j+2}^- = \\ &= -t \sum_j (\sigma_{2j}^- \sigma_{2j+2}^+ + \sigma_{2j}^+ \sigma_{2j+2}^-) \sigma_{2j}^z \sigma_{2j+1}^z = \\ &= -t \sum_j (\sigma_{2j}^x \sigma_{2j+2}^x + \sigma_{2j}^y \sigma_{2j+2}^y) \sigma_{2j}^z \sigma_{2j+1}^z \end{aligned}$$

Второй член дает нам (используя $\hat{\sigma}_i^z = 1 - 2\hat{n}_i$)

$$H_U = \frac{U}{4} \sum_j (1 - \sigma_{2j}^z)(1 - \sigma_{2j+1}^z)$$

Таким образом, мы получили спиновый гамильтониан:

$$H_k - t \sum_j (\sigma_{2j}^x \sigma_{2j+2}^x + \sigma_{2j}^y \sigma_{2j+2}^y) \sigma_{2j}^z \sigma_{2j+1}^z + \frac{U}{4} \sum_j (1 - \sigma_{2j}^z)(1 - \sigma_{2j+1}^z)$$

ПРОБЛЕМА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Автор(ы):

- Синченко Семен

55.1 Введение

Мы с вами узнали, что задачи комбинаторной оптимизации и квантовой химии могут быть сведены к решению проблемы поиска минимального собственного значения большого эрмитова оператора – гамильтониана. Для оптимизационных задач это *осуществляется* при помощи сведения к *QUBO*-матрице и гамильтониану типа Изинга. А для электронных орбиталей из квантовой химии можно *применить* преобразование Жордана-Вигнера и также перейти к спиновому гамильтониану.

Теперь перед нами встает вопрос, а как же искать основное состояние этого гамильтониана? В этой лекции рассмотрим **классические** методы решения этой проблемы, то есть без квантовых компьютеров. Рассмотрение этих методов и их недостатков покажет то, зачем тут так нужен будет квантовый компьютер.

55.2 О проблеме (повторение)

Эта тема обсуждалась во вводных лекциях по линейной алгебре, в части про собственные вектора и собственные значения.

Итак, пусть у имеется диагонализируемая матрица A размерности $n \times n$, она же является линейным оператором \hat{A} . Из линейной алгебры знаем, что у этой матрицы есть n таких чисел e_i и векторов Ψ_i , что для них выполняется условие:

$$A\Psi_i = e_i\Psi_i$$

или в нотации Дирака, которая используется в области квантовых вычислений:

$$\hat{A}\Psi_i = e_i\Psi_i$$

Таким образом, собственные вектора – это такие вектора, которые при применении оператора не меняют свое направление. Например, в примере ниже собственный вектор – это ось симметрии оператора:

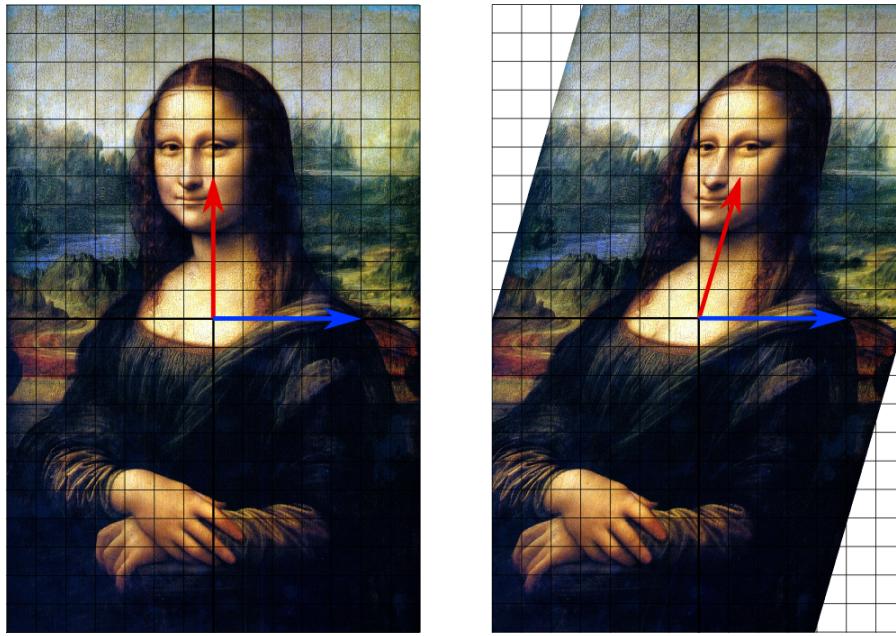


Fig. 55.1: Синий вектор, в отличии от красного, при применении оператора не меняет направление так как является его собственным вектором.

55.3 Итеративные алгоритмы

В целом, задача нахождения собственных значений является очень трудной с вычислительной точки зрения, особенно для больших матриц. Для матриц размера более, чем 3×3 в общем случае не существует алгоритма нахождения собственных значений и собственных векторов. Однако существует несколько итеративных алгоритмов. Рассмотрим лишь два из них, причем без особых деталей, так как эти алгоритмы, а также доказательство их сходимости являются достаточно сложными.

55.3.1 Степенной метод

Один из самых простых для понимания алгоритмов, который, тем не менее находит интересные применения. Суть его в том, что берем некоторый случайный вектор Ψ и начинаем последовательно действовать на него оператором \hat{A} (другими словами умножать, на нашу матрицу), при этом нормируя:

$$\Psi_{i+1} = \frac{\hat{A}\Psi_i}{\|\hat{A}\|}$$

И так повторяем до тех пор, пока изменение вектора не будет меньше, чем некоторое заданное маленькое значение ϵ . Когда достигли этого условия, это значит что нашли первый собственный вектор, который соответствует наибольшему собственному значению. В частном случае интересных нам эрмитовых операторов, можно так же последовательно находить все собственные векторы и собственные значения.

Note: На самом деле, сеть интернета является графом – множеством связанных между собой вершин. А любой граф можно представить в виде большой-большой, но очень разреженной матрицы, каждый элемент которой это 1 если между соответствующими вершинами есть ребро и 0, если нет. Например, элемент L_{ij} будет 1, если между вершинами i и j есть ребро. В 1998-м году, Ларри Пейдж и Сергей Брин нашли очень эффективный способ подсчета первого собственного вектора этой матрицы, используя именно модификацию степенного метода. Этот алгоритм получил название PageRank, причем Page это фамилия автора, а не ссылка к веб-страницам, как

можно было бы подумать. Этот алгоритм лег в основу поисковика *Google*, который в дальнейшем вырос в транснациональную корпорацию!

55.3.2 Итерация Арнольди

Это гораздо более сложный метод, который, однако, является одним из самых эффективных применительно к разреженным матрицам [Arn51]. Объяснить его легко, к сожалению, не получится, так как алгоритм требует понимания Крыловских подпространств и других концептов из области линейной алгебры разреженных систем. Но пока достаточно лишь того, что этот алгоритм имеет очень эффективную реализацию – **ARPACK**, написанную в середине 90-х годов на языке FORTRAN77. Именно эта библиотека используется “под капотом” у SciPy, а также во многих других научных пакетах. Давайте посмотрим, как она работает.

Сгенерируем большую разреженную матрицу.

```
import numpy as np
from scipy import sparse

np.random.seed(42)
x = np.random.random(10000)
np.random.seed(42)
y = np.random.random(10000)
px = np.where(x > 0.2)
py = np.where(y > 0.2)
num_elements = max([px[0].shape[0], py[0].shape[0]])
spmat = sparse.coo_matrix(
    (
        (np.ones(num_elements),
         (px[0][:num_elements], py[0][:num_elements]))
    )
)

print(spmat.__repr__())
```

```
<10000x10000 sparse matrix of type '<class 'numpy.float64'>'  
with 7957 stored elements in COOrdinate format>
```

Матрица размера 10000×10000 это большая матрица и работать с ней в “плотном” (dense) представлении было бы очень трудно. Но ARPACK позволяет найти минимальное собственное значение за доли секунд, используя разреженность матрицы:

```
from scipy.sparse import linalg as sl

max_eigval = sl.eigs(spmat, k=1, which="LR", return_eigenvectors=False)[0]
min_eigval = sl.eigs(spmat, k=1, which="SR", return_eigenvectors=False)[0]

print(f"Min E: {min_eigval}\nMax E: {max_eigval}")
```

```
Min E: (-2.7755575615628914e-17+0j)
Max E: (1.0000000000000004+0j)
```

Для тех кто забыл, какие параметры принимает функция `eigs` из `scipy.linalg.sparc` напомним, что первый параметр это разреженная матрица, `k` – сколько именно собственных значений хотим получить, `which` указывает на собственные значения:

- SM – *smallest magnitude* – наименьшие по модулю числа
- LM – *largest magnitude* – наибольшие по модулю числа
- SR – *smallers real* – числа с наименьшей действительной частью
- LR – *largest real* – числа с наибольшей действительной частью
- SI – *smallest image* – числа с наименьшей мнимой частью
- LI – *largest image* – числа с наибольшей мнимой частью

Наконец, параметр `return_eigenvectors` – хотим ли получить только собственные значения, или еще и собственные вектора.

Более подробна работа с `scipy.sparse`, а также с `scipy.sparse.linalg` разбирается в [вводном блоке по линейной алгебре](пока пусто).

Note: Не у всех матриц все собственные значения являются действительными, поэтому ARPACK по умолчанию считает комплексные значения, хотя в этом конкретном случае видим, что мнимая часть равна нулю.

55.3.3 Алгоритм Ланкзоша

Итерация Ланкзоша (англ. Lanzos) [Lan50] – это модификация итерации Арнольди, которая работает с эрмитовыми матрицами и находит максимально широкое применение в том числе для квантовых гамильтонианов. Этот алгоритм по умолчанию включен в большинство математических пакетов, включая ARPACK и, соответственно, SciPy:

```
max_eigval = sl.eigsh(spmat, k=1, which="LM", return_eigenvectors=False)[0]
min_eigval = sl.eigsh(spmat, k=1, which="SM", return_eigenvectors=False)[0]

print(f"Min E: {min_eigval}\nMax E: {max_eigval}")
```

```
Min E: -1.074893821039778e-25
Max E: 1.0000000000000004
```

У этой процедуры из ARPACK немного другие варианты параметра `which`, так как мы помним, что у эрмитовых матриц собственные значения вещественны:

- LM – *largest magnitude* – наибольшие по модулю
- SM – *smallest magnitude* – наименьшие по модулю
- LA – *largest algebraic* – алгебраически наибольшие, т.е. с учетом знака
- SA – *smallest algebraic* – алгебраически наименьшие, т.е. с учетом знака

55.4 Вариационные алгоритмы

В этом разделе поговорим о существующих алгоритмах решения задачи об основном состоянии уже в контексте квантовой механики. Хотя, как помним, задачи оптимизации и квантовой физики [тесно связаны](#). В каком-то смысле, вариационные алгоритмы, а в особенности, квантовый Монте-Карло и различные его модификации в чем-то сильно похожи на классический [алгоритм имитации отжига](#).

55.4.1 Вариационный Монте-Карло

Variational Monte-Carlo, или просто **VMC** это очень простой и в тоже время эффективный алгоритм нахождения основного состояния квантомеханической системы.

Note: Замечание – в классическом **VMC** обычно работают при нулевой температуре. Хотя в общем случае, температура оказывает значительное влияние на то, в каком состоянии находится физическая система.

Давайте еще раз запишем ожидаемое значение энергии гамильтонiana в состоянии Ψ :

$$E = \frac{\Psi|\hat{H}|\Psi}{\Psi|\Psi|}$$

Если ввести вектор X , который описывает конфигурацию системы (например, ориентации спинов), то выражение для энергии можно переписать в интегральной форме:

$$E = \frac{\int |\Psi(X)|^2 \frac{\hat{H}\Psi(X)}{\Psi(X)} dX}{\int |\Psi(X)|^2 dX}$$

В данном случае, выражение

$$\frac{|\Psi(X)|^2}{\int |\Psi(X)|^2 dX}$$

дает распределение вероятностей, а значит можно из него семплировать, используя методы Монте-Карло. Это очень похоже на то, как ранее семплировали из распределения Больцмана в [классическом методе Монте-Карло](#). Вопрос лишь в том, как представить волновую функцию Ψ ? В этом помогут так называемые *trial wave functions* – параметризованные функции от X . В этом случае меняем или *варьируем* параметры *trial wave function* в процессе:

- семплируем из $\frac{|\Psi(X)|^2}{\int |\Psi(X)|^2 dX}$ конфигурации;
- обновляем параметризацию *trial function* так, чтобы минимизировать энергию.

Повторяем до сходимости. Ну а дальше посмотрим на некоторые примеры *trial wave functions*.

Jastrow Function

Когда есть задача из N квантовых частиц, каждая из которых описывается координатой или радиус вектором, то можно построить *trial wave function* в виде суммы попарных функций двухчастичных взаимодействий:

$$\Psi(X) = e^{-\sum_{i,j} u(r_i, r_j)},$$

где r_i, r_j – это радиус-векторы частиц, а $u(r_i, r_j)$ – симметричная функция, описывающая двухчастичное взаимодействия. Такая функция называется **Jastrow function** [Jas55]. В этом случае, в процессе работы **VMC** будем просто варьировать радиус-векторы частиц также, как варьировали вершины графа в [обычном отжиге](#), когда решали задачу комбинаторной оптимизации. Только теперь есть еще и параметризация обменных взаимодействий, которую “варьируем”.

Hartree-Fock (SCF)

Для задач квантовой химии, когда работаем с фермионами, существует вид *trial wave function* на основе Слэтеровского детерминанта, о котором писали в [продвинутой лекции по квантовой химии](#):

$$\Psi(R) = D^\dagger D^\downarrow,$$

где D это матрица из одноэлектронных орбиталей:

$$D = \begin{bmatrix} \psi_1(r_1) & \psi_1(r_2) & \dots & \psi_1(r_{N/2}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{N/2}(r_1) & \psi_{N/2}(r_2) & \dots & \psi_{N/2}(r_{N/2}) \end{bmatrix}$$

Jastrow Function для спинов

Дальше нас будут интересовать как раз модели Изинга и спины, а не частицы в пространстве или орбитали из вторичного квантования. Для спинов можем записать Jastrow function следующим образом:

$$\Psi(s) = e^{\sum_{i,j} s_i W_{i,j} s_j},$$

где матрица W будет играть роль параметризации и отражать парные спиновые корреляции. Давайте посмотрим это на практике при помощи библиотеки NetKet [CCH+19].

```
import netket as nk
```

Моделировать будем простую модель Изинга для цепочки из 10 спинов (чтобы быстро считалось):

$$\hat{H} = -h \sum_i \sigma_i^x + J \sum_{i,j} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

Параметры возьмем такими:

- $J = 0.5$
- $h = 1.321$

```
g = nk.graph.Hypercube(length=10, n_dim=1, pbc=True)
hi = nk.hilbert.Spin(s=0.5, N=g.n_nodes)
op = nk.operator.IIsing(h=1.321, hilbert=hi, J=0.5, graph=g)
```

Поскольку модель относительно небольшая по числу частиц, то сразу можем получить точное решение методом Ланкзоша.

```
exact = nk.exact.lanczos_ed(op) [0]
```

Создадим модель на основе Jastrow и VMC:

```
sampler = nk.sampler.MetropolisLocal(hi)
model = nk.models.Jastrow(dtype=complex)
optimizer = nk.optimizer.Sgd(learning_rate=0.05)
sr = nk.optimizer.SR(diag_shift=0.01)
vmc = nk.driver.VMC(op, optimizer, sampler, model, n_samples=1008, preconditioner=sr)
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/netket/
↳utils/deprecation.py:126: FutureWarning:

**DEPRECATION_WARNING:**  

The `dtype` argument to neural-network layers and models is deprecated  

throughout NetKet to maintain consistency with new releases of flax.  

Please use `param_dtype` instead.

This warning will become an error in a future version of NetKet.

warn_deprecation(_dep_msg)
WARNING:absl:No GPU/TPU found, falling back to CPU. (Set TF_CPP_MIN_LOG_LEVEL=0  

↳and rerun for more info.)
```

Note: Изучение документации библиотеки NetKet оставляем вам самим, так как объяснение абстракций графа и гильбертова пространства, а также использование метода stochastic reconfiguration для вычисления градиентов выходит за рамки лекции. Документация представлена на [сайте NetKet](#).

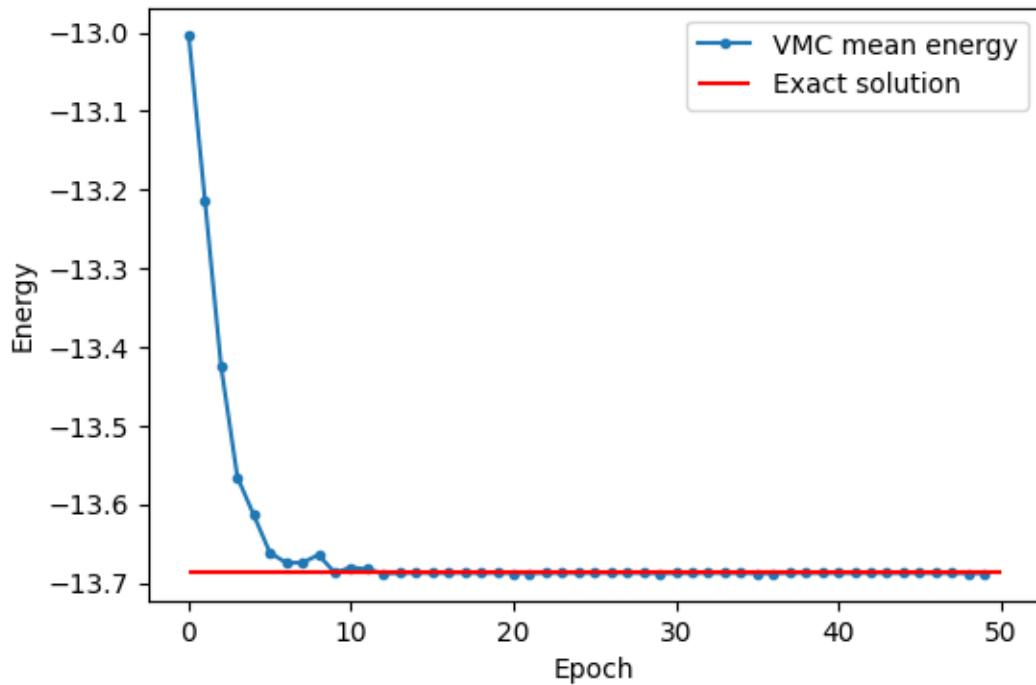
Запустим оптимизацию:

```
logger = nk.logging.RuntimeLog()  
vmc.run(50, out=logger, show_progress=False)
```

```
(RuntimeLog():  
    keys = ['Energy'],)
```

Посмотрим на результат:

```
import matplotlib.pyplot as plt  
  
plt.figure(figsize=(6, 4))  
plt.plot(list(range(50)), np.real(logger.data["Energy"]["Mean"]), ".-", label="VMC  
↳mean energy")  
plt.xlabel("Epoch")  
plt.ylabel("Energy")  
plt.hlines(exact, 0, 50, label="Exact solution", color="red")  
plt.legend()  
plt.show()
```



Neural Network Quantum States

Еще более интересный подход к выбору *trial wave function* – это использование в качестве $\Psi(X)$ нейронной сети [CT17]. Уже немножко [касались этой темы](#), когда речь шла о видах квантового машинного обучения. Хороший вариант, это использовать, например, полно связную сеть – ограниченную машину Больцмана:

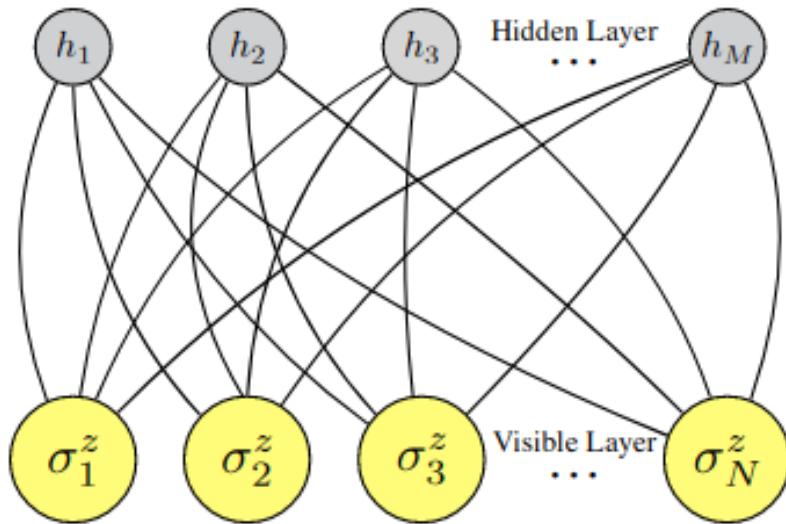


Fig. 55.2: Нейронная сеть в качестве *trial wave function* из работы [CT17].

Это также легко может быть реализовано с использованием библиотеки NetKet:

```

model = nk.models.RBM()
optimizer = nk.optimizer.Sgd(learning_rate=0.05)
sr = nk.optimizer.SR(diag_shift=0.01)
vmc = nk.driver.VMC(op, optimizer, sampler, model, n_samples=1000, preconditioner=sr)

logger = nk.logging.RuntimeLog()
vmc.run(50, out=logger, show_progress=False)

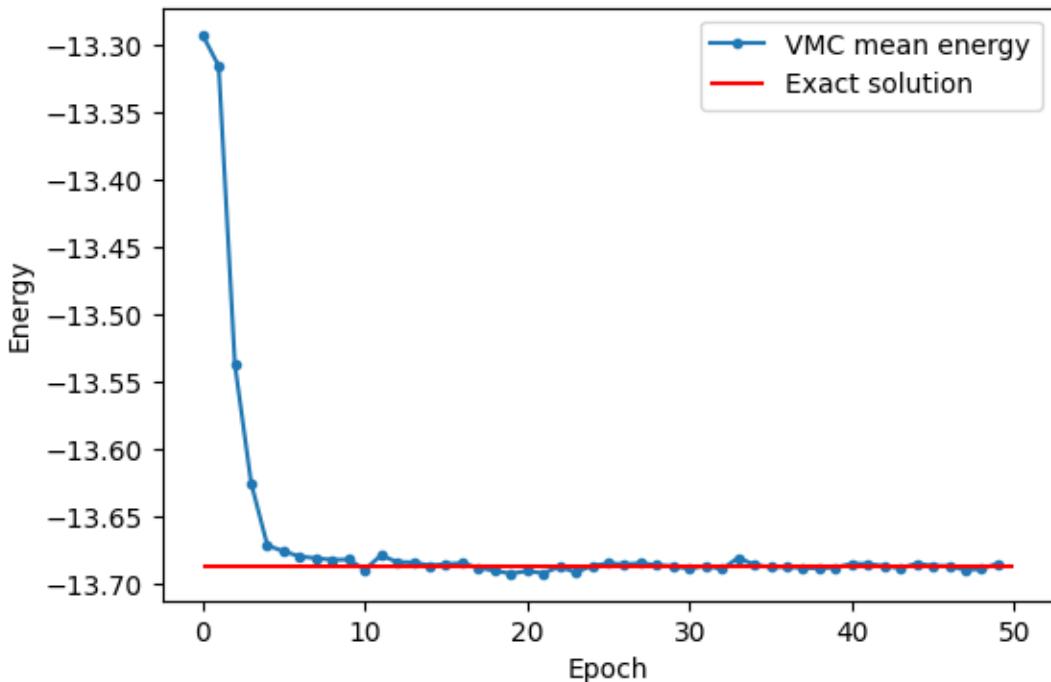
plt.figure(figsize=(6, 4))
plt.plot(list(range(50)), np.real(logger.data["Energy"]["Mean"]), ".-", label="VMC mean energy")
plt.xlabel("Epoch")
plt.ylabel("Energy")
plt.hlines(exact, 0, 50, label="Exact solution", color="red")
plt.legend()
plt.show()

```

```

/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/netket/vqs/
  ↵mc/mc_state/state.py:59: UserWarning: n_samples=1000 (1000 per MPI rank) does
  ↵not divide n_chains=16, increased to 1008 (1008 per MPI rank)
  warnings.warn(

```



Преимущества использования нейронной сети трудно показать на таком небольшом примере с моделью Изинга и 10-ю спинами, но они полностью раскрываются, если нужно анализировать более сложные модели.

Note: Это интересно, но при помощи библиотеки NetKet можно по сути решать проблемы комбинаторной оптимизации [SB19] с помощью методов *deep learning*.

55.4.2 Проблемы с VMC

К сожалению, у метода **VMC** есть свои проблемы. Это относительно плохая масштабируемость – при росте размерности проблемы для того, чтобы подобрать реально хорошую аппроксимацию потребуется все больше итераций и семплов на каждой из них. Также у **VMC** есть ряд фундаментальных проблем, например, так называемая *sign problem* [LJGS+90].

55.5 Заключение

В этой лекции рассмотрены известные подходы к решению задачи о минимальном собственном значении на классическом компьютере. Как увидели, все эти методы не могут быть масштабированы на реально большие операторы. Так что для решения этих проблем действительно нужен квантовый компьютер.

Part XVI

VQE

CHAPTER
FIFTYSIX

О БЛОКЕ “VQE”

Этот блок будет полностью посвящен вариационному алгоритму нахождения собственных значений операторов – Variational Quantum Eigensolver.

Базовая лекция расскажет верхнеуровневую интуицию алгоритма и в ней будет пример решения простой задачи Изинга. В продвинутой лекции будет практика решения на квантовом компьютере реальной комбинаторной задачи от начала и до конца.

CHAPTER
FIFTYSEVEN

VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER

Автор(ы):

- Синченко Семен

В этой лекции рассмотрим такой классный и очень перспективный алгоритм как Variational Quantum Eigensolver. Это алгоритм создан для аппроксимационного решения задачи о собственных значениях матриц. Но, как помним, к этой задаче *можно свести* большое число реально интересных задач, например, *NP-трудные задачи комбинаторной оптимизации*. Также к решению проблемы о собственных значениях спиновых систем *сводятся* задачи квантовой химии, которые *обсуждались* в отдельной лекции.

Задача о собственных значениях, на решение которой направлен рассматриваемый алгоритм *обсуждалась* ранее, поэтому не будем на ней останавливаться подробно.

57.1 VQE

Теперь давайте посмотрим, как эта задача связана с квантовым компьютером, а также как ее можно свести к градиентному спуску в пространстве параметров VQE, содержащей лишь гейты вращения. Напомню, что наличие лишь гейтов вращения *позволяет эффективно считать градиенты*.

57.1.1 Собственные значения как результат измерения

Итак, есть эрмитова матрица, для которой хотим найти минимальное собственное значение. То есть сделать примерно то, что делает ARPACK или VMC, но на квантовом компьютере.

Note: Если матрица A не эрмитова, то всегда можно ее дополнить до эрмитовой. Поэтому далее, без потери общности, будем считать эту матрицу именно эрмитовой. Между тем не будем рассматривать как именно это делать, пока достаточно знать что это возможно.

Из первых лекций помним, что любое измерение квантового оператора в каком-то состоянии есть проекция этого состояния на пространство *его собственных векторов*, а результатом измерения является *одно из его собственных значений*. При этом распределение вероятностей получения этих собственных значений определяется волновой функцией Ψ измеряемого состояния. А значит, то, какое собственное значение получим, будет определяться тем, какое состояние приготовим! Более того, минимальное значение энергии, или минимальное собственное значение в терминах этой задачи является наиболее вероятным результатом измерения основного состояния. Напомним, что результат измерения оператора \hat{A} в состоянии Ψ записывается так:

$$e = \Psi \hat{A} \Psi$$

А, как помним из лекции по параметризованным квантовым схемам, приготовленное состояние задается собственно самой схемой (еще говорят *ansatz*), а также набором ее классических параметров, которые вариируются в процессе обучения.

Так приходим к алгоритму VQE – Variational Quantum Eigensolver:

1. выбираем *ansatz* – параметризованный оператор $\hat{B}(q)$, который представляет из себя последовательность гейтов вращения; вектор q – это вектор из действительных чисел – параметров;
2. генерируем случайные начальные параметры q_0 ;
3. цикл обучения, повторяем n раз:
 1. готовим состояние $\Psi = \hat{B}(q_n)0$;
 2. измеряем $e = \Psi \hat{A} \Psi$;
 3. вычисляем градиент $g = \frac{\partial e}{\partial q}$;
 4. обновляем параметры $q_{n+1} = q_n - \alpha g$;
4. результатом обучения являются:
 - набор параметров q такой, что $\hat{B}(q)0$ является вектором, близким к первому собственному вектору \hat{A} ;
 - результат измерения e , близкий к первому собственному значению \hat{A} .

57.2 Интуиция алгоритма

Если вспомнить подход **VMC** для решения задачи о собственных значениях, то там использовался *trial wave function* – некоторое, параметризованное кодирование состояния в его вероятность. С некоторой долей условности можно рассматривать *ansatz* в **VQE** как квантовый аналог классических *trial wave functions*. Только вместо семплирования при помощи методов Монте-Карло, условно говоря, сэмплируем из реальной волновой функции, когда считаем математическое ожидание результата измерения. Как помним из первой лекции измерение есть проекция на один из собственных векторов, то есть можно рассматривать это как выбор сэмпла из пространства всех собственных векторов. Причем для определения вероятности используется состояние после применения параметризованного *ansatz*.

57.3 Пример

Решим простую задачку с тривиальной моделью Изинга, который рассматривали в посвященной этому лекции. Будем использовать тот же код:

```
import numpy as np
from scipy import sparse
from scipy.sparse import linalg as sl

def sigmaz_k(k: int, n: int) -> (sparse.csr_matrix):
    left_part = sparse.eye(2 ** k)
    right_part = sparse.eye(2 ** (n - 1 - k))

    return sparse.kron(
        sparse.kron(
            left_part,
            sparse.csr_matrix(np.array([[1, 0], [0, -1]]))))
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

),
right_part
)

def ising(j: float, h: float, n: int) -> (sparse.csr_matrix):
    res = sparse.csr_matrix((2 ** n, 2 ** n), dtype=np.complex64)

    for i in range(n - 1):
        res += j * sigmaz_k(i, n) * sigmaz_k(i + 1, n)
        res -= h * sigmaz_k(i, n)

    res -= h * sigmaz_k(n - 1, n)

    return res

```

Создадим оператор со значениями $j = 1.0, h = 2.0$:

```
op = sparse.coo_matrix(ising(j=1.0, h=2.0, n=10))
```

57.3.1 Ansatz

Воспользуемся относительно простым вариантом кодирования с использование $CNOT$ и нескольких слоев.

Note: Более подробно причина выбора именно такого кодирования, а также подробности внутренней реализации на PennyLane рассматривается в практической лекции по VQE.

```

import pennylane as qml

N_SPINS = 10
N_LAYERS = 2

device = qml.device("default.qubit", wires=N_SPINS)
ham = qml.SparseHamiltonian(op, wires=list(range(N_SPINS)), id="Hamiltonian")

def layer(params):
    for i in range(N_SPINS):
        qml.RY(params[i][0], wires=i)
        qml.RZ(params[i][1], wires=i)

    for i in range(N_SPINS - 1):
        qml.CZ(wires=[i, i + 1])

@qml.qnode(device, diff_method="parameter-shift")
def feed_forward(params):
    for k in range(N_LAYERS):
        layer(params[k])

    for i in range(N_SPINS):
        qml.RY(params[-1][i][0], wires=i)
        qml.RZ(params[-1][i][1], wires=i)

    return qml.expval(ham)

```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

params = tuple(
    tuple(
        (
            np.random.rand() * 2 * np.pi,
            np.random.rand() * 2 * np.pi,
        )
        for _ in range(N_SPINS)
    )
    for _ in range(N_LAYERS)
)

print(f"Result for random weights: {feed_forward(params):.4f}")

```

```

/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
↳ hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
  warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")

```

```
Result for random weights: -4.0940
```

57.3.2 Обучение

Возьмем точное решение из лекции по модели Изинга:

```
exact = -11.0
```

Запустим обучение и посмотрим, как оно сходится:

```

import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = "retina"

opt = qml.MomentumOptimizer()

energy = [
    feed_forward(params),
]

for epoch in range(60):
    params, e = opt.step_and_cost(feed_forward, params)
    energy.append(e)

plt.figure(figsize=(10, 8))
plt.plot(np.arange(len(energy)), energy, ".-", label="Energy by epochs")
plt.hlines(
    exact,
    0,
    len(energy),
    color="red",
    label="Exact solution",
)
plt.xlabel("Epoch")
plt.ylabel("Energy")

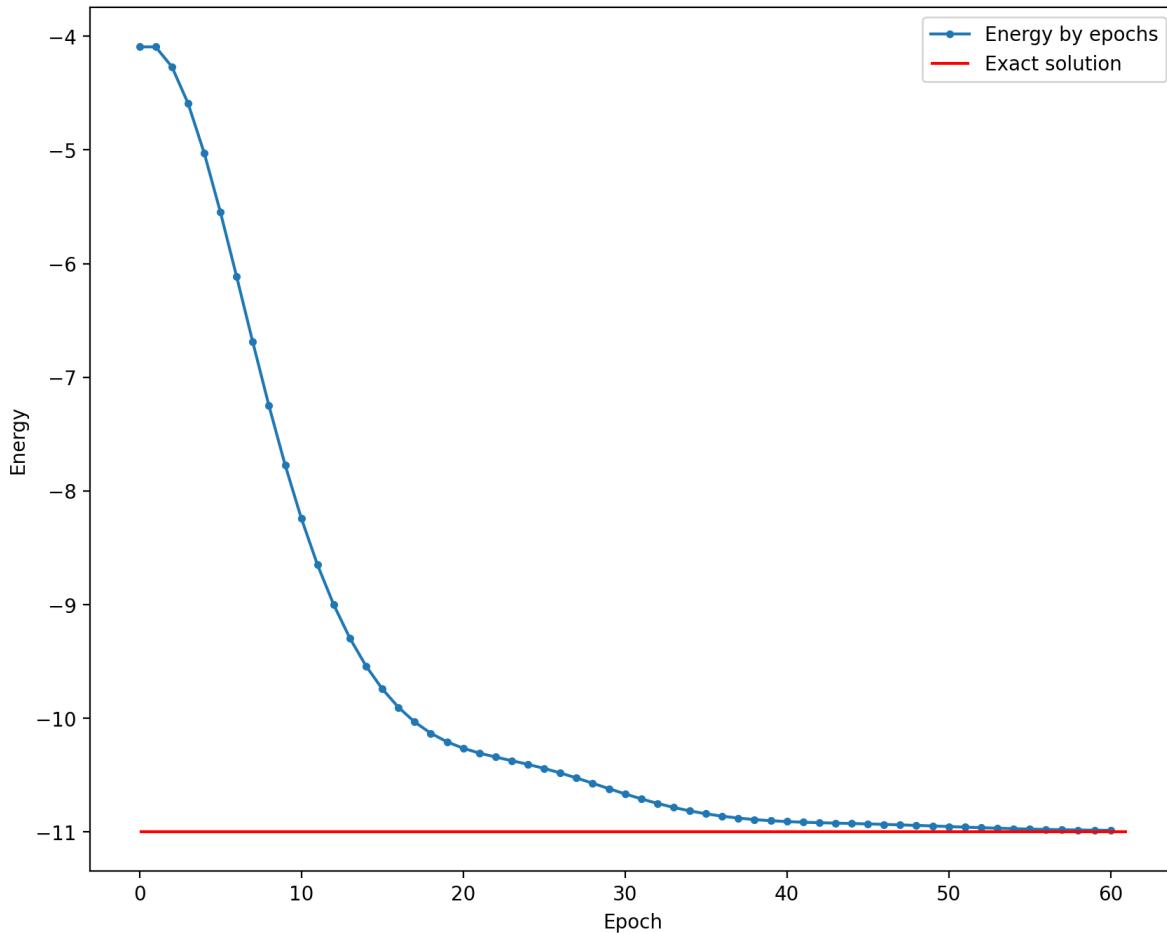
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
plt.legend()
plt.show()
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/pennylane/_grad.py:95: UserWarning: Starting with PennyLane v0.21.0, when using Autograd, inputs have to explicitly specify requires_grad=True (or the argnum argument must be passed) in order for trainable parameters to be identified.
warnings.warn(
```



57.4 Заключение

В этой лекции познакомились в **VQE** – очень перспективным, красивым и мощным алгоритмом для решения задач о собственных значениях на квантовых компьютерах. В следующей лекции более детально посмотрим на реализацию этого алгоритма в коде, а также обсудим выбранный *ansatz*.

ПРАКТИКА VQE

Автор(ы):

- Синченко Семен

Эта лекция будет посвящена практике с **VQE**, а именно решению задачи коммивояжера. Будет много кода и мало теории. Рекомендуется заранее повторить следующие лекции:

- Описание задачи коммивояжера в лекции про задачи комбинаторной оптимизации.
- Сведение этой задачи к модели **Изинга** в лекции о переходе от комбинаторных задач к квантовым алгоритмам.

Нам потребуется определить бинарный оператор $\sigma^{z_{mod}}$, который активно **использовали** при определении гамильтониана. Нужно будет расписать полный оператор, отвечающий данной задаче и нужен случайный взвешенный граф, по которому будет “путешествовать” коммивояжер. Начнем с импорта библиотек и генерации графа.

58.1 Импорт библиотек

Для графов будем использовать структуры данных из уже знакомой нам библиотеки NetworkX, а для работы с разреженными операторами SciPy.

```
import matplotlib.pyplot as plt
%config InlineBackend.figure_format = "retina"

import numpy as np
import networkx as nx
from scipy import sparse
from scipy.sparse import linalg as sl
```

58.2 Случайный взвешенный граф

Случайный взвешенный граф проще всего сгенерировать из случайной матрицы весов. Давайте сделаем такую:

Note: Тут будем работать с матрицей полного графа, то есть такого, в котором каждая вершина связана с каждой. Это вполне корректное допущение для задачи коммивояжера, так как, например, из каждого города РФ обычно можно попасть во все другие, пусть и за разное время в пути.

```
np.random.seed(42)
rand_mat = np.random.randint(0, 100, (4, 4))
```

Только эта матрица не является симметричной и имеет ненулевые элементы на диагонали. Элементы на диагонали означают петли (loop или self-loop), что не очень разумно в терминах задачи коммивояжера: не ясно, что значит, например, путь из Москвы в Москву. Аналогично и про то, что матрица не симметричная: если путь из Москвы в Санкт-Петербург займет 6 часов, то и путь обратно тоже займет столько же. Так что хотим симметричную матрицу. Давайте это исправим:

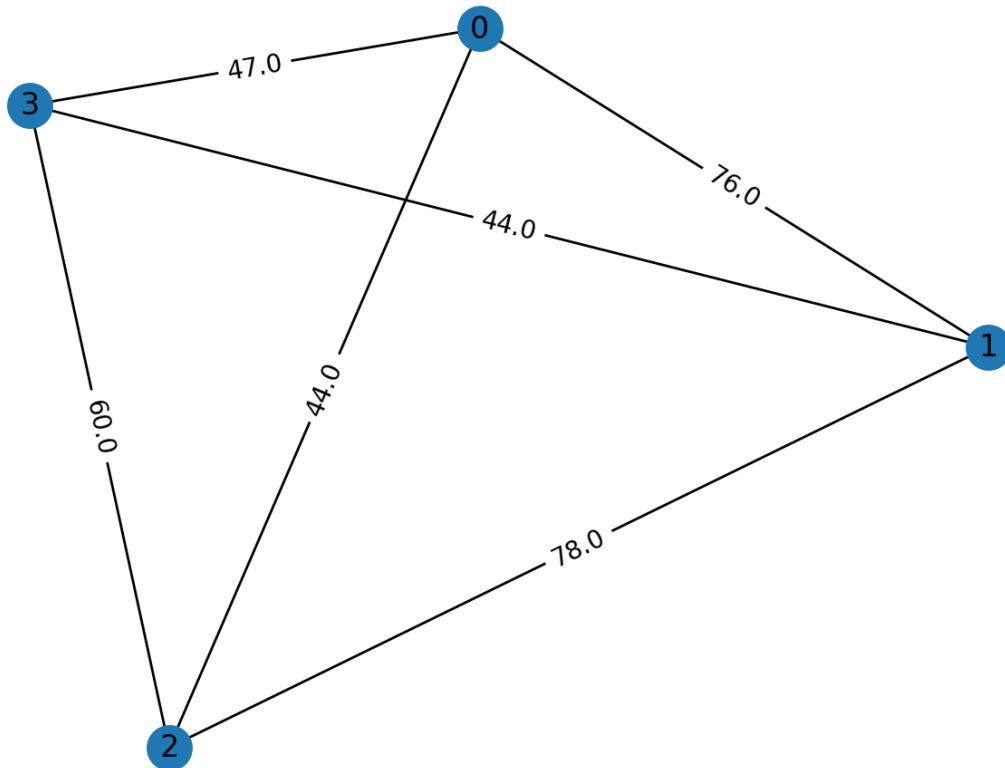
```
rand_adj = (rand_mat + rand_mat.T) / 2
np.fill_diagonal(rand_adj, 0)
```

Наконец, сделаем из этого граф и визуализируем его:

```
g = nx.Graph(rand_adj)

pos = nx.drawing.layout.random_layout(g, seed=42)
nx.draw(g, pos=pos)
edge_weights = nx.get_edge_attributes(g, "weight")
nx.draw_networkx_edge_labels(g, pos=pos, edge_labels=edge_weights)
nx.draw_networkx_labels(g, pos=pos)

plt.show()
```



58.3 Решение задачи TSP в NetworkX

Для того, чтобы потом понять, что все правильно сделали, давайте найдем приближенное решение задачи средствами NetworkX.

```
nx_solution = nx.algorithms.approximation.traveling_salesman_problem(g)
print(f"NetworkX solution (nodes order): {nx_solution}")

nx_solution_cost = 0
for i in range(len(nx_solution) - 1):
    nx_solution_cost += g.get_edge_data(nx_solution[i], nx_solution[i + 1])["weight"]

print(f"NetworkX solution (total cost): {nx_solution_cost}")
```

```
NetworkX solution (nodes order): [0, 3, 1, 2, 0]
NetworkX solution (total cost): 213.0
```

58.4 Матрица $\hat{\sigma}_{mod}^z$

Это бинарный оператор, который ранее [вводили](#) в лекции о представлении комбинаторных задач в виде моделей Изинга. Соотношение между $\hat{\sigma}_{mod}^z$ и $\hat{\sigma}^z$ таково:

$$\hat{\sigma}_{mod}^z = \frac{1 + \hat{\sigma}^z}{2}$$

```
def sigma_z_mod(k: int, size: int) -> sparse.csr_matrix:
    sz_mod = sparse.coo_matrix(
        [
            [1, 0],
            [0, 0],
        ]
    )

    left_ith = sparse.eye(2 ** k, format="coo")
    right_ith = sparse.eye(2 ** (size - k - 1), format="coo")

    return sparse.kron(
        sparse.kron(left_ith, sz_mod),
        right_ith,
    )
```

Для произвольного состояния ψ справедливо

$$\hat{\sigma}_{mod}^z \psi = \frac{1}{2} \psi + \frac{1}{2} \hat{\sigma}^z \psi$$

Пусть ϕ – собственный вектор (собственное состояние) оператора $\hat{\sigma}^z$, соответствующий собственному значению λ :

$$\hat{\sigma}^z \phi = \lambda \phi$$

Отсюда следует, что

$$\hat{\sigma}_{mod}^z \phi = \frac{1}{2} \phi + \frac{1}{2} \lambda \phi = \frac{1 + \lambda}{2} \phi$$

Значит,

- собственные векторы $\hat{\sigma}_{mod}^z$ и $\hat{\sigma}^z$ совпадают;
- соответствующие собственные значения связаны соотношением $\lambda_{mod} = \frac{1+\lambda}{2}$.

Поскольку $\lambda \in \{-1, +1\}$, получаем $\lambda_{mod} \in \{0, 1\}$. На всякий случай проверим это, создав оператор маленькой размерности и вычислив его собственные значения:

```
eigs = np.linalg.eig(sigma_z_mod(1, 3).toarray())
print(np.unique(eigs[0]))
```

```
[0. 1.]
```

Напомню, что у нас zero-based индексация, поэтому `sigma_z_mod(1, 3)` значит что-то типа “построй мне матрицу $\hat{\sigma}_{mod}^z$, действующую на второй спин (ну или второй кубит)”.

Легко убедиться, что

- для $\lambda_{mod} = 1$ собственный вектор представляется битовой строкой, в которой спин с индексом 1 имеет значение 0;
- для $\lambda_{mod} = 0$ собственный вектор представляется битовой строкой, в которой спин с индексом 1 имеет значение 1.

```
def sigmaz_k(k: int, n: int) -> sparse.csr_matrix:
    left_part = sparse.eye(2 ** k)
    right_part = sparse.eye(2 ** (n - 1 - k))

    return sparse.kron(
        sparse.kron(
            left_part,
            sparse.csr_matrix(np.array([[1, 0], [0, -1],])))
        ,
        right_part
    )

def probs2bit_str(probs: np.array) -> str:
    size = int(np.log2(probs.shape[0]))
    bit_s_num = np.where(probs == probs.max())[0][0]
    s = f'{bit_s_num:b}'
    s = "0" * (size - len(s)) + s

    return s

for i, psi in enumerate(eigs[1]):
    probs = psi * psi.conj()
    bit_s = probs2bit_str(probs)
    print(f"Eigenvalue: {eigs[0][i]}\tBit string: {bit_s}")
```

```
Eigenvalue: 1.0      Bit string: 000
Eigenvalue: 1.0      Bit string: 001
Eigenvalue: 0.0      Bit string: 010
Eigenvalue: 0.0      Bit string: 011
Eigenvalue: 1.0      Bit string: 100
Eigenvalue: 1.0      Bit string: 101
Eigenvalue: 0.0      Bit string: 110
Eigenvalue: 0.0      Bit string: 111
```

Убедимся также в совпадении собственных векторов с матрицей σ^z :

Note: Для чистых состояний без запутывания матрицы собственных векторов могут быть приведены к виду единичных матриц. И действительно, каждый собственный вектор отвечает строго одной конфигурации спинов, а значит его волновая функция имеет вид $\Psi = 0, 0, \dots, 1, \dots, 0, 0$, где 1 соответствует как раз номеру той битовой строки, которая отвечает этой конфигурации.

```
print(f"Sigma z_mod:\n{eigs[1]}")
print(f"\nSigma z:\n{np.linalg.eig(sigmax_k(1, 3).toarray())[1]}")
```

```
Sigma z_mod:
[[1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1.]]
```



```
Sigma z:
[[1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0.]
 [0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1.]]
```

Note: В общем случае, даже если у двух операторов совпадают собственные вектора, то их порядок (по возрастанию собственных значений) совпадать совсем не обязан. В этом легко убедиться, например, если поменять местами $\hat{1}$ и $\hat{\sigma}^z$ в $\sigma^{z_{mod}}$. Поэтому, чтобы избежать ошибок в будущем, лучше не привыкать сравнивать матрицы собственных векторов при помощи `np.allclose`, а сравнивать их глазами построчно.

58.5 Гамильтониан задачи TSP

Давайте еще раз выпишем полный гамильтониан системы. Напомню, что задача будет параметризована при помощи N^2 кубит, которые для удобства выстроены в виде матрицы, где i -я строка соответствует i -му шагу в цикле по графу, а j -й элемент строки соответствует номеру вершины и является бинарным оператором:

$$\hat{H} = a \sum_{i=1}^N \left(1 - \sum_{j=1}^N \sigma_{i,j}^{z_{mod}}\right)^2 + a \sum_{j=1}^N \left(1 - \sum_{i=1}^N \sigma_{i,j}^{z_{mod}}\right)^2 + a \sum_{u,v \notin E} \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_{u,j}^{z_{mod}} \sigma_{v,j+1}^{z_{mod}} + b \sum_{u,v \in E} \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_{u,j}^{z_{mod}} \sigma_{v,j+1}^{z_{mod}}$$

Note: Еще раз вспомним, что первые два слагаемых “говорят”: каждая вершина должна входить только в один столбец, а каждая строка должна содержать только одну вершину. Третье слагаемое представляет собой штраф за соединение вершин, между которыми нет ребра, а четвертое дает стоимость всего пути. Первые три слагаемых идут с большим коэффициентом, чем последнее, так как нам важно в первую очередь получить реальное решение, а не получить самое дешевое.

Сделаем финт ушами: будем всегда считать, что путь коммивояжера начинается в вершине с индексом 0. Так как путь коммивояжера это гамильтонов цикл, то делаем это упрощение без какой-либо потери общности, так как вершина с индексом 0 все равно должна будет войти в путь. При этом такой хитрый трюк позволит снизить число необходимых кубит с N^2 до $(N - 1)^2$, что довольно существенно (хотя асимптотическая сложность остается такой же). Работать с графом будем при помощи уже знакомой библиотеки NetworkX:

```
def convert_tsp_to_ising(g: nx.Graph) -> sparse.coo_matrix:
    # Имеется два элемента гамильтониана:
    #   - часть, дающая нам Гамильтонов цикл
    #   - часть, считающая стоимость пути
    # Для нас важно, чтобы вес первой части превалировал.
    # Поэтому, в качестве коэффициента берем
    # пятикратное значение максимального веса ребер в графе.

    a = 5 * max([e[2]["weight"] for e in g.edges(data=True)])
    size = g.number_of_nodes() - 1

    H = sparse.coo_matrix((2 ** (size ** 2), 2 ** (size ** 2)), dtype=np.complex128)

    # Вычисляем сумму по колонкам:
    #   - каждая вершина должна быть в каждой колонке строго один раз
    for i in range(size):
        # Считаем выражение  $1 - \sum$ 
        col_sum = sparse.eye(2 ** (size ** 2), format="coo")
        for j in range(size):
            col_sum -= sigma_z_mod(i + j * size, size ** 2)

        # Возводим в квадрат и добавляем к гамильтониану
        H += a * col_sum * col_sum

    # Вычисляем сумму по строкам:
    #   - каждая вершина должна быть в каждой строке строго один раз
    for j in range(size):
        row_sum = sparse.eye(2 ** (size ** 2), format="coo")
        for i in range(size):
            row_sum -= sigma_z_mod(i + j * size, size ** 2)

        # Аналогично, в квадрат и добавляем
        H += a * row_sum * row_sum

    # Считаем сумму по тем ребрам, которых в графе нет и тем, которые есть.
    for i in range(size):
        for j in range(size):
            if g.has_edge(i + 1, j + 1):
                # Сумма по всем ребрам графа
                coef = g.get_edge_data(i + 1, j + 1)["weight"]
            else:
                # Сумма по всем отсутствующим ребрам графа
                coef = a

            for k in range(size - 1):
                # Дальше просто используем полученный коэффициент и считаем сумму
                H += (
                    coef
                    * sigma_z_mod(i + k * size, size ** 2)
                    * sigma_z_mod(j + (k + 1) * size, size ** 2)
                )
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

H += (
    coef
    * sigma_z_mod(i + (size - 1) * size, size ** 2)
    * sigma_z_mod(j, size ** 2)
)

# Начинаем всегда из нулевой вершины, это позволяет снизить число необходимых кубитов.
# Теперь должны добавить в гамильтониан слагаемое, отвечающее за нулевую вершину в пути.
for j in range(size):
    if g.has_edge(0, j + 1):
        coef = g.get_edge_data(0, j + 1)["weight"]
    else:
        coef = a

    H += coef * sigma_z_mod(j, size ** 2)
    H += coef * sigma_z_mod(j + (size - 1) * size, size ** 2)

# PennyLane работает с матрицами только в координатном формате, поэтому сразу делаем приведение.
return sparse.coo_matrix(H)

```

Убедимся, что точное решение даст тот же путь (с той же стоимостью), что и решение из NetworkX:

```

op = convert_tsp_to_ising(g)
scipy_solution = sl.eigs(op, k=1, which="SR", return_eigenvectors=True)
print(f"Ground state energy: {scipy_solution[0][0]:.4f}")

probs = scipy_solution[1] * scipy_solution[1].conj()
bit_s = probs2bit_str(probs)

# Нулевая вершина всегда первая
scipy_path = [0,]

for i in range(3):
    k = 0
    for j in range(3):
        if bit_s[j + i * 3] == "0":
            k = j + 1
    scipy_path.append(k)
scipy_path.append(0)

scipy_solution_cost = 0
for i in range(len(scipy_path) - 1):
    scipy_solution_cost += g.get_edge_data(scipy_path[i], scipy_path[i + 1])["weight"]

print(f"SciPy solution (nodes order): {scipy_path}")
print(f"SciPy solution (total cost): {scipy_solution_cost}")

```

```

Ground state energy: 273.0000-0.0000j
SciPy solution (nodes order): [0, 2, 1, 3, 0]
SciPy solution (total cost): 213.0

```

Видим, что решение через матрицу совпадает с тем, что выдал NetworkX (с точностью до инверсии: [0, 2,

$[1, 3, 0]$ и $[0, 3, 1, 2, 0]$), как и общая стоимость пути. Энергия основного состояния отличается по причине того, что использовали оптимизацию и магию с коэффициентами. Но это не так важно: по энергиям важно лишь отношение порядка, потому что зная битовую строку всегда можем проверить стоимость пути за линейное время!

Теперь можно наконец-то, приступать к симуляции квантовых вычислений!

58.6 VQE на Pennylane

Для начала давайте преобразуем матрицу к тому объекту, с которым умеет работать квантовый фреймворк.

Note: Pennylane поддерживает также работу с представлением гамильтонианов в виде так называемых Паули-строк, но тут не будем еще раз определять весь гамильтониан, а просто перерис пользуем разреженную матрицу.

Веса графа имеют разброс значений от 0 до 100. Из-за этого, при некоторых конфигурациях можем получать очень большое собственное значение гамильтониана, вплоть до нескольких тысяч. Это не очень хорошо для градиентного спуска методом `paramter-shift`, поэтому для численной устойчивости давайте умножим все значения весов на 0.1. Это сделает градиенты не слишком большими и улучшит численную устойчивость. Делать это можно совершенно спокойно, так как не критична численная величина минимального собственного, а важно лишь отношение порядка собственных значений.

```
import pennylane as qml

numer_stability_const = 0.1
ham = qml.SparseHamiltonian(op * numer_stability_const, wires=list(range(9)))
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/_distutils_
↳ hack/__init__.py:33: UserWarning: Setuptools is replacing distutils.
  warnings.warn("Setuptools is replacing distutils.")
```

Далее необходимо выбрать *ansatz*. Современные квантовые процессоры обычно имеют вид решетки, типа такого:

Поэтому, в идеале, хотелось бы делать либо однокубитные операции, либо двухкубитные операции, но над “соседними” кубитами. Так появилась идея *hardware efficient ansatz* [KMT+17]. Он заключается в том, что формируется несколько “слоев” **VQC**, где каждый такой слой содержит несколько операций вращений, а также попарные “запутывающие” операции (например, **CZ**, или гейт **CNOT**). Выглядит это примерно так:

Давайте реализуем такой слой:

```
size = len(ham.wires)

def layer(params):
    for i in range(size):
        qml.RY(params[i][0], wires=i)
        qml.RZ(params[i][1], wires=i)

    for i in range(size - 1):
        qml.CZ(wires=[i, i + 1])
```

Здесь специально не повторяем основ параметризованных квантовых схем. Для тех, кто забыл, что это такое, рекомендуем вернуться к *отдельной лекции* по этой теме.

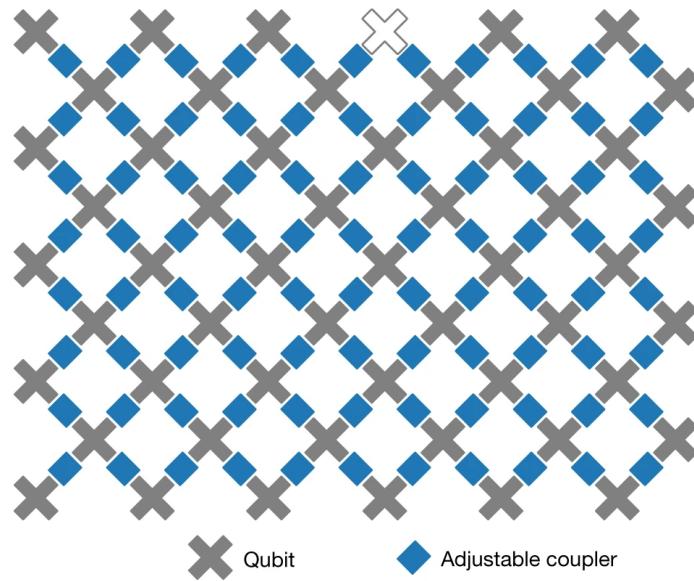


Fig. 58.1: Схематичное изображение квантового компьютера *Sycamore* от компании *Google* [AAB+19]

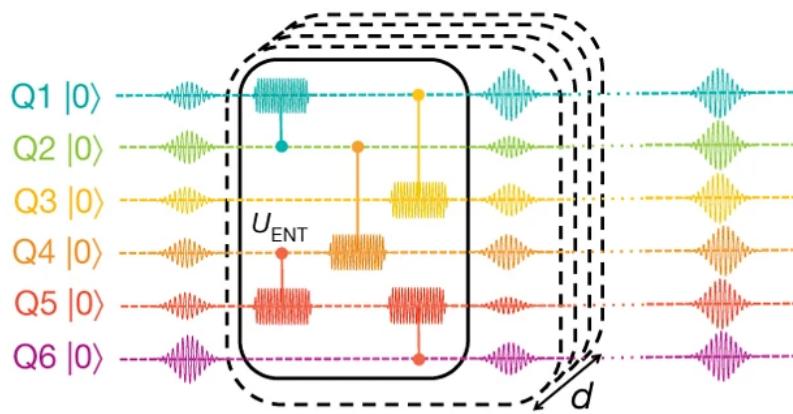


Fig. 58.2: Иллюстрация *hardware efficient ansatz* (*HWEA*) из [KMT+17]

Теперь создадим устройство, которое будет квантовым симулятором, а также напишем код, который будет на этом устройстве запускаться. Такой код должен последовательно применить несколько *HWEA* слоев, после чего измерить ожидаемое значение гамильтониана в полученном состоянии.

```
device = qml.device("default.qubit", wires=size)
num_layers = 3

@qml.qnode(device, diff_method="parameter-shift")
def feed_forward(params, wires=size):
    for k in range(3):
        layer(params[k])

    for i in range(size):
        qml.RY(params[-1][i][0], wires=i)
        qml.RZ(params[-1][i][1], wires=i)

    return qml.expval(ham)
```

Теперь надо сгенерировать параметры и выбрать метод их оптимизации. В этот раз давайте воспользуемся алгоритмом Momentum, так называемым “ускоренным” градиентным спуском:

```
opt = qml.MomentumOptimizer()
params = tuple(
    (
        np.random.rand() * 2 * np.pi,
        np.random.rand() * 2 * np.pi,
    )
    for _ in range(size)
)
for _ in range(num_layers + 1)
)
```

Ну и наконец можно приступать к оптимизации параметров. Все примерно также, как в *базовой лекции про градиенты*. То есть ничего нового тут по сути не делается.

58.7 Симуляция

Warning: Осторожно, следующий код работает несколько минут, так как обучаем довольно тяжелую схему на 9-и кубитах! Кстати, при желании можно добиться гораздо большие точности по энергии относительно точного решения. Для этого достаточно установить число эпох ~ 150 . Но поскольку этот код исполняется при сборке данных лекций, то мы не можем себе позволить считать отдельные страницы по 7-10 минут. Читателю рекомендуется самостоятельно определить то число эпох, которого достаточно, чтобы получить точность в 3-м знаке после запятой.

```
energy = [
    feed_forward(params),
]

for epoch in range(85):
    params, e = opt.step_and_cost(feed_forward, params)
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```
energy.append(e)

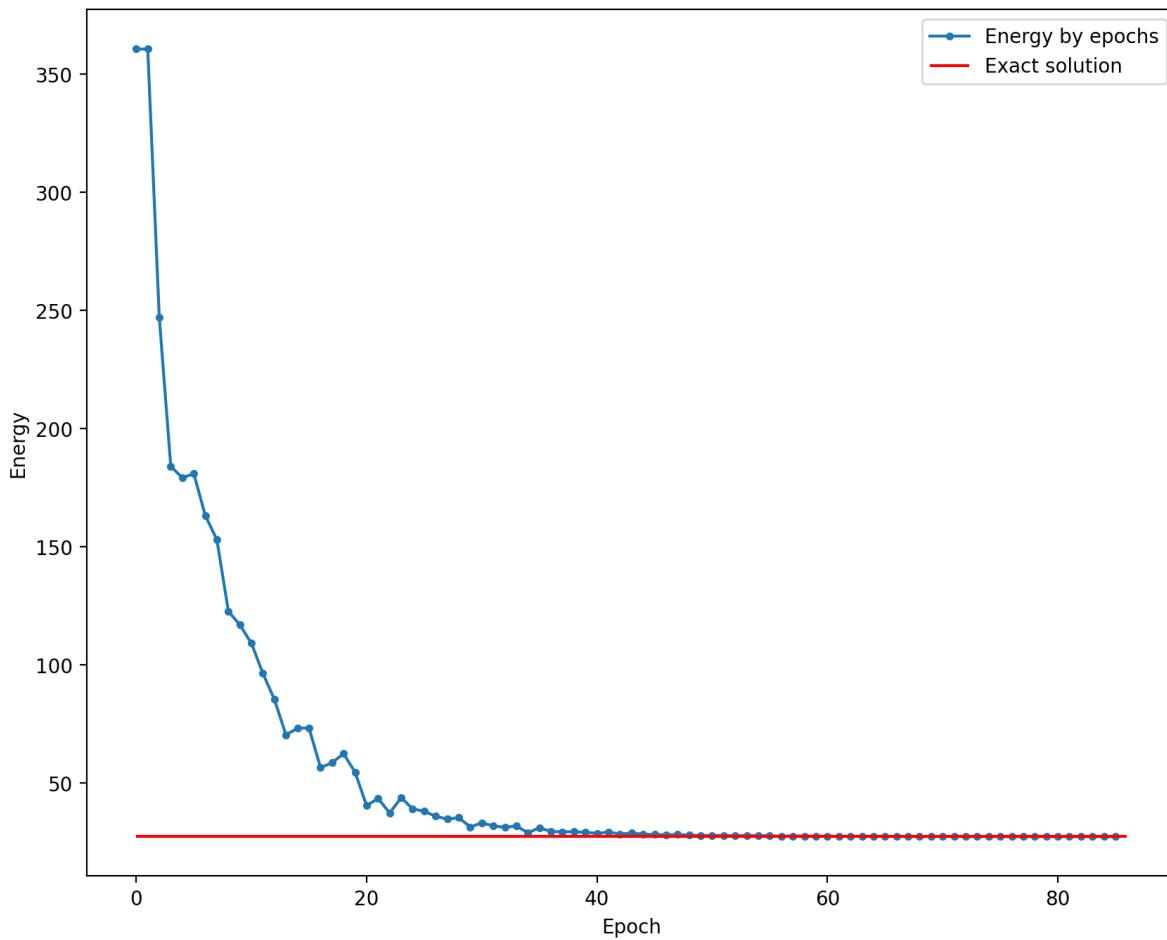
if epoch % 5 == 0:
    print(f"epoch: {epoch}\tenergy: {e:.6f}")
```

```
/home/runner/work/qmlcourse/qmlcourse/.venv/lib/python3.8/site-packages/pennylane/_grad.py:95: UserWarning: Starting with PennyLane v0.21.0, when using Autograd, inputs have to explicitly specify requires_grad=True (or the argnum argument must be passed) in order for trainable parameters to be identified.
warnings.warn(
```

```
epoch: 0          energy: 360.638506
epoch: 5          energy: 163.172963
epoch: 10         energy: 96.375950
epoch: 15         energy: 56.524352
epoch: 20         energy: 43.497589
epoch: 25         energy: 35.938162
epoch: 30         energy: 31.882151
epoch: 35         energy: 29.457526
epoch: 40         energy: 29.232270
epoch: 45         energy: 28.058306
epoch: 50         energy: 27.814023
epoch: 55         energy: 27.495886
epoch: 60         energy: 27.479515
epoch: 65         energy: 27.411348
epoch: 70         energy: 27.348231
epoch: 75         energy: 27.329692
```

```
epoch: 80           energy: 27.324815
```

```
plt.figure(figsize=(10, 8))
plt.plot(np.arange(len(energy)), energy, ".-", label="Energy by epochs")
plt.hlines(
    np.real(scipy_solution[0][0]) * numer_stability_const,
    0,
    len(energy),
    color="red",
    label="Exact solution",
)
plt.xlabel("Epoch")
plt.ylabel("Energy")
plt.legend()
plt.show()
```



Видим, что VQE отлично сходится к основному состоянию, которое знаем из SciPy и ARPACK. Теперь давайте убедимся, что квантовый путь совпадет с тем, что получили из NetworkX. Для этого нужно получить распределение вероятностей битовых строк. На реальном компьютере это можно сделать просто измеряя много раз, но на симуляторе есть возможность получить его сразу одной командой.

```
@qml.qnode(device, diff_method="parameter-shift")
```

(continues on next page)

(continued from previous page)

```

def answer(params, wires=size):
    for k in range(num_layers):
        layer(params[k])

    for i in range(size):
        qml.RY(params[-1][i][0], wires=i)
        qml.RZ(params[-1][i][1], wires=i)

    return qml.probs(wires=list(range(size)))

probs = answer(params)
bit_s = probs2bit_str(probs)

# Нулевая вершина всегда первая
q_path = [0,]

for i in range(3):
    k = 0
    for j in range(3):
        if bit_s[j + i * 3] == "0":
            k = j + 1
    q_path.append(k)
q_path.append(0)

q_solution_cost = 0
for i in range(len(q_path) - 1):
    q_solution_cost += g.get_edge_data(q_path[i], q_path[i + 1])["weight"]

print(f"Quantum solution (nodes order): {q_path}")
print(f"Quantum solution (total cost): {q_solution_cost}")

```

```

Quantum solution (nodes order): [0, 2, 1, 3, 0]
Quantum solution (total cost): 213.0

```

Ура, получился тот же ответ, что и в SciPy/NetworkX. Значит самописный **VQE** работает правильно.

58.8 Заключение

В этой лекции попрактиковались в решение реальных задач при помощи алгоритма **VQE**.

Part XVII

D-Wave – квантовый отжиг и семплирование

CHAPTER
FIFTYNINE

О БЛОКЕ “D-WAVE – КВАНТОВЫЙ ОТЖИГ И СЕМПЛИРОВАНИЕ”

Этот блок посвящен квантовому отжигателю компании D-Wave и задачам, которые можно решать с его помощью.

D-WAVE: КВАНТОВЫЙ ОТЖИГ, ОПТИМИЗАЦИЯ И СЕМПЛИНГ

Автор(ы):

- Березутский Александр

60.1 Описание лекции

В этой лекции рассмотрим квантовый отжигатель компании D-Wave и задачи, которые можно решать с его помощью. Заострим основное внимание на физике и алгоритмах, нежели на hardware-реализации этого устройства. Эта лекция основана на [официальной документации D-Wave](#).

60.2 Введение в квантовый отжиг

На сегодняшний день, квантовый отжиг представляет собой отдельную модель квантовых вычислений, не связанную с так называемыми Gate-Model квантовыми вычислениями. Эта парадигма позволяет эффективно решать задачи комбинаторной оптимизации больших масштабов, представляющие большой интерес для многих областей науки и индустрии. Вкратце, в модели квантового отжига на физическую модель (коей является массив кубитов) отображаются параметры решаемой задачи, после чего кубиты адиабатически (достаточно медленно) переводятся в основное состояние, которое и кодирует в себе искомое решение. Давайте теперь разберем подробнее данный подход.

60.3 Задачи оптимизации и семплирования

Квантовый отжигатель (Quantum Annealing Processor) в силу своей физической реализации приводит к решениям, соответствующим низкоэнергетическим состояниям физической системы. В то время как задачи оптимизации (Optimization Problems) требуют глобального минимума энергии, иногда хватает и семплов из состояний, близких к основным. Такие задачи называются задачами семплирования (Probabilistic Sampling Problems).

Классическим примером задачи оптимизации в контексте квантового отжига является, например, [задача коммивояжера](#). Квантовая физика, в силу своей природы, может помочь решать такого рода задачи, так как они могут быть переформулированы в задачи дискретной минимизации энергии. Одно из основных правил физики состоит в том, что все физические системы стремятся к состояниям с минимальной энергией. Например, объекты скользят с холмов, горячие вещи со временем остывают и так далее. Этот принцип соблюдается и в мире квантовой физики. Квантовый отжиг просто использует квантовую физику для поиска низкоэнергетических состояний системы и, как следствие, оптимального или почти оптимального решения.

В свою очередь, задачи семплирования, часто являющиеся вычислительно сложными (например, задача семплирования из ограниченной машины Больцмана), идеально подходят к квантовым отжигателям в случае когда необходимо построить вероятностную модель, а доступ к полному вероятностному распределению состояний не представляется возможным. Такая постановка задачи подходит например, чтобы обучить модель генерировать изображения рукописных цифр из знаменитого датасета MNIST. По этой теме можно послушать [доклад Никиты Щуцкого “Quantum-Classical Neural Networks in Computational Drug Design”](#), сделанный в рамках трека ODS по квантовым вычислениям.

60.4 Квантовая физика под капотом

Как помним, квантовый гамильтониан является оператором, ставящим в соответствие собственным состояниям системы ее энергии. Множество собственных чисел гамильтониана называется его спектром. В квантовом отжигателе D-Wave гамильтониан имеет следующую форму:

$$\mathcal{H}_{Ising} = A(t) \cdot \underbrace{\left(- \sum_i \hat{\sigma}_x^{(i)} \right)}_{\text{Initial Hamiltonian}} + B(t) \cdot \underbrace{\left(\sum_i h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} + \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} \right)}_{\text{Final Hamiltonian}},$$

где $A(t)$, $B(t)$ являются функциями от времени $t \in [0, T]$, $\hat{\sigma}_{x,z}^{(i)}$ – операторами Паули, действующими на кубиты, а h_i и $J_{i,j}$ – локальными полями и взаимодействиями кубитов соответственно. Физически, вектор h соответствует внешнему магнитному полю, применимому к каждому кубиту. В свою очередь, матрица J отвечает за попарные ZZ взаимодействия кубитов. Функции $A(t)$, $B(t)$ должны быть такими, что $A(0) = B(T) = 1$, $A(T) = B(0) = 0$, то есть гамильтониан со временем полностью переходит из $\mathcal{H}_{Initial}$ в \mathcal{H}_{Final} . Вид этих функций называется расписанием отжига или annealing schedule.

Отметим также, что матрица взаимодействий кубитов $J_{i,j}$ ограничена графом взаимодействий кубитов, который обычно фиксирован. Для практического применения в коде детальное представление этого графа знать не нужно, но ознакомиться с ним можно на специально посвященной этому странице документации D-Wave.

Разберем подробно, что же представляет собой данный гамильтониан. Начальный гамильтониан $\mathcal{H}_{Initial}$ представляет собой гамильтониан с основным состоянием состоящим из суперпозиции 0 и 1. Этот гамильтониан в литературе также называется tunneling Hamiltonian. Финальный гамильтониан \mathcal{H}_{Final} , в свою очередь, является гамильтонианом задачи (его называют также Problem Hamiltonian), чье основное состояние и представляет собой решение, параметры которого находятся в матрице взаимодействий кубитов $J_{i,j}$ и векторе локальных полей h_i . Обратим внимание на тот факт, что \mathcal{H}_{Final} – полностью классический гамильтониан, он диагонален в вычислительном базисе (σ_z). Каждое собственное (классическое) состояние этого гамильтониана соответствует классической функции потерь для решаемой задачи.

Таким образом, в квантовом отжиге система инициализируется в основном состоянии начального гамильтониана – такое состояние легко приготовить экспериментально, то есть система легко переходит в основное состояние начального гамильтониана в силу его простоты. По мере самого отжига, исходя из [адиабатической теоремы](#), основное состояние начального гамильтониана переходит в основное состояние финального гамильтониана. Для наглядности, на графике ниже (взят из [этой](#) статьи) показано типичное поведение первых энергетических уровней гамильтониана. Основному состоянию соответствует кривая с наименьшей энергией.

Очень важно отметить, что для успеха данного алгоритма необходимо выполнение условий адиабатической теоремы:

1. минимальная энергетическая щель Δ_{min} (разница энергий основного и первого возбужденного состояний) не должна обращаться в 0 в любой момент времени;
2. функции $A(t)$ и $B(t)$ должны меняться достаточно медленно.

Можно показать, что второе условие может быть переформулировано в виде $T \gg \frac{1}{\Delta_{min}^2}$. Именно это неравенство ответственно за наибольшую проблему, с которой можно столкнуться при практической реализации данного

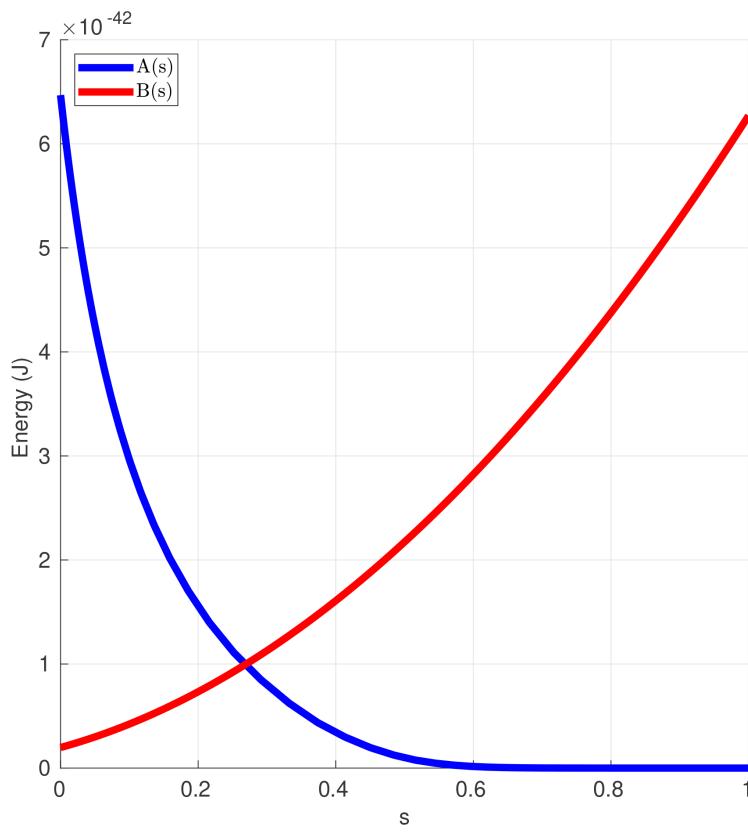


Fig. 60.1: Пример расписания отжига: функций $A(t)$, $B(t)$.

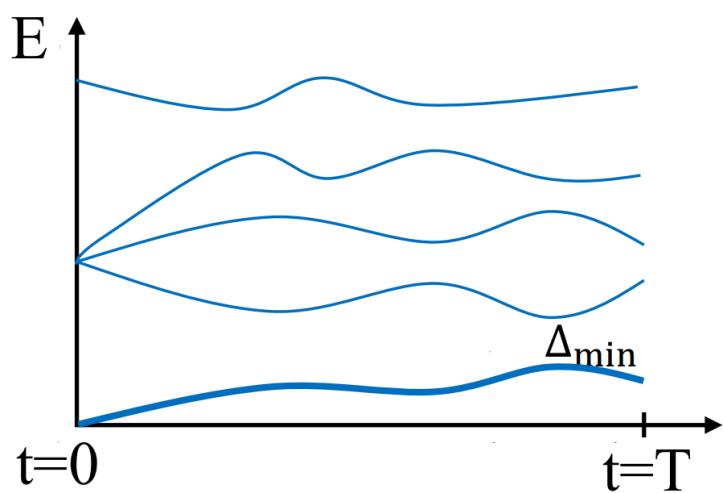


Fig. 60.2: Типичная зависимость от времени энергетических уровней гамильтонианов, используемых в квантовом отжиге

алгоритма. В частности, из него видно, что время алгоритма зависит от минимальной (за все время алгоритма) энергетической щели, которая не должна быть слишком маленькой, иначе время алгоритма станет слишком большим. Если же щель будет слишком большой (что соответствует быстрому отжигу), то система может перейти в возбужденное состояние. Однако, основные состояния начального и финального гамильтонианов являются, качественно, сильно разными. Основное состояние начального гамильтониана является тривиальным, в то время как основное состояние финального гамильтониана кодирует в себе решение сложной задачи оптимизации. Это наталкивает нас на мысль, что в течение процесса квантового отжига, система может пережить квантовый фазовый переход.

Для квантовых фазовых переходов первого рода известно, что $\Delta_{\min} \propto e^{-N}$, где N – количество кубитов, что приводит к $T \propto e^{2N}$, то есть экспоненциально большому времени алгоритма. В этом случае задача считается “сложной”, так как алгоритм не масштабируется.

В свою очередь, для квантовых фазовых переходов второго рода верно, что $\Delta_{\min} \propto N^{-l}$ ($l > 0$), что приводит к $T \propto N^{2l}$, то есть полиномиальному времени алгоритма и задача считается “простой”.

60.5 Пример: задача раскраски графа

Давайте теперь попробуем решить с помощью квантового отжига следующую задачу комбинаторной оптимизации – [задачу раскраски графа](#), или, как она называется в англоязычной литературе – *graph coloring problem*. В этой задаче необходимо с помощью заданного числа цветов присвоить цвет каждой вершине графа так, чтобы любые две вершины, имеющие общее ребро, имели разные цвета. Назовем граф $G = (E, V)$, где E – множество ребер, а V – множество вершин. Для наглядности, рассмотрим эту задачу в виде раскраски карты Канады четырьмя цветами – необходимо каждой канадской провинции (аналогу штата в США) присвоить цвет так, чтобы все граничащие провинции имели разные цвета. Этот пример находится также в [документации D-Wave](#). Визуально, решение этой задачи будет выглядеть как на следующем графике.

D-Wave предоставляют доступ к трем видам бэкендов: квантовому, классическому и гибридному. Так как курс посвящен квантовому машинному обучению, воспользуемся непосредственно квантовым отжигателем. Для этого необходимо получить токен, который генерируется в личном кабинете пользователя при регистрации в облачном сервисе D-Wave.

Импортируем нужные библиотеки.

```
import dwavebinarycsp
from dwave.system import DWaveSampler, EmbeddingComposite
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt
```

Отобразим задачу на графике, где провинции будут вершинами графа, а границы – его ребрами. Например (AB, BC) – ребро, соответствующее границе между провинциями Альберта и Британская Колумбия. Обозначения провинций представлены в таблице ниже.

код	provинция	код	provинция	код	provинция
AB	Alberta	BC	British Columbia	MB	Manitoba
NB	New Brunswick	NL	Newfoundland and Labrador	NS	Nova Scotia
NT	Northwest Territories	NU	Nunavut	ON	Ontario
PE	Prince Edward Island	QC	Quebec	SK	Saskatchewan
YT	Yukon				



Fig. 60.3: Раскрас карты Канады с помощью четырех цветов.

```

provinces = ["AB", "BC", "MB", "NB", "NL", "NS", "NT", "NU", "ON", "PE", "QC", "SK",
             →"YT"]
neighbors = [("AB", "BC"), ("AB", "NT"), ("AB", "SK"), ("BC", "NT"), ("BC", "YT"),
              ("MB", "NU"), ("MB", "ON"), ("MB", "SK"), ("NB", "NS"), ("NB", "QC"),
              ("NL", "QC"), ("NT", "NU"), ("NT", "SK"), ("NT", "YT"), ("ON", "QC")]

```

Чтобы “объяснить” отжигателю эту задачу, необходимо сформулировать ее в виде [задачи удовлетворения ограничений](#) (*Constraint Satisfaction Problem (CSP)*). В свою очередь, библиотеки D-Wave умеют отображать ее на модель Изинга. Математически, это выглядит следующим образом: каждой провинции (вершине графа) сопоставляется 4 бинарные переменные (каждая отвечает за один из четырех цветов) $x_i \in \{0, 1\}$, где одна из переменных “выбирает” цвет и переключается в состояние $x_i = 1$, как и остальные три переменные остаются в состоянии 0.

Теперь займемся ограничениями. Следующая функция выражает ограничение того, что соседние вершины в графе не могут быть одного и того же цвета. Область ее определения и значения – булевые переменные.

```

def not_both_1(v: bool, u: bool) -> bool:
    return not (v and u)

```

Зададим конфигурации цветов.

```

one_color_configurations = {(0, 0, 0, 1), (0, 0, 1, 0), (0, 1, 0, 0), (1, 0, 0, 0)}
colors = len(one_color_configurations)

```

Создадим объект класса CSP и зададим следующие ограничения:

- каждая провинция имеет лишь один цвет;
- каждая ей соседняя не может иметь такой же цвет.

```

csp = dwavebinarycsp.ConstraintSatisfactionProblem(dwavebinarycsp.BINARY)

for province in provinces:
    variables = [province+str(i) for i in range(colors)]
    csp.add_constraint(one_color_configurations, variables)

for neighbor in neighbors:
    v, u = neighbor
    for i in range(colors):
        variables = [v+str(i), u+str(i)]
        csp.add_constraint(not_both_1, variables)

```

Конвертируем модель из CSP в BQM (Binary Quadratic Model) – бинарную квадратичную модель. Это модель Изинга, в которой значения спинов $\sigma_i = 0.5 * (x_i + 1)$. Таким образом, каждая провинция Канады и ее цвет будет кодироваться четырьмя спинами, один из которых направлен вверх (вниз), пока остальные направлены вниз (вверх).

```
bqm = dwavebinarycsp.stitch(csp)
```

Создадим семплер, передав в него API Token, создав прежде переменное окружение DWAVE_TOKEN, к примеру, в терминале посредством `export DWAVE_TOKEN=insert_api_token`:

```

import os

base_sampler = DWaveSampler(token=os.environ["DWAVE_TOKEN"])

```

Дадим задание квантовому сэмплеру на 1000.

```
sampler = EmbeddingComposite(base_sampler)
sampleset = sampler.sample(bqm, num_reads=1000, label="Canada Map Coloring")
```

Проверим, что было найдено решение задачи,

```
sample = sampleset.first.sample
if not csp.check(sample):
    print("Failed to color map. Try sampling again.")
else:
    print(sample)
```

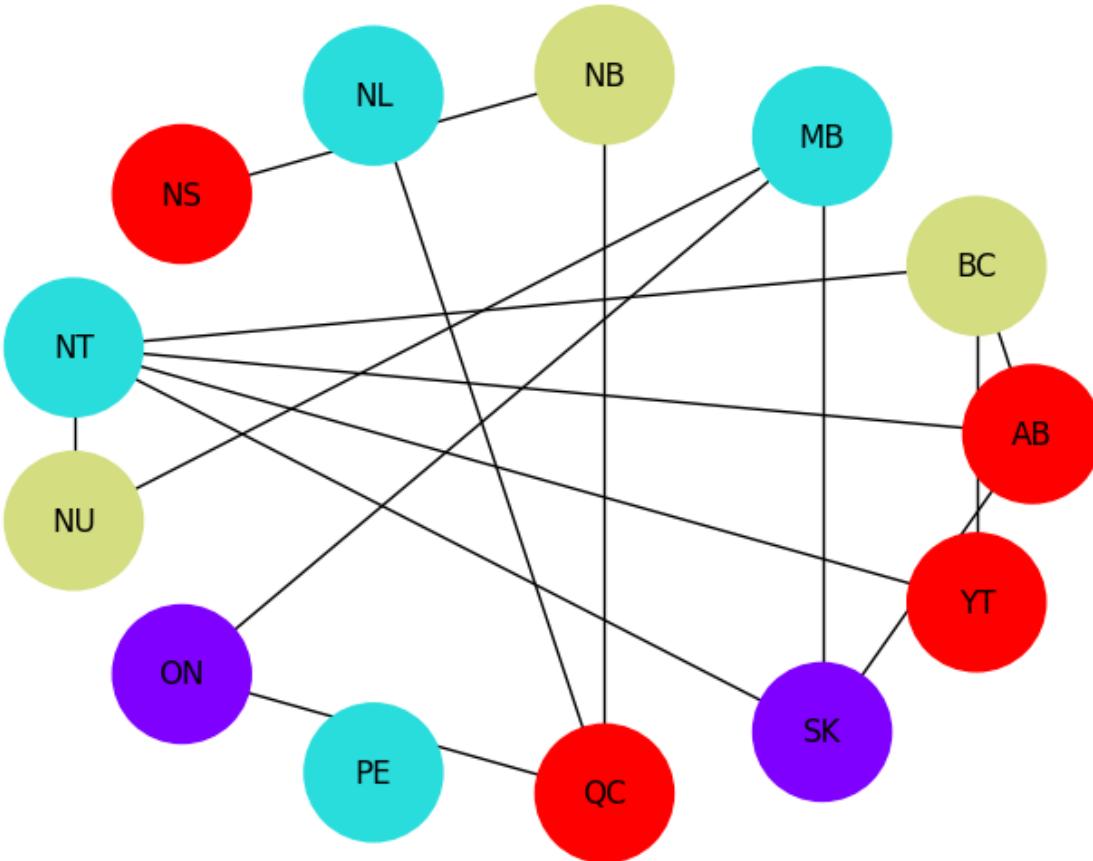
```
{'AB0': 0, 'AB1': 0, 'AB2': 0, 'AB3': 1, 'BC0': 0, 'BC1': 0, 'BC2': 1, 'BC3': 0,
 ↪'MB0': 0, 'MB1': 1, 'MB2': 0, 'MB3': 0, 'NB0': 0, 'NB1': 0, 'NB2': 1, 'NB3': 0,
 ↪'NL0': 0, 'NL1': 1, 'NL2': 0, 'NL3': 0, 'NS0': 0, 'NS1': 0, 'NS2': 0, 'NS3': 1,
 ↪'NT0': 0, 'NT1': 1, 'NT2': 0, 'NT3': 0, 'NU0': 0, 'NU1': 0, 'NU2': 1, 'NU3': 0,
 ↪'ON0': 1, 'ON1': 0, 'ON2': 0, 'ON3': 0, 'PE0': 0, 'PE1': 1, 'PE2': 0, 'PE3': 0,
 ↪'QC0': 0, 'QC1': 0, 'QC2': 0, 'QC3': 1, 'SK0': 1, 'SK1': 0, 'SK2': 0, 'SK3': 0,
 ↪'YT0': 0, 'YT1': 0, 'YT2': 0, 'YT3': 1}
```

Мы получили словарь sample, который будет выглядеть следующим образом: его ключи будут кодировать провинцию и цвет, а значения – бинарные переменные, означающие раскрашена ли провинция этим цветом. Этот словарь – сэмпл из состояния, полученного при решении данной задачи методом квантового отжига. Построим визуализацию решения в виде графа с раскрашенными вершинами.

```
from typing import List
from typing import Tuple
from typing import Dict

def plot_map(sample: Dict[str, bool], provinces: List[str], neighbors:_
↪List[Tuple[str]]) -> None:
    G = nx.Graph()
    G.add_nodes_from(provinces)
    G.add_edges_from(neighbors)
    color_map = {}
    for province in provinces:
        for i in range(colors):
            if sample[province+str(i)]:
                color_map[province] = i
    node_colors = [color_map.get(node) for node in G.nodes()]
    nx.draw_circular(G, with_labels=True, node_color=node_colors, node_size=3000,_
↪cmap=plt.cm.rainbow)
    plt.show()

plot_map(sample, provinces, neighbors)
```



После запуска функции `plot_map`, получим изображение графа, в котором вершины будут соответствовать провинциям и цветам, а ребра – границам между провинциями. Вы можете сами убедиться, что ни одна провинция не будет иметь такой же цвет, как и ее сосед. Также отметим, что такая задача может иметь не одно решение, поэтому не нужно ожидать, что график будет получаться всегда одним и тем же.

Таким образом, сумели решить задачу раскраски графа с помощью квантового отжигателя.

60.6 Пример: задача электронной структуры молекулы

Поскольку в курсе также имеем дело с задачами квантовой химии, давайте разберем соответствующий пример из [TKTD20]. В данной статье авторы осуществляют точную диагонализацию физического гамильтониана с помощью квантового отжигателя D-Wave. Этот подход они называют QAE – Quantum Annealing Eigen-solver. Разберем эту статью гораздо менее подробно, чем предыдущую задачу.

Основная проблема применения квантового отжига в квантовой химии – найти отображение гамильтониана электронной структуры молекулы на гамильтониан Изинга (вспомним \mathcal{H}_{Final} из теории квантового отжига, описанной в начале этой лекции). Обычно такие отображения начинаются с записи электронного гамильтониана в [формализме вторичного квантования](#), а затем используют преобразования Жордана-Вигнера (Jordan-Wigner transformation) или Бравого-Китаева (Bravyi-Kitaev transformation). Минусы такого подхода заключаются в том, что:

- растет число кубитов, необходимое для описания системы на языке (напомним, классического, а значит – диагонального) гамильтониана Изинга
- в гамильтониане появляются элементы вне диагонали (благодаря членам содержащим σ^x, σ^y).

Подход авторов к задаче состоит из двух частей. Первый шаг состоит из составления электронного гамильтониана в базисе слетеровских детерминантов, которые в свою очередь составлены из одноэлектронных самосогласованных орбиталей Хартри-Фока.

В свою очередь, второй этап состоит из нахождения первых нескольких собственных векторов (волновых функций) и собственных значений (соответствующих энергий) этого гамильтониана. Под капотом, задача нахождения собственных значений и собственных векторов отображается на задачу квантового отжига. Это самая хитрая часть алгоритма. Это отображение построено на минимизации отношения Рэлея (Rayleigh-Ritz quotient, RRQ) $R_{\mathcal{H}} = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$, где \mathcal{H} – электронный гамильтониан, а ψ – волновая функция. Соответствующая минимальному R волновая функция кодируется в бинарный вектор с помощью power-of-two scheme. Подробней про это можно почитать в статьях, на которые ссылается оригинальная работа. Примечательно, что метод минимизации отношения Рэлея соответствует вариационному методу в квантовой химии.

На следующей схеме (взята из оригинальной работы) изображен алгоритм QAE в общем виде. В нашей терминологии, A соответствует \mathcal{H} , $v - \psi$. $F(v) = \langle v, Av \rangle + \lambda \cdot \langle v, v \rangle$ – функция потерь в формате QUBO – Quantum Unconstrained Binary Optimization (функция потерь на языке QUBO получается, если в функции потерь на языке модели Изинга, каждую спиновую переменную $\sigma_i \in \{-1, 1\}$ преобразовать по закону $x_i = (\sigma_i + 1)/2$, $\sigma_i \in \{0, 1\}$), с классическим множителем лагранжа λ .

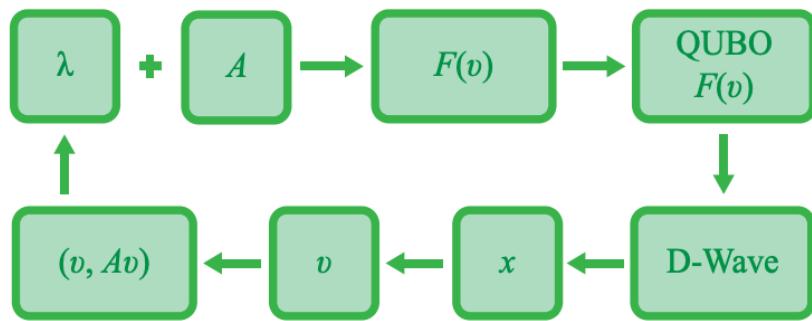


Fig. 60.4: Схема алгоритма QAE.

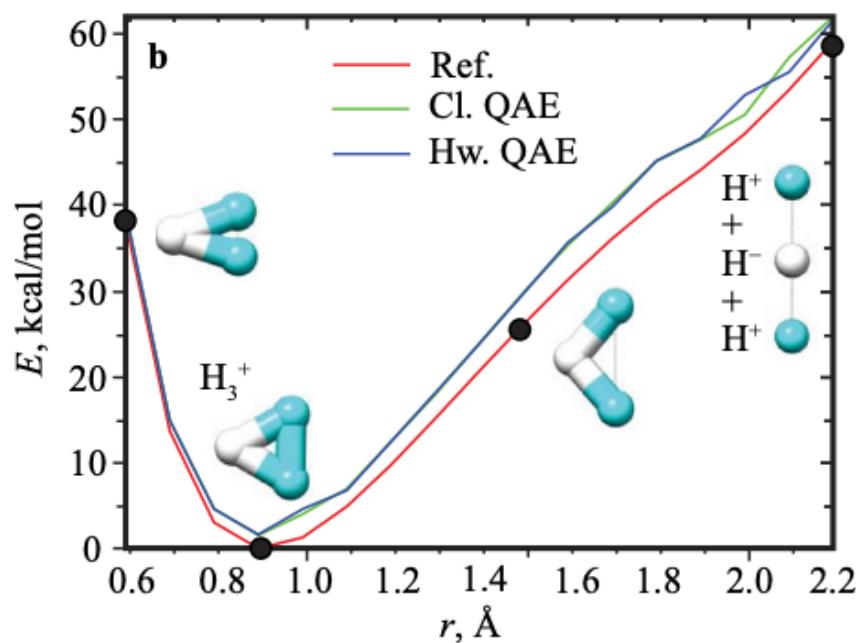


Fig. 60.5: Результаты алгоритма на примере молекулы H_3^+ .

СРАВНЕНИЕ КВАНТОВОЙ И КЛАССИЧЕСКОЙ ИМИТАЦИИ ОТЖИГА

Автор(ы):

- Бурдейный Дмитрий

61.1 Описание лекции

В этой лекции рассмотрим каноническую работу **Quantum annealing in the transverse Ising model**, опубликованную в 1998 году [KN98]. В ней двумя способами численно решается задача о нахождении основного состояния системы взаимодействующих спинов. Первый способ – обычная классическая имитация отжига, второй – имитация квантового отжига. Результаты применения этих подходов анализируются и сравниваются между собой.

61.2 Постановка задачи

Итак, рассматривается одномерная система взаимодействующих спинов, которая описывается гамильтонианом Изинга (полностью аналогичным тому, который был представлен в *базовой лекции* о модели Изинга):

$$\hat{H}_0 = - \sum_{i,j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - h \sum_i \hat{\sigma}_i^z,$$

где J_{ij} – величины обменного взаимодействия для пар спинов, h – внешнее поле (оно направлено вдоль оси z и потому называется продольным – *longitudinal*). Требуется найти основное состояние гамильтониана \hat{H}_0 , т.е. его собственное состояние, соответствующее его минимальному собственному значению.

Далее разберем численное решение этой задачи с помощью обычной классической имитации отжига (*simulated annealing*, SA для краткости) и с помощью квантовой имитации отжига (*quantum annealing* – QA).

61.3 Имитация квантового отжига (QA)

Как в *предыдущей лекции* об аннилере D-Wave, добавляем к “целевому” гамильтониану \hat{H}_0 (*problem Hamiltonian*) слагаемое, которое называется *tunneling Hamiltonian*:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 - \Gamma(t) \sum_i \hat{\sigma}_i^x = \hat{H}_0 + \hat{H}_{tun}(t), \quad (61.1)$$

где $\hat{H}_{tun}(t)$ зависит от времени и отвечает за квантовомеханическое туннелирование между различными собственными состояниями гамильтониана \hat{H}_0 . Оператор $\hat{H}_{tun}(t)$ соответствует приложенному внешнему магнитному полю вдоль оси x (т.е. поперечному, *transverse*). Когда величина $\Gamma(t)$ очень велика по сравнению с J_{ij} и h , собственное состояние гамильтониана $\hat{H}(t)$, соответствующее его минимальному собственному значению, представляет собой линейную комбинацию всевозможных состояний системы с приблизительно равными амплитудами вероятностей ориентации каждого спина вверх и вниз. Если достаточно медленно уменьшать $\Gamma(t)$ с очень большой величины до нуля, можно надеяться (в соответствии с адиабатической теоремой), что приведем систему в основное состояние гамильтониана \hat{H}_0 .

В обсуждаемой статье в качестве примеров рассматриваются три различных закона изменения $\Gamma(t)$:

- $\Gamma(t) = \frac{c}{\ln(t+1)}$,
- $\Gamma(t) = \frac{c}{\sqrt{t}}$,
- $\Gamma(t) = \frac{c}{t}$,

везде $t \in (0, +\infty)$ и $c = \text{const.}$

Квантовая динамика системы описывается нестационарным уравнением Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H}(t) \psi(t) \quad (61.2)$$

Это уравнение решается численно (с помощью дискретизации по времени и применения конечно-разностной схемы) для небольшой системы (число спинов $N = 8$). Измерить близость состояния $\psi(t)$ к основному состоянию g гамильтониана \hat{H}_0 можно путем вычисления вероятности

$$P_{QA}(t) = |g|\psi(t)|^2$$

Note

Основное состояние g для небольшого числа спинов можно найти точно, например, путем полного перебора.

Кроме того, можно рассмотреть так называемое *квазистатическое приближение*. Выберем какое-нибудь значение $\Gamma = \text{const}$ и решим задачу об основном состоянии ψ_Γ независящего от времени гамильтониана

$$\hat{H}_0 - \Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

Следует ожидать, что при очень медленном изменении $\Gamma(t)$ вероятность

$$P_{QA}^{st}(\Gamma) = |g|\psi_\Gamma|^2$$

будет близка к $P_{QA}(t)$ (имеется в виду, что значение Γ соответствует значению $\Gamma(t)$). Отличие $P_{QA}(t)$ от $P_{QA}^{st}(\Gamma)$ говорит о том, насколько близко состояния системы при динамическом процессе отжига следуют за соответствующими “квазистатическими” состояниями.

61.4 Классическая имитация отжига (SA)

В лекции, посвященной комбинаторной оптимизации, процесс имитации отжига описывался таким образом: выбиралось случайное начальное состояние, затем оно в цикле подвергалось случайной модификации, и новое состояние принималось или отклонялось в соответствии с некоторым критерием. В статье [KN98] принят другой подход к SA. Рассматривается так называемое *основное кинетическое уравнение* (англ. *master equation*). Оно описывает классический SA процесс, соответствующий нестационарному уравнению Шредингера (??). В

нашем случае это система обыкновенных дифференциальных уравнений для вероятностей нахождения системы в различных состояниях i в момент времени t :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_j \mathcal{L}_{ij} P_j(t), \quad (61.3)$$

где \mathcal{L}_{ij} – вероятность перехода системы из состояния j в состояние i (при $j \neq i$) в единицу времени. Рассматриваются только элементарные переходы, сопровождающиеся изменением ориентации какого-либо одного спина (остальные спины при данном переходе не меняют ориентацию). Элементы матрицы переходов записываются следующим образом:

$$\mathcal{L}_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_j}{T(t)}\right)} & (\text{single-spin transition, } j \neq i) \\ -\sum_{k \neq i} \mathcal{L}_{ki} & (j = i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (61.4)$$

Для первого условия правая часть в формуле (??) соответствует распределению Больцмана. Для понимания полезно проанализировать несколько предельных случаев:

- если $E_i < E_j$ и $|E_i - E_j| \gg T(t)$, то вероятность перехода $j \rightarrow i$ близка к 1;
- если $E_i > E_j$ и $E_i - E_j \gg T(t)$, то вероятность перехода $j \rightarrow i$ близка к 0;
- если $|E_i - E_j| \ll T(t)$, то вероятность перехода $j \rightarrow i$ близка к $1/2$.

Все случаи соответствуют интуитивным ожиданиям.

Во втором условии в (??) сама сумма (без знака “минус”) равна суммарной вероятности перехода из состояния i во все остальные состояния. Так что эта сумма должна входить со знаком “минус” в выражение $\frac{dP_i(t)}{dt}$ для темпа изменения вероятности P_i нахождения в состоянии i .

Третье условие в (??) означает, что рассматриваем только перевороты одиночных спинов (*single-spin flip*) в качестве допустимых переходов между состояниями системы.

Зависимость температуры от времени выбирается равной $\Gamma(t)$:

$$T(t) = \Gamma(t)$$

Близость решения задачи SA к основному состоянию g гамильтониана \hat{H}_0 выражается величиной вероятности $P_g(t)$ найти систему в основном состоянии в момент времени t :

$$P_{SA}(t) = P_g(t)$$

Аналогично квантовому случаю, введем величину $P_{SA}^{st}(T)$, которая в квазистатическом приближении близка к $P_{SA}(t)$ (если величина температуры $T = T(t)$).

61.5 Анализ и сравнение результатов

В статье обсуждаются численные результаты для P_{SA} и P_{QA} для различных конфигураций обменного взаимодействия и различных вариантов зависимости поперечного поля от времени. В всех случаях продольное внешнее поле выбрано постоянным: $h = 0.1$.

61.5.1 Ферромагнитная модель

Здесь проводится численный эксперимент для ферромагнитной модели Изинга с $J_{ij} = \text{const}$ для всех пар спинов. Зависимости T и Γ от времени выбираются такими:

$$\Gamma(t) = T(t) = \frac{3}{\ln(t+1)}$$

Результаты представлены на Fig. ??.

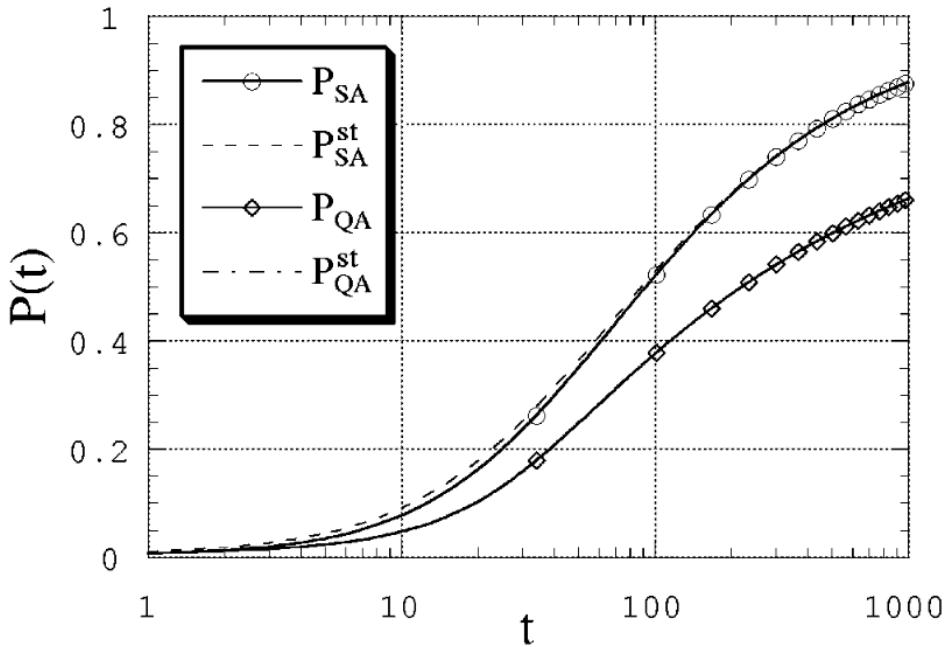


Fig. 61.1: Зависимости $P_{SA}(t)$, $P_{QA}(t)$, $P_{SA}^{st}(T(t))$ и $P_{QA}^{st}(\Gamma(t))$ для ферромагнитной модели при $\Gamma(t) = T(t) = 3/\ln(t+1)$.

Видно, что квазистатическое приближение работает очень хорошо, интересующие нас величины в динамическом процессе очень близки к вычисленным в равновесных условиях. Когда расписание отжига имеет вид $T(t) = c/\ln(t+1)$, гарантируется сходимость $P_{SA} \rightarrow 1$ при подходящем выборе константы c (в статье [KN98] есть ссылка на соответствующую теорему). Выбор константы $c = 3$ достаточно произволен, но высокая точность приближенного равенства $P_{SA}(t) \approx P_{SA}^{st}(T(t))$ свидетельствует о том, что в рассматриваемом случае действительно $P_{SA} \rightarrow 1$ при $t \rightarrow +\infty$.

Для QA нет аналогичного точного утверждения о сходимости $P_{QA} \rightarrow 1$, но численные результаты для данного ферромагнитного случая при $\Gamma(t) = 3/\ln(t+1)$ позволяют предположить такую сходимость.

Тот факт, что QA-кривая на Fig. ?? всегда ниже SA-кривой, никакого значения не имеет, потому что в обеих задачах у нас все величины обезразмерены ($\hbar = 1$ в (??) и единица времени $\tau = 1$ в (??)) и никакого согласования при обезразмеривании в двух задачах нет.

Если уменьшать поперечное поле и температуру быстрее,

$$\Gamma(t) = T(t) = \frac{3}{\sqrt{t}},$$

то возникает качественное отличие QA и SA решений, см. Fig. ??.

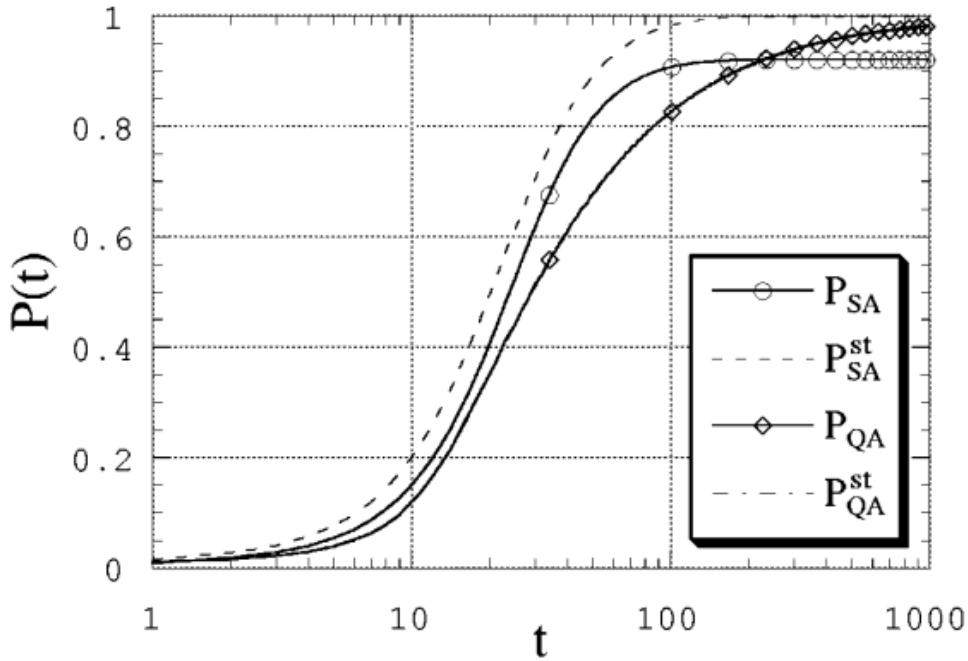


Fig. 61.2: Вид коэффициентов перекрытия для ферромагнитной модели при $\Gamma(t) = T(t) = 3/\sqrt{t}$.

Видно, что решение квантовомеханической задачи лучше сходится к основному состоянию, чем решение классической задачи. Более того, SA-решение “застревает” в каком-то локальном минимуме с не очень малой вероятностью. На Fig. ?? виден темп приближения P_{QA} к 1 (на графике двойная логарифмическая шкала). Можно сделать вывод, что $(1 - P_{QA}) \propto 1/t$ в широком диапазоне t .

Если еще быстрее уменьшать поперечное поле и температуру,

$$\Gamma(t) = T(t) = \frac{3}{t},$$

то оба решения “застревают” в неосновных состояниях, как видно из Fig. ??.

61.5.2 Фruстрированная модель

Здесь анализируется так называемая фрустрированная (*frustrated*) система, она изображена на Fig. ??.

Сплошные линии обозначают ферромагнитное взаимодействие между спинами, пунктирная линия – антиферромагнитное взаимодействие (сила которого по абсолютной величине равна силе ферромагнитного взаимодействия). Если в SA-задаче температура очень велика, то спины 4 и 5 меняют свою ориентацию с очень высокой частотой, так что взаимодействие спинов 3 и 6 посредством спинов 4 и 5 пренебрежимо мало. В этом случае прямое антиферромагнитное взаимодействие между спинами 3 и 6 оказывается доминирующим, поэтому наблюдается отрицательная корреляция между ориентациями спинов 3 и 6 (см. Fig. ??).

С другой стороны, при низкой температуре спины 4 и 5 стремятся принять определенную устойчивую ориентацию. В этом случае эффективное (непрямое) ферромагнитное взаимодействие между спинами 3 и 6 посредством спинов 4 и 5 примерно вдвое сильнее, чем прямое антиферромагнитное взаимодействие. Эти рассуждения подтверждаются положительной величиной корреляции $\sigma_3^z \sigma_{6c}^z$ при низких температурах (Fig. ??). Значит, спины 3 и 6 должны поменять взаимную ориентацию при некоторой промежуточной температуре.

Если поперечное поле в QA-задаче играет роль, аналогичную роли температуры в SA-задаче, то следует ожидать схожего поведения величины корреляции $\sigma_3^z \sigma_{6q}^z$ при изменении Γ . Здесь наблюдаемая $\sigma_3^z \sigma_{6q}^z$ вычисляется с

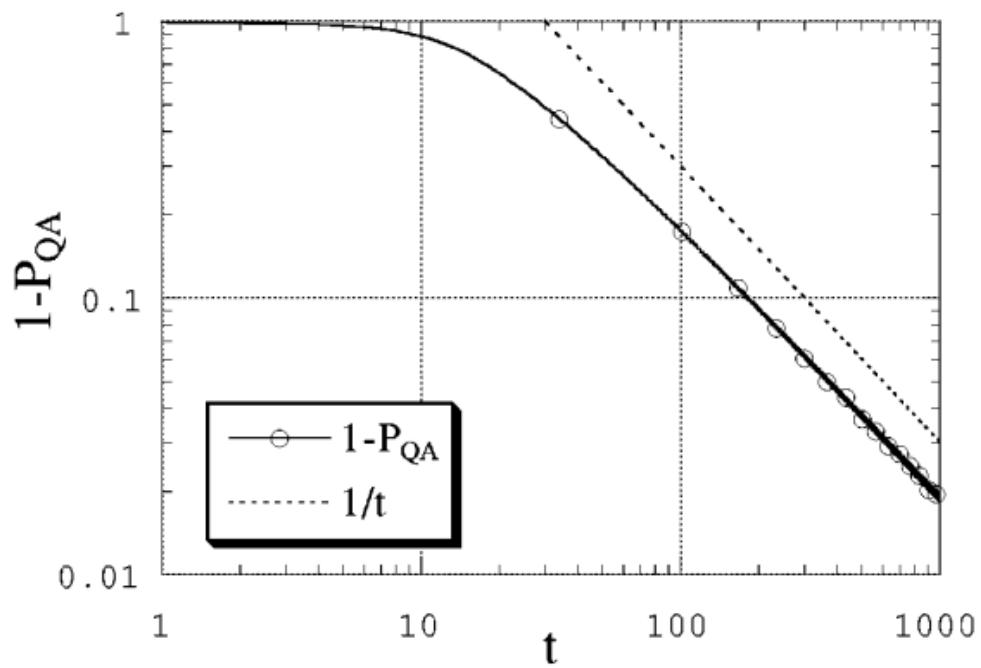


Fig. 61.3: $(1 - P_{QA}(t))$ для ферромагнитной модели при $\Gamma(t) = 3/\sqrt{t}$.

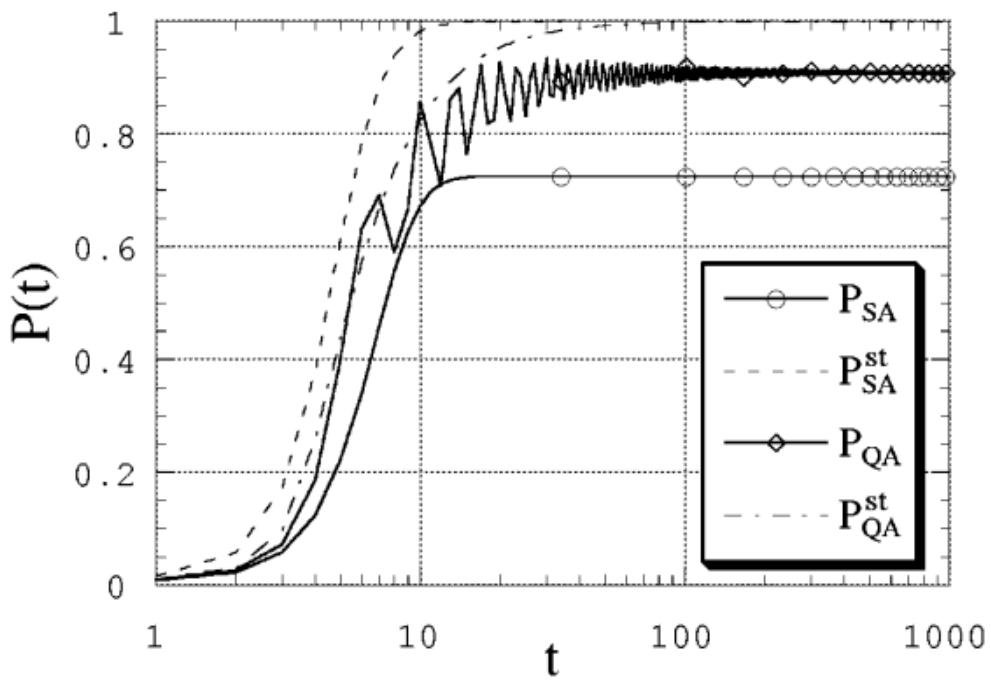


Fig. 61.4: Вид коэффициентов перекрытия для ферромагнитной модели при $\Gamma(t) = T(t) = 3/t$.

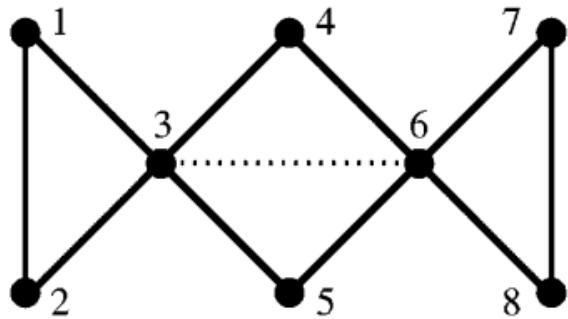


Fig. 61.5: Фruстрированная система спинов.

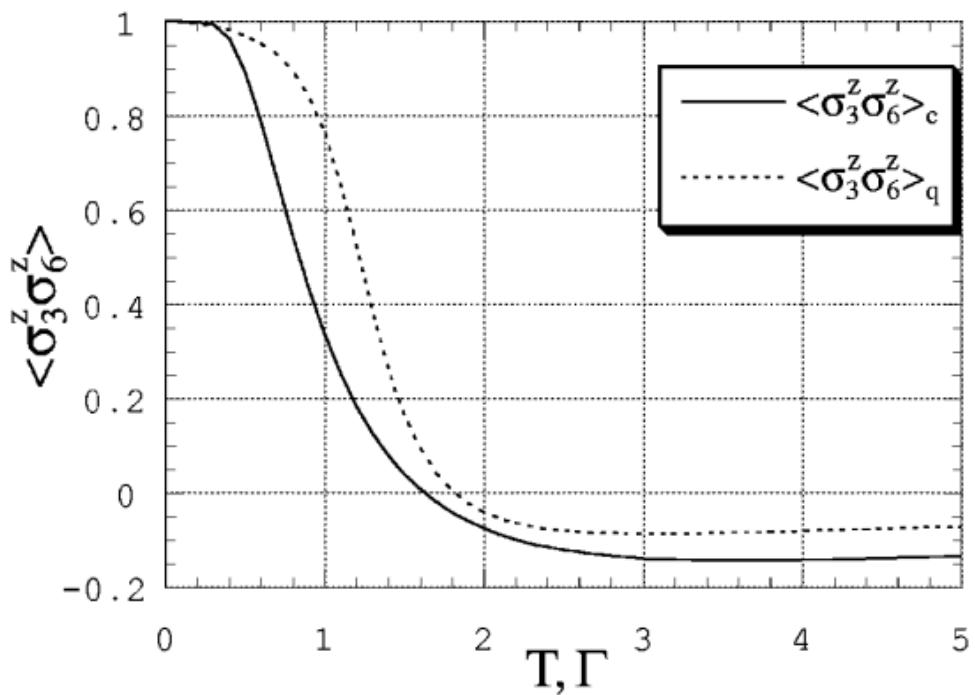


Fig. 61.6: Величина корреляции спинов 3 и 6. Индекс с означает классическое решение (SA), индекс q означает квантовомеханическое решение (QA).

использованием основного состояния гамильтониана (??) при заданной Γ . Так и есть (см. пунктирную кривую на Fig. ??).

Если использовать расписание отжига

$$\Gamma(t) = T(t) = \frac{3}{\sqrt{t}},$$

то получаются результаты, изображенные на Fig. ??.

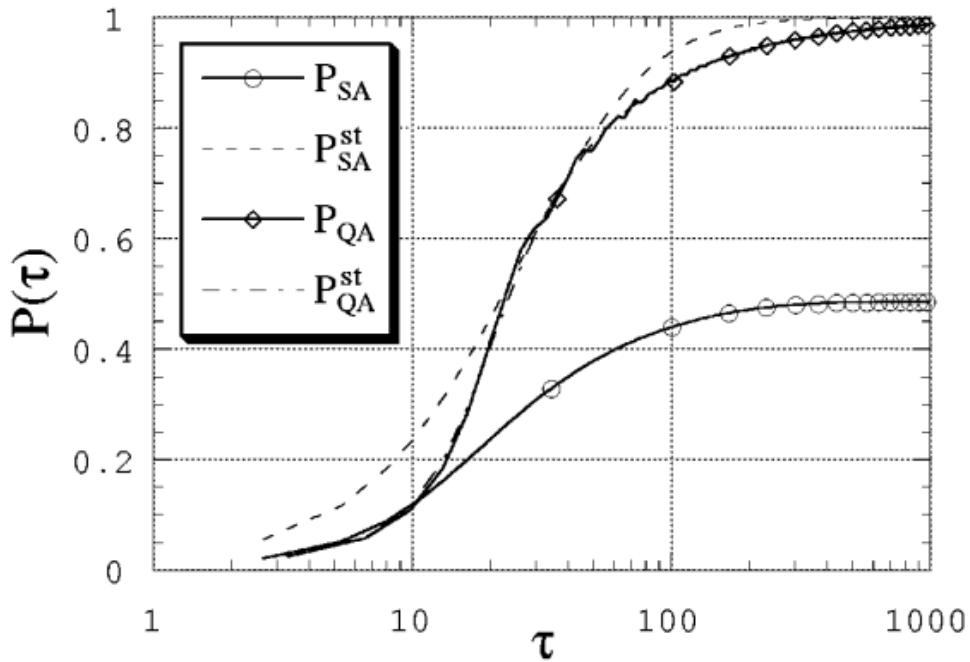


Fig. 61.7: Вид коэффициентов перекрытия для фрустрированной модели при $\Gamma(t) = T(t) = 3/\sqrt{t}$.

Образмеренное время $\tau = tT_c^2$ для SA-задачи и $\tau = t\Gamma_c^2$ для QA-задачи. Здесь T_c и Γ_c – критические величины, при которых $\sigma_3^z\sigma_{6_c}^z$ и $\sigma_3^z\sigma_{6_q}^z$ переходят через ноль на графике Fig. ???. Видно, что квантовый отжиг лучше подходит для поиска основного состояния в такой системе.

61.5.3 Модель со случайными взаимодействиями

Последний рассмотренный пример – это модель спинового стекла, предложенная Шеррингтоном и Киркпатриком [SK75]. Для всех пар спинов есть взаимодействие, сила которого является случайной величиной и семплируется из гауссова распределения с нулевым средним и с дисперсией $1/N$ (в нашем случае $N = 8$). На Fig. ?? показан типичный результат для эволюции коэффициентов перекрытия во времени при расписании отжига $\Gamma(t) = T(t) = 3/\sqrt{t}$.

Было проверено несколько реализаций для коэффициентов обменного взаимодействия (семплирование выполнялось из одной и той же функции распределения), результаты оказались качественно близкими. Графики на Fig. ?? подтверждают, что для данной оптимизационной задачи квантовый отжиг подходит лучше, чем классический.

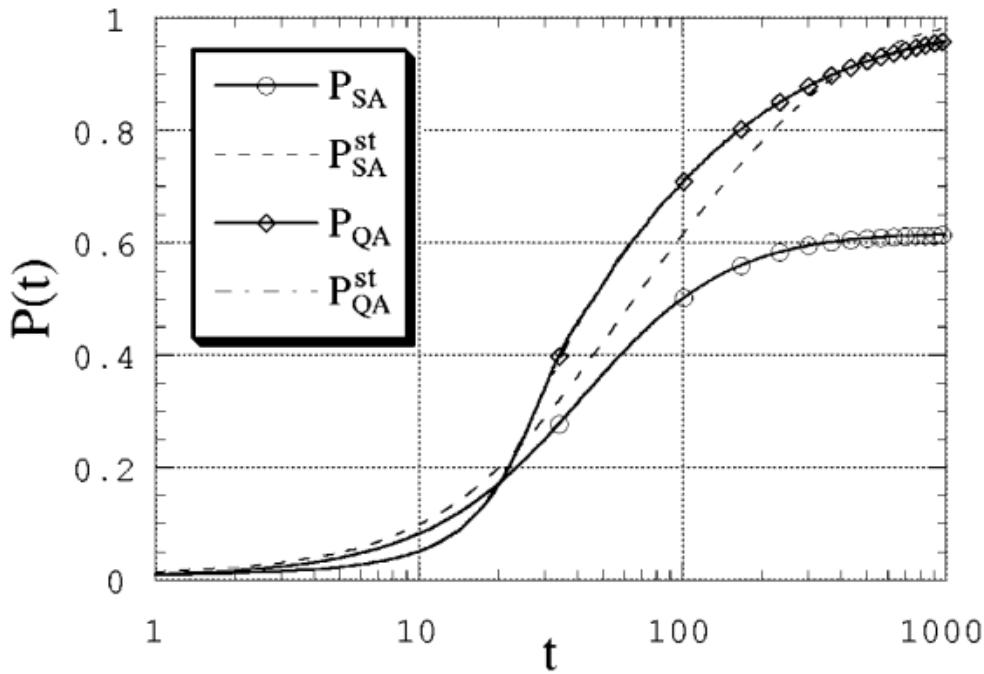


Fig. 61.8: Вид коэффициентов перекрытия для модели Шеррингтона-Киркпатрика при $\Gamma(t) = T(t) = 3/\sqrt{t}$.

61.6 Заключение

В этой лекции рассказали о канонической работе, в которой для модели Изинга рассмотрены классическая имитация отжига и квантовая имитация отжига, выполнен анализ и сравнение свойств решений в рамках этих двух подходов на нескольких примерах. Выяснилось, что:

- при одном и том же расписании отжига квантовый отжиг дает сходимость к основному состоянию с большей вероятностью, чем классический отжиг;
- для квантового случая система сходится к основному состоянию при расписании отжига $\Gamma = c/\sqrt{t}$, но не при более быстром уменьшении поперечного поля;
- для ферромагнитной модели при квантовом отжиге вероятность получения основного состояния ведет себя приближенно как $(1 - \frac{\text{const}}{t})$ на больших временах t .

Part XVIII

QAOA

CHAPTER
SIXTYTWO

О БЛОКЕ “QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM”

В этом блоке узнаете об алгоритме квантовой приближенной оптимизации.

QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM

Автор(ы):

- Решетова Карина
- Синченко Семен
- Березутский Александр

63.1 Введение

В лекции рассматривается еще один алгоритм для приближенного решения *NP-задач комбинаторной оптимизации*, который называется **Quantum Approximate Optimization Algorithm** (далее **QAOA**) [FGG14].

63.1.1 Квантовый отжиг (повторение)

В прошлых лекциях активно рассказывалось о квантовых аннилерах (*отжигателях*, англ. *annealers*) – аналоговых устройствах, реализующих поиск основного состояния системы. Выпишем еще раз **гамильтониан**, который там используется:

$$\mathcal{H}_{Ising} = \underbrace{-A(t) \left(\sum_i \hat{\sigma}_x^{(i)} \right)}_{\text{Initial Hamiltonian}} + \underbrace{B(t) \left(\sum_i h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} + \sum_{i,j} J_{i,j} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} \right)}_{\text{Final Hamiltonian}},$$

В процессе квантового отжига плавно меняются параметры A и B :

В той же лекции о D-Wave указывалась главная проблема – риск перехода системы из основного состояния в возбужденное при недостаточно медленном изменении параметров A и B :

Таким образом, большой проблемой для нас является выбор правильного “расписания” отжига, то есть зависимостей $A(t)$ и $B(t)$.

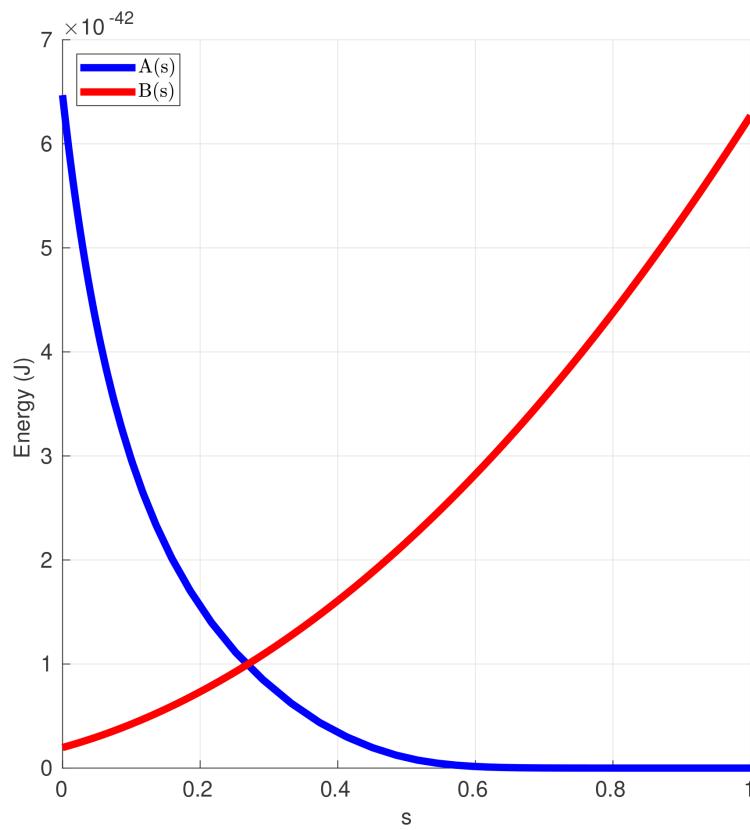


Fig. 63.1: Пример расписания отжига: функций $A(t)$, $B(t)$.

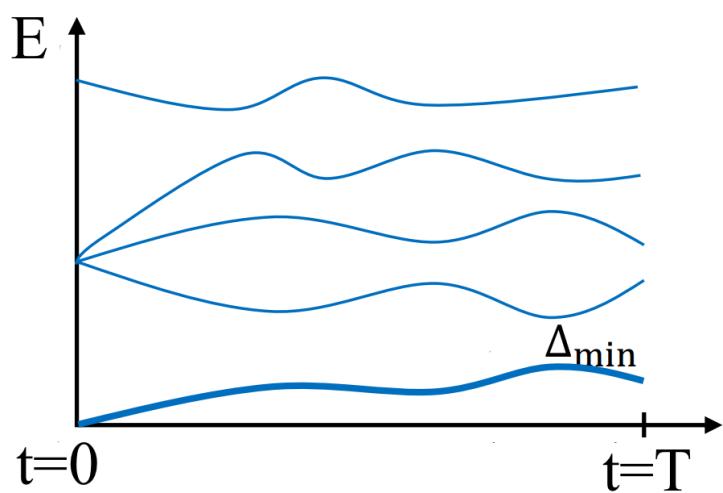


Fig. 63.2: Типичная зависимость от времени энергетических уровней гамильтонианов, используемых в квантовом отжиге

63.1.2 От железа к симуляции

У отжига “в железе” есть существенная проблема – трудно правильным образом подбирать расписание отжига. Но есть и другая идея! Изначально квантовые компьютеры создавались для симуляции квантовой динамики. Воспользуемся техникой симуляции, которая называется *trotterization*.

63.1.3 Trotterization и симуляция аннилера

В данном случае наша цель – получить выражение для финального состояния Ψ , которое будет отвечать решению квантового отжигателя. Финальное состояние есть решение уравнения Шредингера:

$$\Psi(t) = e^{-i\mathcal{H}_{Ising}(t)t} \Psi(0) = e^{-i(A(t)\mathcal{H}_{initial} + B(t)\mathcal{H}_{cost})t} \Psi(0),$$

где $\mathcal{H}_{initial}$ – это *tunneling* или начальный гамильтониан, а \mathcal{H}_{cost} – это так называемый *problem* или *cost* гамильтониан, который отвечает задаче. Подробно эти темы обсуждались в лекции о *D-Wave*. Для тех, кто сейчас ничего не понял, рекомендуется также вернуться к лекции о *переходе от комбинаторных задач к гамильтонианам*, чтобы понять, как получается *cost* гамильтониан.

Note: Уравнение Шредингера практически не решается численно для сколько-нибудь больших задач, поэтому мы примем как факт то, что точно посчитать квантовую динамику аннилера у нас не выйдет, тем более не выйдет как-то пытаться оптимизировать

Для решения проблемы “нерешаемости” уравнения Шредингера перейдем от непрерывного времени t и зависимостей $A(t)$ и $B(t)$ к N дискретных моментов времени t_1, t_2, \dots, t_n . Тогда можно заменить расписание отжига в виде непрерывных коэффициентов на набор дискретных коэффициентов, каждый из которых отвечает своему моменту времени:

$$\begin{aligned} A(t) &\rightarrow \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N \\ B(t) &\rightarrow \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N \end{aligned}$$

Финальное состояние записывается так:

$$\Psi(t) = e^{-i\gamma_1\mathcal{H}_{initial}} e^{-i\beta_1\mathcal{H}_{cost}} \dots e^{-i\gamma_N\mathcal{H}_{initial}} e^{-i\beta_N\mathcal{H}_{cost}} \Psi(0)$$

63.1.4 Оптимизация расписания

Теперь задача оптимизации расписания по своей сути сведена к следующей:

$$\begin{aligned} \arg \min_{\gamma_1, \dots, \gamma_N, \beta_1, \dots, \beta_N} & \Psi_{final} | \mathcal{H}_{cost} | \Psi_{final} \\ \Psi_{final} &= e^{-i\gamma_1\mathcal{H}_{initial}} e^{-i\beta_1\mathcal{H}_{cost}} \dots e^{-i\gamma_N\mathcal{H}_{initial}} e^{-i\beta_N\mathcal{H}_{cost}} \Psi(0) \end{aligned}$$

А это уже хорошо знакомая задача оптимизации результата измерения состояния, заданного при помощи некоторой *VQC*, которая параметризована набором действительных чисел $\gamma_1, \dots, \gamma_N, \beta_1, \dots, \beta_N$. И эта задача решается хорошо уже знакомыми *градиентными методами*.

63.2 Пример задачи оптимизации

Рассмотрим задачу оптимизации n -разрядного набора данных, для которого нужно найти некоторый минимум (или максимум). Алгоритм задается двумя гамильтонианами H_p и H_M , а также $2p$ параметрами: $\gamma_1, \dots, \gamma_p$ и β_1, \dots, β_p .

QAOA использует унитарный оператор $U(\beta, \gamma)$, принимающий на вход вещественные параметры β , γ , и описывается уже знакомым квантовым состоянием Ψ . Цель поиска – найти те самые оптимальные β_{opt} и γ_{opt} .

Оператор U состоит из двух частей:

- оператор, меняющий фазу U_{phase}

$$U_{\text{phase}}(\gamma) = e^{-i\gamma H_{\text{phase}}}$$

- оператор, смешивающий кубиты U_{mixer}

$$U_{\text{mixer}}(\beta) = e^{-i\beta H_{\text{mixer}}}$$

Оператор U_{phase} совершает вращение относительно осей Z или Y с помощью соответствующих матриц Паули

$$H_{\text{phase}} = Z \text{ or } Y \text{ axis rotation}$$

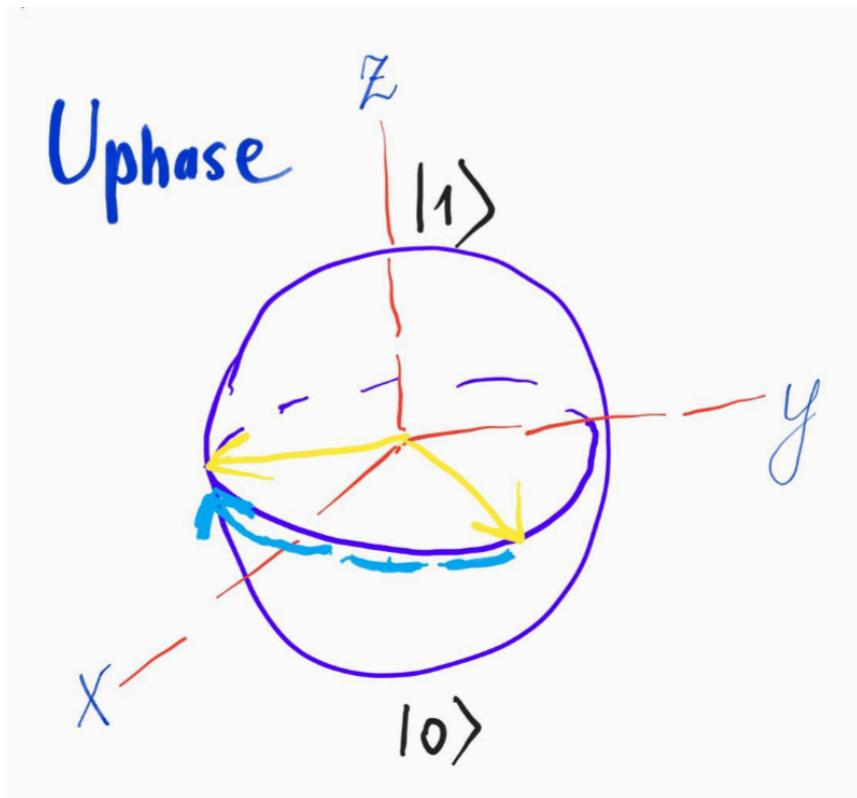


Fig. 63.3: Оператор U_{phase}

U_{mixed} в классическом случае использует матрицу $X \text{ NOT}$.

Операторы применяются к начальному состоянию Ψ_0 (путем поочередного применения гамильтонианов H_p и H_M) последовательно раз (или, иначе говоря, используются p слоев), где продолжительность j -й итерации определяется параметрами γ_j и β_j соответственно

$$\phi(\beta, \gamma) = \underbrace{U_{\text{mixer}}(\beta)U_{\text{phase}}(\gamma) \dots U_{\text{mixer}}(\beta)U_{\text{phase}}(\gamma)}_{p \text{ times}} \Psi_0$$

Общая схема для n кубитов выглядит следующим образом

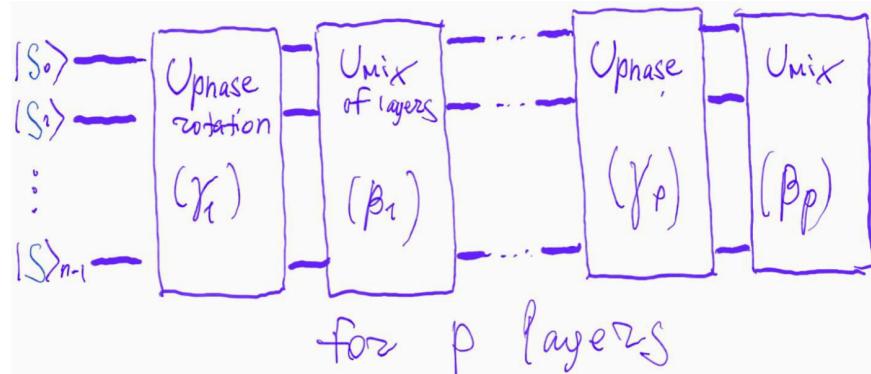


Fig. 63.4: Общая схема для n кубитов

Итак, алгоритм состоит из следующих основных этапов:

1. приготовление начального состояния Ψ_0 из n кубитов. Начальное состояние выбирается как равное состояние суперпозиции всех возможных решений

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_x x$$

2. последующее применение к каждому кубиту матриц Адамара для осуществления суперпозиции всевозможных состояний



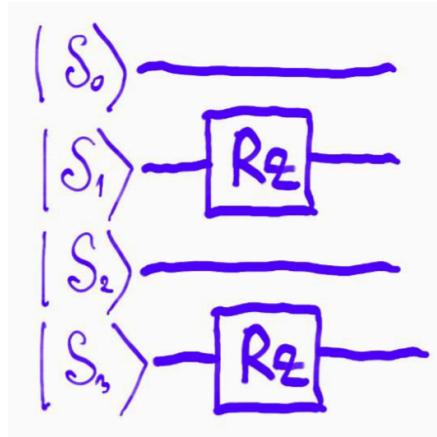
3. применяем оператор вращения фазы

$$U_{\text{phase}} = \sum_{i \neq j}^{n-1} e^{-i\gamma Z_i Z_j}$$

например, вот так

$$H_p = (I_0 \otimes Z_1 \otimes I_2 \otimes Z_3)$$

Напоминаем, как выглядит данный оператор в матричном виде: $Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

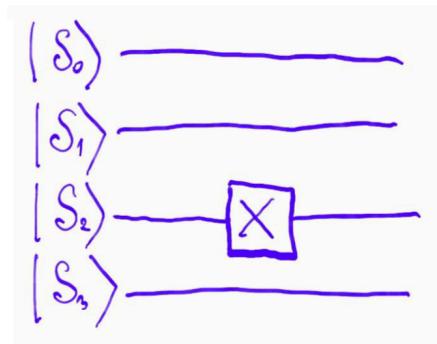


4. применяем смешивающий оператор

$$U_{\text{mixer}} = \sum_{i=0}^{n-1} e^{-i\beta X_i}$$

к примеру, так

$$U_{\text{mixer}} = (I \otimes I \otimes X \otimes Z)$$



$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

В данном алгоритме используется адиабатический метод эволюции состояния [FGGS00] Ψ_0 с переменным гамильтонианом: на каждой итерации параметры β и γ понемногу изменяются.

Далее производится измерение финального состояния в Z -базисе и вычисление $\Psi(\beta, \gamma) H_{\text{phase}} \Psi(\beta, \gamma)$. Найденный минимум будет соответствовать оптимальным β и γ .

Описанные выше шаги могут быть полностью повторены с обновлёнными наборами временных параметров в рамках классического цикла оптимизации (такого как градиентный спуск или другие подходы), используемого для оптимизации параметров алгоритма.

Возвращается лучшее решение, найденное за всё время поиска.

63.3 Quantum Alternating Operator Ansatz

Применение “анзаца” в алгоритме квантовой приближенной оптимизации заключается в модернизации оператора смещивания U_{mixer} и предполагает использование $CNOT$, а не X .

Анзац рассматривает более общие параметризованные унитарные трансформации, а не только соответствующие эволюции фиксированного локального гамильтониана во времени. Он позволяет более эффективно реализовывать операции смещивания, особенно в задачах оптимизации с жесткими ограничениями.

На рисунках ниже представлена абстрактная визуализация “смещивания” и обозначение оператора:

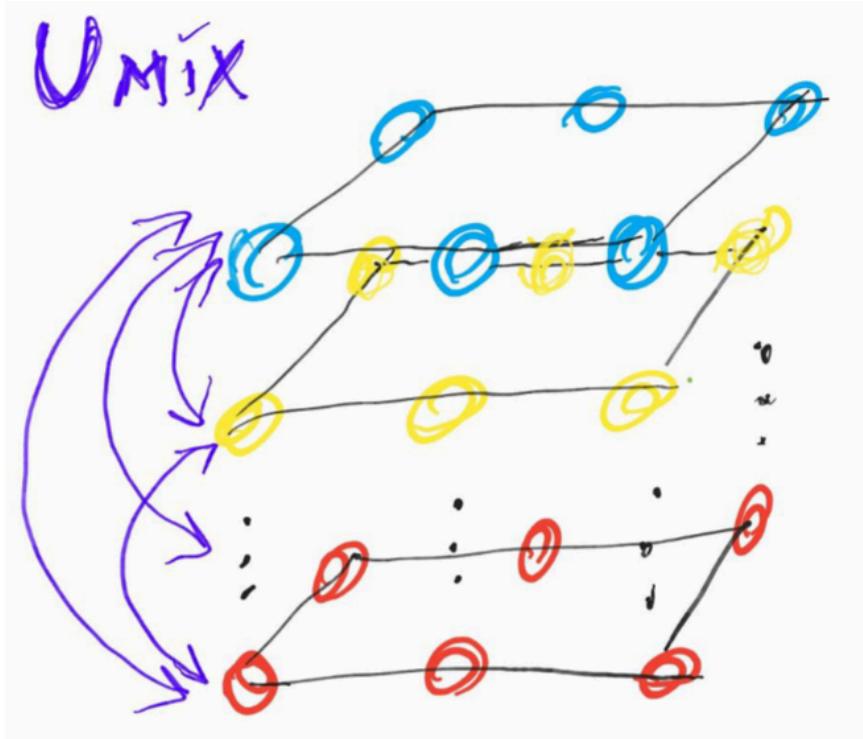


Fig. 63.5: “Смешивание”

$$U_{\text{Mix}}(\beta_i) := \sum_{j,j+k}^{n-1} U_{\text{Mix } j, j+k}(\beta_i)$$

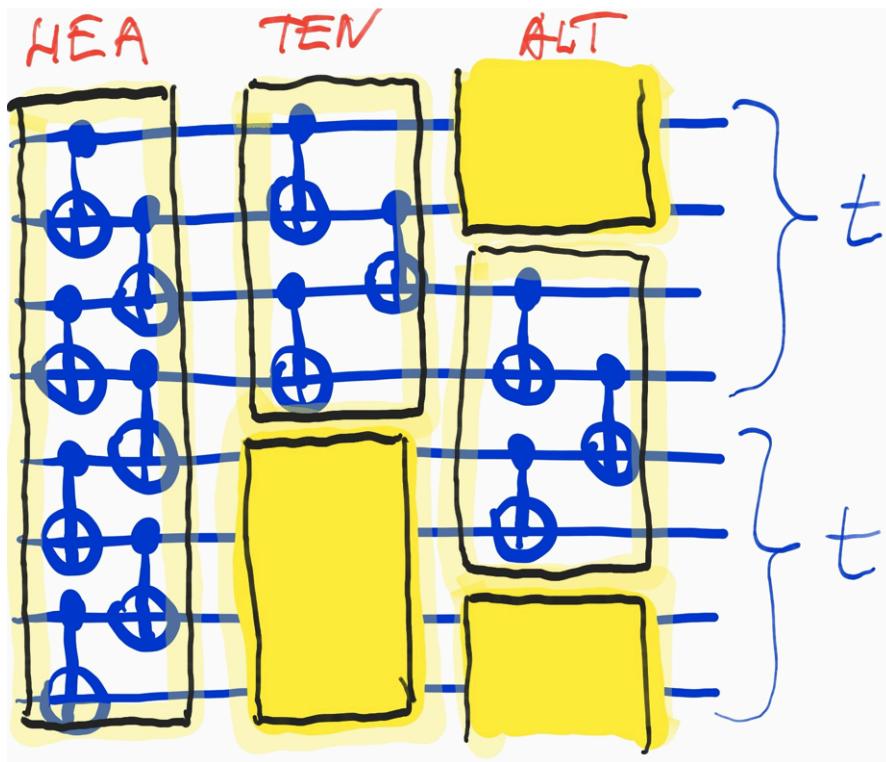
Fig. 63.6: Обозначение оператора

Классически семейство анзацев можно поделить на три основных типа:

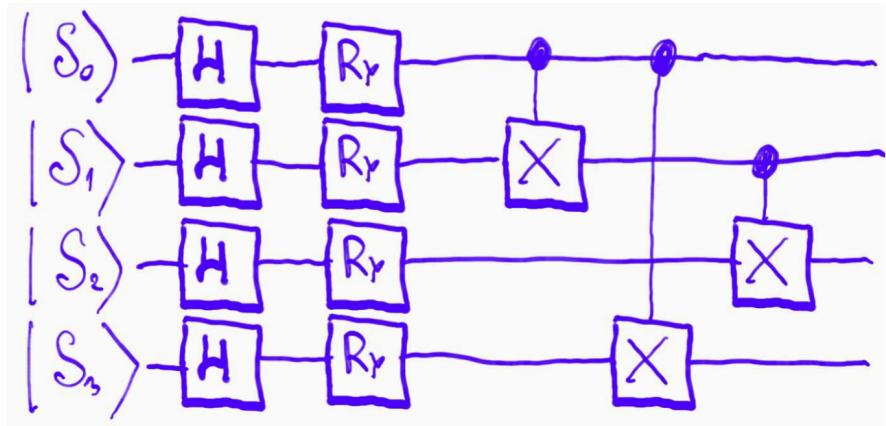
- Hardware Efficient Ansatz (HEA) – запутывающий все кубиты;
- Alternating Layered Ansatz (ALT) [FGG14];

- Tensor Product Ansatz (TEN) [HPM+19].

На рисунке ниже изображены упрощённые (без учета анзаца и фазовых гейтов) для понимания схемы описанных компоновок – по одному слою каждого типа:



Конечно, к компоновке смешанных гейтов можно подходить сколь угодно творчески, и пример общей схемы, реализующей QAOAz, представлен ниже:



Part XIX

Перспективы

CHAPTER
SIXTYFOUR

АКАДЕМИЯ И ИНДУСТРИЯ

Part XX

O KYPCE / ABOUT THE COURSE

CHAPTER
SIXTYFIVE

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / BIBLIOGRAPHY

СПИСОК АВТОРОВ КУРСА / COURSE AUTHORS

66.1 Создатели курса / Co-founders

- Синченко Семён / Sinchenko Semyon
- Кашницкий Юрий / Kashnitsky Yury
- vvsstkk

66.2 Основные авторы / The main authors

- Бажанов Дмитрий / Bazhanov Dmitry
- Березутский Александр / Berezutskii Aleksandr
- Зимка Борис / Zimka Boris
- Беседин Илья / Besedin Ilya
- Бурдейный Дмитрий / Burdeiny Dmitry
- Желтоножский Евгений / Zheltonozhskiy Evgeniy
- Карелин Николай / Karelin Nikolay
- Кашницкий Юрий / Kashnitsky Yury
- Лукьяненко Андрей / Lukyanenko Andrey
- Озерин Алексей / Ozerin Alex
- Петров Вадим / Piatrou Vadzim
- Пронькин Алексей / Pronkin Alexey
- Решетова Карина / Reshetova Carinetta
- Сендерович Леонид / Senderovich Leonid
- Синченко Семен / Sinchenko Semyon
- Токарев Игорь / Tokarev Igor
- Ширкин Сергей / Shirkin Sergei
- Щуцкий Никита / Shchutski Mikita
- Эль-Айясс Дани / El-Ayyass Dani

66.3 Основные ревьюеры / The main reviewers

- Дихтяр Иван / Dikhtyar Ivan
- Желтоножский Евгений / Zheltonozhskiy Evgeniy
- Зимка Борис / Zimka Boris
- Карелин Николай / Karelin Nikolay
- Кашницкий Юрий / Kashnitsky Yury
- Тезиков Роман / Tezikov Roman
- vvsstkk

66.4 Техническая поддержка / Technical support

- Коржов Дмитрий / Korzhov Dmitry
- Пронькин Алексей / Pronkin Alexey
- vvsstkk

66.5 Редакторы / Editors

- Маркова Наталья / Markova Natalya
- Пацкова Екатерина / Patskova Ekaterina

ГЛОССАРИЙ / GLOSSARY

Scroll down for English version

67.1 Russian

67.1.1 А

Алгоритм Гровера Англ. Grover's algorithm

Алгоритм квантового приближения для задачи оптимизации (QAOA, quantum approximate optimization algorithm), <https://www.osp.ru/os/2019/03/13055118>, <https://habr.com/ru/post/513474/>

Аннилер Англ. annealer. Устройство для приближенного решения задачи оптимизации https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_annealing

67.1.2 Б

Бра-вектор Англ. bra-vector

67.1.3 В

Вакуумное состояние Англ. Vacuum state, также используется название “основное состояние” (basic state).

Так часто называется квантовое состояние с вектором 0. Термин заимствован из квантовой оптики, чаще всего не имеет ничего общего с “обыденным” понятием “вакуума”.

Вариационная квантовая схема Англ. Variational Quantum Circuits (VQC)

Вариационное машинное обучение Англ. variational machine learning

67.1.4 Г

Гейты Англ. Quantum gates

Гейт Адамара Англ. Hadamard gate

67.1.5 И

Измерение Англ. Quantum measurement

67.1.6 К

Квантовая информация Também используется термин “квантовая информатика”, англ. Quantum Information

Квантовый оператор Англ. Quantum operator

Квантово-классическое обучение Англ. Quantum-classical machine learning

Квантовое состояние Англ. Quantum state

Кет-вектор Англ. ket-vector

Кот Шредингера Англ. Schrödinger's cat

Кубит Também кубит или q-bit, англ. Qubit, от quantum bit. Минимальная единица информации на квантовом компьютере. Как и (классический) бит, кубит допускает два состояния, которые обычно обозначаются кет-векторами 0 и 1, а на уровне реализации кубит – это двухуровневая квантовая система, такая как две поляризации фотона или спина электрона.

Кудит Англ. qudit. Квантовая система с d состояниями.

67.1.7 М

Матрица плотности Também используется термин “оператор плотности”, англ. Density matrix или Density operator

Матричное прямое произведение Синоним произведение Кронекера см. Кронекер. Англ. Tensor product

Метод квантового локального подбора (QLS, quantum local search), <https://www.osp.ru/os/2019/03/13055118>

Многокубитные гейты Англ. Multiqubit gates

67.1.8 Н

Нотация Дирака Англ. Dirac notation, формализм (система обозначения) для описания квантовых состояний на основе бра- и кет-векторов (англ. bra-ket от bracket, скобка). В этой системе обозначений Ψ обозначает вектор состояния, Ψ^* – сопряженный вектор состояния, а $\Psi \hat{H} \Psi$ – среднее (математическое ожидаемое) значения наблюдаемой для оператора \hat{H} в состоянии Ψ (также говорят о свертке оператора \hat{H} с бра-вектором Ψ и кет-вектором Ψ). Система обозначений Дирака позволяет отделить отдельить вектора состояния Ψ от самого состояния Ψ или конкретного математического описания (в виде волновой функции или вектора).

67.1.9 О

Операторы Паули Também используется термин “матрицы Паули”, англ. Pauli operators или Pauli matrices

67.1.10 П

Правило сдвига параметров (*) Англ. Parameter-shift rule

Произведение Кронекера То же, что и матричное прямое произведение (тензорное произведение в случае линейных операторов). Англ. Kronecker product

67.1.11 С

Смешанные состояния Англ. Mixed states

Собственный вектор Англ. Eigenvector

Собственное значение Англ. Eigenvalue

Соотношение неопределенности Também используется термин “принцип неопределенности”, англ. Uncertainty relation или Uncertainty principle

Суперпозиция Англ. Superposition

Сфера Блоха Англ. Bloch sphere

67.1.12 У

Унитарный оператор Англ. Unitary operator

67.1.13 Ш

“Шумные” квантовые компьютеры промежуточного масштаба (Noisy intermediate-scale quantum, NISQ, NISQ Hardware)

Термин введен Прескиллом в работе <https://arxiv.org/abs/1801.00862> для описания сегодняшнего состояния квантовых вычислений, когда “настоящие” квантовые вычисления (на миллионах кубит) еще невозможны, но современные квантовые компьютеры уже могут выполнять вычисления, которые невозможны на обычных, классических компьютерах.

См. также краткое обсуждение в <https://quantumcomputing.stackexchange.com/questions/1885/what-is-meant-by-noisy-intermediate-scale-quantum-nisq-technology>, и перевод на русский <https://www.osp.ru/os/2019/03/13055130>

67.1.14 Э

Энтропия Англ. Entropy

67.2 English

67.2.1 A

Annealer Device for approximate solution of an optimization problem https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_annealing

CHAPTER
SIXTYEIGHT

БЛАГОДАРНОСТИ / ACKNOWLEDGEMENTS

- сообществу Open Data Science за предоставление платформы для размещения курса и техническую поддержку;
/ Open Data Science community for providing the course platform and technical support /

CHAPTER
SIXTYNINE

РЕЙТИНГ / LEADERBOARD

69.1 25.10.2021 – 19.12.2021

Студенты, которые прошли все задания и в общей сумме имеют больше 6 баллов

/ Students who passed all assignments and have a total of more than 6 points /

№	Студент / Student	Общий балл / Total	Блок / Block 1	Блок / Block 2	Блок / Block 3	Блок / Block 4	Блок / Block 5	Блок / Block 6	Блок / Block 7
1	Dmitry Burdeiny	90	12	8	11	8	7	11	33
2	Alexey Zherebtsov	54	10	8	9	8	7	7	5
3	Sergei Miller	50	12	3	11	8	7	9	
4	Mikhail Knyazev	50	12	8	11	6	7	6	
5	Michael Afanasev	50	10	8	11	6	7	8	
6	Ilya Simakov	49	10	5	9	8	7	10	
7	Boris Filippov	48	10	3	11	8	7	9	
8	Nikolay Falaleev	48	10	6	11	8	7	6	
9	Aximon	47	11	5	8	6	7	10	
10	Dmitrii Fastovets	45	8	8	8	6	7	8	
11	Sergey Martynenko	44	9	3	10	6	7	9	
12	Konstantin Sukharev	39	6	5	8	6	7	7	
13	Ivan Cheprasov	39	5	3	9	6	7	9	
14	Serguey Golubev	35	8	3	6	6	2	10	
15	Aleksandr Nifontov	32	4	3	5	6	5	9	
16	Rustam Bikmurzin	29	8	3	4	4	5	5	
17	Ivan Gluhov	24	2	4	8	4	2	4	
18	Maksim Kleshchenok	22	1	0	9	2	2	8	
19	Adam Smoluakov	16	0	3	7	4	2	0	
20	Mark Baushenko	15	4	0	0	8	3	0	
21	Viktor Krasilnikov	14	1	1	3	2	2	5	

Part XXI

Intro

CHAPTER
SEVENTY

ABOUT QUANTUM COMPUTERS, BITCOIN, AND SUPERIORITY

Author(s):

- Sinchenko Semyon

Translation:

- Sinchenko Semyon
- vvsstkk

70.1 About the lecture

The lecture has no learning meaning but tries to answer questions that can have anyone who faces the topic of quantum computing for the first time:

- what is computing this?
- why do we need all this stuff?
- when will one crack bitcoin?
- what the advantage all around?

70.2 What the computing is this?

70.2.1 Quantity evolution of computers

Classical computers which are based on Turing, Von Neumann and Shockley ideas are an organic part of our lives. We all used to have an every year growing computational power of such computers. And today's cheap laptops have a power that supercomputers had 15 years ago.

A law that is named a Moore law was formulated by Gordon Moore in the late 60-s. It tells us that the number of transistors by crystal of integral circuit is adding twice every two years. And it had been holding true for the last 60 years.

Moore's Law: The number of transistors on microchips doubles every two years

Moore's law describes the empirical regularity that the number of transistors on integrated circuits doubles approximately every two years. This advancement is important for other aspects of technological progress in computing – such as processing speed or the price of computers.

Our World
in Data

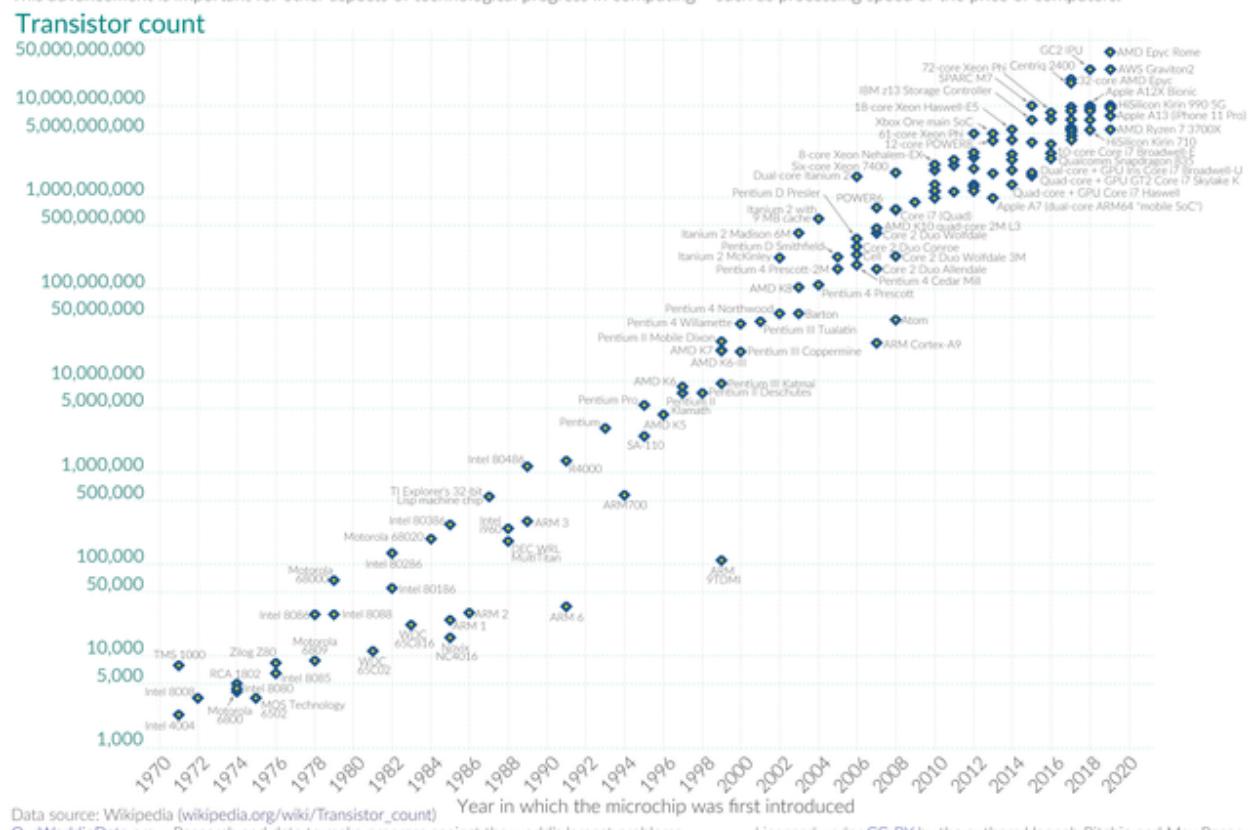


Fig. 70.1: A Moore law illustration: a growth of the number of transistors from 1970s

70.2.2 Quality evolution of computers

Unfortunately the Moore law holding cannot be endless because there are physical limitations: sooner or later the direct addition of twice the number of transistors could be impossible due to tunneling effects. That's why it is said that modern computers will have a "quality" revolution. Some say about new materials for creating transistors. Another say about new principles of computers. For example about photonic computers where photons are used instead of electrons, but one can hear that the next computer revolution will be the invention of quantum computers. That is what we will talk about.

70.2.3 The idea of quantum computers

There are a few versions of what the first one said about using quantum mechanics laws for creating the new computer. Like it frequently happens a few scientists independently and at one time came to the same idea. One of them was Richard Phillips Feynman.



Fig. 70.2: Richard Phillips Feynman, 1918-1988

In 1981 when there was a very active development of both classical computers and computational quantum mechanics he said that for solving quantum mechanical problems we should have a quantum computer.

70.2.4 What computer is this?

It is a very complicated question and all the first half of our course will try to answer it. It is strange if such a complex question that is discussed in a few lectures with hard math could be explained in a few words. It would be wrong to say that classical computers are based on classical physics' laws and quantum computers are based on quantum physics' laws because one couldn't explain the principles of modern transistors without such quantum things like the Fermi level and other stuff. Also, it would be wrong to say that classical computers operate with 0 and 1, but quantum have all states from 0 to 1 because there is the probability Turing machine that works with a probabilistic bit that can have all the states from 0 to 1. In particular, we do not want to rush with a lot of complex and unclear terms like quantum superposition, qubits or quantum entanglement because such terms mean nothing for anyone who is not in the loop. First let us agree that *quantum computers* are not only based on new technology like photonic or graphene computers but use a whole new principle of computation and information representation different from what Turing invented.

70.3 Why do we need it?

70.3.1 Factorization problem

It seems to me that specifically the invention of the Shor algorithm for effective solving of the factorization problem was the most important step for the popularization of quantum computing. After that a lot of specialists and scientists rushed to this field, military forces and corporations pushed a fantastic sum of money to the field, reporters started to talk about the future failure of the bank system and the whole world. Probably the Shor algorithm is the most hyped quantum algorithm.

The reason is that the biggest part of modern cryptography is based on simple assuming that there is no polynomial algorithm for the factorization task. In other words, if we have a number that is the result of two big prime numbers products we can try to find those prime numbers until the death of the universe. But it is true only for the classical computer. A quantum computer has the effective polynomial algorithm invented by Peter Shor in 1994. And this algorithm can solve the factorization problem in a relatively short time.



Fig. 70.3: Peter Shor. The man who set the world on fire with his algorithm.

This algorithm will crack bitcoin and ruin the banking system in the future. But it's not all that simple: the evolution of quantum computers threw scientists into creating *post-quantum* cryptography that is based on tasks which cannot be effectively solved on both classical and quantum computers.

70.3.2 Combinatorial and NP-hard problems

Except for difficulties with Moore law, there is another problem with classical computers. There are tasks that likely won't be solved effectively on the classical Turing computer. Even on photonic or graphene ones. A good example is the knapsack problem. When we have a knapsack of limited volume and a lot of things with different size and cost. And we want to fill our knapsack in such a manner to maximize the total cost of things inside it. The task looks very simple, but it is an example of [NP-complete problems](#). If we have a big number of different things and a relative big knapsack such a problem cannot be solved exactly in a reasonable time. Even finding a good enough *approximate* solution to such a problem is very hard today!

Note: I used a word “likely” because the question about existence of the effective solution of NP-complete problems is one of the major unsolved problems in computer science](https://en.wikipedia.org/wiki/P_versus_NP_problem). Today we do not know any effective algorithm for it. But we still cannot proof that *there isn't such an algorithm*. Highly likely there isn't of course and $P \neq NP$ but no one can proof it.

The algorithms are already known for quantum computers that allow potentially effective, albeit *approximate*, solution of such problems on a quantum computer. These are the traveling salesman problem, the knapsack problem, the graph clustering problem, and many other combinatorial optimization problems. In this course there will be a whole block dedicated to such quantum algorithms as *Variational Quantum Eigensolver* and *Quantum Approximate Optimization Algorithm*.



Fig. 70.4: Visualizing the solution of the salesman's problem – the shortest route to get around 12 German cities – is a very important task of modern logistics

70.3.3 Quantum mechanics simulation

This is what Feynman proposed to create quantum computers for. This is a separate big topic, with a lot of quantum mechanics. Several lectures in this course will be devoted to it. But let's try to explain this without going into too much detail.

The problems of quantum mechanics cannot be solved analytically. It would seem that what is the problem Newton's laws for three bodies also cannot be solved analytically, but this does not prevent flying into space, because such a problem can be solved numerically. But there comes a second problem, namely, that explicitly integrates the Schrödinger equation in time, or, simply, to solve quantum mechanics numerically and also computationally almost impossible for more than two particles.



Fig. 70.5: Erwin Schrödinger, 1887-1961, creator of the famous equation and cat meme

It would seem, what's in it for us. After all, quantum mechanics is the lot of theoreticians. But here is the problem: quantum mechanics is the basis of quantum chemistry, which, in its turn, is the basis of all chemistry in general and such of its applications as creating new drugs, developing new batteries for Tesla cars and many other things. And today we are forced to use only very approximate solutions and concepts, the accuracy of which is often insufficient.

Quantum computers can make a real breakthrough in this case. After all, due to its physical nature, a quantum computer is ideal for simulating quantum mechanics, and hence for solving such important tasks as drug development and design of new materials today.

70.3.4 Machine Learning and Artificial Intelligence

Machine learning has reached unprecedented heights in its development over the past 10-15 years. Many tasks that previously seemed impossible to solve with a computer are now successfully solved with machine learning. Examples include playing Go, distinguishing Chihuahua breeds from photographs, recognizing faces in a video stream, composing relatively meaningful texts, and generating Picasso-style paintings from simple photographs. But it is still very far from the capabilities of the human brain. For example, the largest artificial neural networks today are roughly estimated to be the equivalent of 15 million neurons, while the human brain has about 85 billion! The learning speed of modern neural networks also raises questions. Thus, the largest language models today are trained for weeks on clusters of thousands of video cards, while a human with his relatively modest computing power learns to speak for only 2-3 years.

And here, too, quantum computers can come to the rescue. In this case, quantum analogues of neural networks, as well as their combinations with classical neural networks already show impressive results. For example, there are works showing that 4 quantum neurons are equivalent to a classical artificial neural network with ~ 250 neurons in its expressiveness!

It is quantum machine learning, and the ways it can be applied, that will be the focus of most in this course. We will try to cover everything from the theory of how quantum machine learning algorithms can be built to how they can be programmed in modern quantum programming languages. If this topic is of interest to you, this course is definitely for you!

70.4 When will bitcoin be cracked?

This is probably one of the main questions that arise when reading such articles. And let's answer right away: they won't crack soon, there is still plenty of time, 10 years for sure.



Fig. 70.6: Bitcoin, like many other electronic media will be forced to switch to post-quantum cryptography

70.4.1 How many qubits are needed for different tasks?

Probably at once it is necessary to estimate the size that a quantum computer must have in order to effectively solve the tasks described above. Approximate figures are as follows:

- Shor's algorithm and breaking of modern cryptography (including bitcoin): $\sim 20 \cdot 10^6$ (20 million) qubits
- optimization problems: $\sim 100 \cdot 10^3$ (100 thousand) qubits
- first useful problems in quantum chemistry: $\sim 1 \cdot 10^3$ (1 thousand) qubits
- quantum machine learning: $\sim 100 - 500$ qubits

This is, by the way, one of the reasons why our course is mostly about quantum machine learning.

70.4.2 Logical vs Physical Qubits

There is also the problem that all quantum mechanics is probabilistic. There is also the problem that quantum computers operate in the microcosm and are very sensitive to any noise from outside. This leads to a completely unacceptable level of errors in calculations and their low determinism. For example, a good level of accuracy for quantum computers today is 99% per operation. But each algorithm includes hundreds or even thousands of operations! And then the error rate becomes quite sad.

But there is some good news. There are now many cool error-correcting algorithms that allow you to use several physical qubits with high error rates to create one logical qubit that has a very low error rate. That is, the programmer will write code that performs operations on one qubit, and on the physical level, it will be an operation on several qubits. All in all, the problem is solvable. Except that up to a thousand physical qubits might be needed to create one quality logical qubit! The estimates we gave above are just about logical qubits, i.e. qubits with very high precision of operations at the level of classical computers.

70.4.3 How many qubits are there today?

Let's say that quantum computers already exist today. Except that all manufacturers, when they write about a new record, mean physical qubits most often.

There are quantum computers with different architectures. Some have more qubits, but also a higher error rate. Others have a low error rate, but they are difficult to scale. The topic of quantum iron in this course will be a separate block of several lectures. But in brief, we can name the following figures:

- the record in relatively easily scalable but noisy quantum computers is ~ 55 qubits
- the record in relatively accurate but slow and poorly scalable computers is ~ 20 qubits
- the record in accurate and scalable but very difficult to program computers is ~ 25 qubits

Note: Here we mean accordingly:

- superconducting qubits, which are the easiest to scale today
 - trapped ions, which have one of the highest accuracies
 - photons, which seem to be good for everything, except that the programming on them is aligning lenses and lasers on an optical table
-

It is worth adding that the record in exact and scalable as well as programmable (topological) qubits today is exactly 2 qubits. Seriously, the interaction of two logical qubits was published in *Nature* this year (2021).

70.4.4 What plans do the leading players in this market have?

It would seem that with such a scale bitcoin has nothing to fear, and in general the area does not look the most promising. But there is one nuance. All the major players in the market of creating quantum computers (*Google Quantum, IBM Quantum, IonQ, Xanadu*) have announced plans to have about one million physical qubits by 2030, which is equivalent to about a thousand logical qubits. That's not terrible for cryptography yet, but many useful tasks will already be able to be solved. And it is worth looking again at the graph of Moore's Law for classical computers, which shows approximately the same progress every ten years!

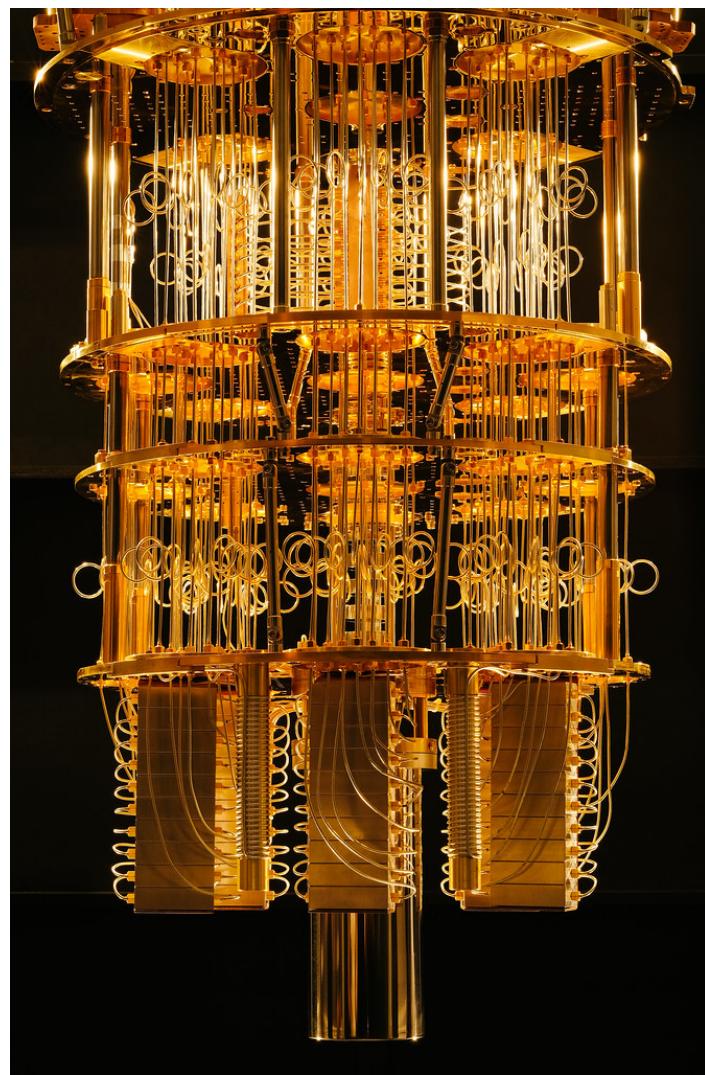


Fig. 70.7: IBM's quantum computer looks something like this

70.5 On Quantum Superiority

It is very common to hear talk about quantum superiority being achieved or disproved. Let's try, near the end of the lecture, to understand what it is and why it is important (or not).

70.5.1 The concept of quantum superiority

The concept itself was formulated back in 2012 by renowned physicist theorist John Preskill.



Fig. 70.8: John Preskill, who coined the term. He is also famous for his famous bet with another physicist, Stephen Hawking (which Hawking lost)

Quantum superiority is a solution on a quantum computer to a problem that cannot be solved on a classical computer in reasonable time (10 thousand years is not considered reasonable time). Achieving quantum superiority is definitely a new level in the development of quantum computing. But there is one catch. The fact is that we are talking about absolutely any task, no matter how useful or useless it is.

So when someone claims to achieve quantum superiority, it is an important reason for scientists and developers of quantum computers, but most likely it is a very unimportant fact, from the point of view of the common man.

70.5.2 Timeline of events

Finally, here is a brief chronology of events.

- 2019, *Google* claims to achieve quantum superiority. The task chosen is as convenient as possible for a quantum computer and completely devoid of practical sense. According to the developers from *Google*, their quantum computer in 4 minutes solved a problem that a classical supercomputer would take 10 thousand years to solve. Their quantum computer had 54 qubits
- 2019, *IBM* says that *Google* failed to consider that their problem could be solved more optimally on a classical computer, but without experiments
- 2020, *Alibaba* implements the *IBM* algorithm on its supercomputer and solves the problem in ~ 20 days
- 2021, a group of Chinese scientists optimizes the classical algorithm and solves the problem on 60 *NVIDIA* video cards in 7 days
- 2021, a group of other Chinese scientists claims to have achieved a new superiority on a 56-qubit quantum computer

All in all, there is a rather interesting process of sword and shield warfare going on right now. While some scientists build more powerful quantum computers, others come up with more advanced algorithms to simulate them. Although, of course, all scientists say that at about 60-70 qubits this story will finally end in favor of quantum computers.

70.6 What does it even look like? And how much does it cost?

As of today, almost all known technologies for creating quantum computers require something of:

- ultra-low temperatures
- ultrahigh vacuum
- ultra-precise alignment of lasers on the optical bench

Or even all at once. That is why today almost all quantum computers are sold through cloud services. For example, relatively recently, the leading cloud technology provider *Amazon* added a new product to its AWS service [Amazon Braket](#). This product allows you to rent a real computer, just as we are used to renting processors, video cards or hard drives. Similar products are now provided by other major players in the market of cloud services. This is all for research purposes only, though. After all, as we have already understood, today quantum computers are not yet able to solve real problems. For example, you can run your quantum program on a 32-bit *Aspen-9* computer for only \$0.3 (per-task).

Some manufacturers go further and offer relatively compact solutions. For example, recently a [24-cube solution was introduced](#), which fits in two standard server racks. But the scalability of such devices raises questions.

In any case, in the next 15-20 years we definitely should not wait for the appearance of a pocket quantum computer, or at least a quantum coprocessor in the home PC. And it does not make much sense, because few people at home need to hack bitcoin, solve a logistics problem or develop a high-temperature superconductor.

70.7 Conclusion

This is an introductory lecture; it will not give you any special knowledge. Rather, its purpose is to interest the reader. The most interesting part will be in the main part of the course where we will be dealing with quantum algorithms, trying to simulate quantum mechanics and training real quantum neural networks! We are waiting for you at the course!

CHAPTER
SEVENTYONE

PREREQUISITE

Translation:

- vvssttk

This course combines both theory for in-depth understanding of the material and plenty of practice to reinforce skills and work through non-obvious situations/problems. Therefore, it is assumed that you already have some basic knowledge. You can check yourself with the optional [Entrance Test](#), which will help you understand if you need to take the introductory “blue” lectures – on Python, math and machine learning (15 questions total, 5 per block). The test is pretty simple, so if you pass it without mistakes or almost without mistakes - that doesn’t say much, anyway it can be difficult. But if you have a lot of mistakes, then you should turn to the introductory “blue” blocks.

71.1 Python, Poetry and development environment

To be successful in the course you must be able to do and understand such things as

- copying files from GitHub;
- installing Poetry and the Python libraries;
- how to run/start the Jupyter Notebook;
- the basic keyboard shortcuts in Jupyter Notebook;
- how to run code in Jupyter Notebook;
- what simple data types exist in Python;
- how to work with complex container types (`list`, `dict`, `tuple`), including the most popular methods of each;
- how Python arithmetic works and how variables of different types relate to one another;
- what are conditional constructs and branching logic;
- what is a block of code in Python and why indents (tabs) are needed;
- what loops are and how they can be used with complex data types;
- how to write functions in Python and what function arguments are and what they are;
- what a decorator is and how to use it;
- basic OOP: class declaration, the concept of a class object, the ability to write class methods.

If you don’t understand any of the topics, it is highly recommended that you refresh your knowledge (or even acquire it) by taking the corresponding lessons in Python Basics. Even if you have experience working with it and writing code, you are encouraged to learn how to install all the necessary dependencies and libraries, as well as the hotkeys and various functions in the Jupyter Notebook.

71.2 Linear algebra and Numpy

To understand basic quantum algorithms and quantum machine learning algorithms, just as in classical machine learning, one cannot do without linear algebra. If you have time to take mathematics seriously, we recommend [Gilbert Strang](#) or [D.V. Beklemishev \(RU\)](#) courses, as well as [A.I. Kostrikin's problem book \(RU\)](#). And if you have ever studied linear algebra, but have forgotten it, a block of our course will help. We want you to have no problems with such concepts as

- vector-line and vector-column;
- linear dependence of vectors;
- systems of linear equations;
- matrices, determinants and trace of a matrix;
- linear operator;
- complex and Hermite conjugation;
- scalar and vector product;
- Hilbert space.

The list is obviously not exhaustive, and it is likely that you will not list all the things that can be encountered as you study quantum algorithms.

71.3 Machine Learning

Finally, to talk about quantum machine learning, you need to have a good understanding of machine learning. This course unit describes what different machine learning tasks have in common and how the various applications of machine learning models are put together like a jigsaw puzzle. This block, however, does not replace a good book or course on machine learning (like [Andrew Ng course](#), [Yandex and MIPT specialization \(RU\)](#), [mlcourse.ai](#), [Machine Learning course at FKN HSE – E. A. Sokolov \(RU\)](#) or [SHAD's Machine Learning Tutorial \(RU\)](#)) covering topics such as:

- teacher-assisted and non-teacher-assisted learning, reinforcement learning;
- quality metrics in learning tasks with a teacher;
- loss functions and reduction of machine learning problems to optimization problems;
- feature processing and construction;
- model quality assessment and cross validation;
- classification and regression algorithms: decision trees, forest, boosting, logistic regression, etc;
- ranking algorithms, ranking quality metrics;
- teacherless learning: dimensionality reduction, clustering, anomaly search;
- bayesian view of machine learning;
- representation learning.

Again, this is not an exhaustive list, and it covers only the “classics,” ignoring deep learning. But if any of these things are confusing or if the entry `test` fails, it may be worth referring to the courses mentioned above.

Part XXII

Linear Algebra and Numpy

CHAPTER
SEVENTYTWO

ABOUT “LINEAR ALGEBRA AND NUMPY”

This unit is designed to discuss the basic concepts and ideas of linear algebra and is a quick reference guide; **is not** a full-fledged textbook. For a more detailed dive into the topic we recommend the textbook “[Matrix Analysis and Linear Algebra](#)” (RU) by Tyrtyshnikov E. E. or “[Matrix Analysis](#)” (EN) by Roger A. Horn, Charles R. Johnson.

Within the unit:

- discuss basic concepts and ideas such as **vectors** and **matrices**;
- get acquainted with tools for working with vectors and matrices;
- let’s try to calculate something!

Descriptions:

- a – a number (scalar);
- \mathbf{a} – vector;
- \mathbf{A} – matrix.

Useful material:

- MathProfi: [Analytic geometry](#) (RU).
- 3Blue1Brown: [Essence of linear algebra](#).

CHAPTER
SEVENTYTHREE

VECTORS

Author(s):

- El-Ayyass Dani

Translation:

- Pronkin Alexey
- Zheltonozhskii Evgenii
- vvssttkk

73.1 Definition

The term `vector` has several interpretations: mathematical, geometric, physical, etc. The exact meaning of the term depends on the context.

Formally, a vector is defined as an element of vector space – a set with **addition** and **multiplication of a vector by a number (scalar)** operations, which satisfy [8 axioms](#).

For simplicity, let us consider the rectangular (Cartesian) coordinate system in the plane, familiar from school days – two perpendicular to each other axes x and y , selected unit vectors (orthogonal) $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ on them and the origin of coordinates.

The vector \mathbf{a} in this coordinate system can be written as follows: $\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$

Note 1: Vector coordinates do not uniquely define its position in the plane, but only the position of the vector's end relative to its start. For example, a vector $\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ can be drawn either from the origin $(0, 0)$ with the end at $(3, 4)$, or from an arbitrary point, e.g. $(1, 1)$ with the end at $(4, 5)$. Both of these vectors correspond to 3 orthogonal unite vectors on the x -axis and 4 on the y -axis. Normally, unless otherwise stated, it is assumed that the vector is deferred from the origin.

Note 2: A vector can be represented either as a column vector $(a_1 \ a_2)$ or as a row vector $(a_1 \ a_2)$. Hereinafter, by a vector we mean a column vector, unless otherwise stated.

The notion of a vector in the plane can be generalized to 3-dimensional space, and, in general, to n -dimensional space (which can no longer be visualized):

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + \dots + a_n\mathbf{e}_n = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ \dots & a_n \end{pmatrix}$$

73.2 Vector operations

As stated earlier, there are two basic operations on vectors in the formal definition:

- addition:

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_1 + b_1)\mathbf{e}_1 + (a_2 + b_2)\mathbf{e}_2 + \dots + (a_n + b_n)\mathbf{e}_n = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ \dots & a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 & a_2 + b_2 \\ \dots & a_n + b_n \end{pmatrix}$$

- multiplication of a vector by a number (scalar):

$$\lambda\mathbf{a} = \lambda a_1\mathbf{e}_1 + \lambda a_2\mathbf{e}_2 + \dots + \lambda a_n\mathbf{e}_n = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \dots \\ \lambda a_n \end{pmatrix}$$

The operation of multiplying a vector by a number can be interpreted geometrically as a contraction/extension of a vector.

Using these two operations, we can define **linear combinations of vectors**: $\alpha_1\mathbf{a}_1 + \alpha_2\mathbf{a}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{a}_n$, where $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$ are vectors and $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ are numbers.

73.3 The norm (length) of a vector

In linear algebra, the term **norm** is used to generalize the notion of vector length. It can be said that the notions of length and norm are equivalent.

Formally the norm is defined as a functional in the vector space satisfying [3 axioms](#). Norm is mapping elements of this space (vectors) to the set of non-negative real numbers.

There are many functionals satisfying this definition of norm, but we will consider the most commonly used one – **Euclidean norm**.

For simplicity, let us consider a vector in the plane. Geometrically, it is a directional segment. The directionality of a vector has no effect on its length, so we can work with it as a segment in the plane and calculate its length using school formulas. Note that the vector coordinates correspond to the numbers multiplying coordinate axis orthogonal vectors, so the vector length formula is: $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$. Accordingly, in general, the formula is $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2}$.

73.4 Scalar product

One of the most common operations on two vectors is the so-called **scalar product**, the result of which is a number (scalar) – hence the name of the operation.

Note: In addition to scalar product there is also **vector product** or **cross product** over a pair of vectors, the result of which is a vector. There is also **triple product** over a triplet of vectors, the result of which is a number. These operations will not be covered in this course.

Scalar product is used in determining the length of vectors and the angle between them. This operation has two definitions:

- Algebraic: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_nb_n$
- geometric: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\|\|\mathbf{b}\| \cos \theta$, where θ is the angle between the vectors \mathbf{a} and \mathbf{b} .

Using both of these definitions, we can derive a formula for calculating the cosine of the angle between the vectors:

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\|\|\mathbf{b}\|} = \frac{a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_nb_n}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2} \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + \dots + b_n^2}}$$

Using this formula we can arrive at one of the main properties of scalar product, which is that **two vectors are perpendicular if and only if their scalar product is 0**: $\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \leftrightarrow \cos \theta = 0 \leftrightarrow \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$

The scalar product can be used to calculate the vector norm as follows: $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$

73.5 Linear independence

One of the fundamental concepts of linear algebra is **linear dependence/independence**.

To define this concept, consider a set of several vectors. A set of vectors is **linearly dependent** if there exists nontrivial linear combination of vectors of this set (at least one element of this combination is not 0) equal to a zero vector (a vector consisting only of 0):

$$\lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \lambda_m \mathbf{a}_m = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \exists j, \lambda_j \neq 0$$

If a set of vectors is not linearly dependent, that is, there is no nontrivial linear combination of vectors of a given set equal to the zero vector, then such a set of vectors is called **linearly independent**.

Example:

- A linearly independent set of vectors (only the zero coefficients of a linear combination lead to a zero vector):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- linearly dependent set of vectors (there are non-zero coefficients of the linear combination that lead to the zero vector):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow 2 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 3 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - 1 \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

The following property can be deduced from the definition of linear dependence: A set of vectors is linearly dependent if and only if one of the elements of that set can be expressed through the remaining elements.

Note: If vectors represent some characteristics of objects, then linear dependence can be interpreted as data redundancy.

The notion of linear independence introduces the concept of **dimensionality** of a vector space – the maximum number of linearly independent vectors in it.

73.6 Basis

In the formal definition of a vector there are no quantitative interpretations of it, just two operations on vectors and 8 axioms.

So where do quantitative measurements come from? To make this clear, we need to introduce the concept of **basis**.

A basis is a finite set of vectors in a vector space such that any vector in that space can be uniquely represented as a linear combination of vectors of that set.

Recall one of the examples above, where we represented a rectangular coordinate system in the plane and unit vectors \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 . $\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. In this example, we decompose the arbitrary vector \mathbf{a} as follows:

$$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

It turns out that the orthogonal vectors \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 are the basis of the two-dimensional vector space, and by linear combination of these vectors we can uniquely represent any vector in this space.

The question arises, is this basis unique in two-dimensional space, or not?

The answer to this question is no. In fact, one can take any two vectors (**almost any**) and they will also form a basis, meaning that any vector can be decomposed by their linear combination.

Example.

Suppose we have a vector $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ in a basis of unit orthogonal vectors, and we want to decompose it in another basis $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix}$:

$$\alpha_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

From where we can find that $\alpha_1 = -1$, $\alpha_2 = -1$:

$$-1 \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix} + -1 \begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

So, vector $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ in the basis of unit orthogonal vectors is represented as $\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ in the basis $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ -3 \end{pmatrix}$.

But, as mentioned before, **not any set of vectors** makes a basis.

For example, the set of vectors $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} -3 \\ 0 \end{pmatrix}$ cannot decompose the vector $\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$, so this set of vectors is not a basis.

What is the fundamental difference between these sets, and can the basis of a two-dimensional space consist of more or fewer vectors than 2?

Linear algebra has an answer to this:

Any n linearly independent vectors of n -dimensional vector space form the basis of that space.

Exactly due to the linear dependence, the vectors $\begin{pmatrix} -2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} -3 \\ 0 \end{pmatrix}$ can't be the basis of a two-dimensional space.

73.7 What did we learn?

- The definition of a vector;
- The operations on vectors;
- The vector norm (length);
- The scalar product;
- The linear independence;
- The basis.

BIBLIOGRAPHY

- [ion] Single trapped atom captures science photography competition's top prize. Accessed: 2021-10-05. URL: <https://webarchive.nationalarchives.gov.uk/ukgwa/20200930161403/https://epsrc.ukri.org/newsevents/news/single-trapped-atom-captures-science-photography-competitions-top-prize/>.
- [Mon] Varenna summer school on ion traps: quantum simulation, lecture i. Accessed: 2021-10-05. URL: https://iontrap.umd.edu/wp-content/uploads/2014/01/Lecture1_QSIM.pptx.
- [AMunozNK21] Shahnawaz Ahmed, Carlos Sánchez Muñoz, Franco Nori, and Anton Frisk Kockum. Quantum state tomography with conditional generative adversarial networks. *Physical Review Letters*, 127(14):140502, 2021. doi:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.140502>.
- [And19] Neculai Andrei. A diagonal quasi-newton updating method for unconstrained optimization. *Numerical Algorithms*, 81(2):575–590, 2019. doi:<https://doi.org/10.1007/s11075-018-0562-7>.
- [Arn51] Walter Edwin Arnoldi. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quarterly of applied mathematics*, 9(1):17–29, 1951. URL: <https://www.ams.org/journals/qam/1951-09-01/S0033-569X-1951-42792-9/S0033-569X-1951-42792-9.pdf>.
- [ABBradler+21] J. M. Arrazola, V. Bergholm, K. Brádler, T. R. Bromley, M. J. Collins, I. Dhand, A. Fumagalli, T. Gerrits, A. Goussev, L. G. Helt, J. Hundal, T. Isacsson, R. B. Israel, J. Izaac, S. Jahangiri, R. Janik, N. Killoran, S. P. Kumar, J. Lavoie, A. E. Lita, D. H. Mahler, M. Menotti, B. Morrison, S. W. Nam, L. Neuhaus, H. Y. Qi, N. Quesada, A. Repington, K. K. Sabapathy, M. Schuld, D. Su, J. Swinerton, A. Száva, K. Tan, P. Tan, V. D. Vaidya, Z. Vernon, Z. Zabaneh, and Y. Zhang. Quantum circuits with many photons on a programmable nanophotonic chip. *Nature*, 591(7848):54–60, mar 2021. arXiv:2103.02109, doi:10.1038/s41586-021-03202-1.
- [AAB+19] Frank Arute, Kunal Arya, Ryan Babbush, Dave Bacon, Joseph C Bardin, Rami Barends, Rupak Biswas, Sergio Boixo, Fernando GSL Brandao, David A Buell, and others. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574(7779):505–510, 2019. doi:<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5>.
- [BGrotschelJungerR88] Francisco Barahona, Martin Grötschel, Michael Jünger, and Gerhard Reinelt. An application of combinatorial optimization to statistical physics and circuit layout design. *Operations Research*, 36(3):493–513, 1988.
- [BAG21] Afrad Basheer, A. Afham, and Sandeep K. Goyal. Quantum $\$k\$$ -nearest neighbors algorithm. 2021. arXiv:2003.09187.
- [BV04] Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, March 2004. ISBN 0521833787. URL: <http://www.amazon.com/exec/obidos/redirect?tag=citeulike-20&TU\textbackslashtextbackslash{}&path=ASIN/0521833787>.
- [BK02] Sergey Bravyi and Alexei Kitaev. Fermionic quantum computation. *Annals of Physics*, 298(1):210–226, 2002.

- [BVM+21] Michael Broughton, Guillaume Verdon, Trevor McCourt, Antonio J. Martinez, Jae Hyeon Yoo, Sergei V. Isakov, Philip Massey, Ramin Halavati, Murphy Yuezhen Niu, Alexander Zlokapa, Evan Peters, Owen Lockwood, Andrea Skolik, Sofiene Jerbi, Vedran Dunjko, Martin Leib, Michael Streif, David Von Dollen, Hongxiang Chen, Shuxiang Cao, Roeland Wiersema, Hsin-Yuan Huang, Jarrod R. McClean, Ryan Babbush, Sergio Boixo, Dave Bacon, Alan K. Ho, Hartmut Neven, and Masoud Mohseni. Tensorflow quantum: a software framework for quantum machine learning. 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2003.02989>, arXiv:2003.02989.
- [CCH+19] Giuseppe Carleo, Kenny Choo, Damian Hofmann, James ET Smith, Tom Westerhout, Fabien Alet, Emily J Davis, Stavros Efthymiou, Ivan Glasser, Sheng-Hsuan Lin, and others. Netket: a machine learning toolkit for many-body quantum systems. *SoftwareX*, 10:100311, 2019.
- [CT17] Giuseppe Carleo and Matthias Troyer. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 355(6325):602–606, 2017. URL: <https://arxiv.org/abs/1606.02318>.
- [CBSG17] Andrew W. Cross, Lev S. Bishop, John A. Smolin, and Jay M. Gambetta. Open quantum assembly language. 2017. URL: <https://arxiv.org/abs/1707.03429>, arXiv:1707.03429.
- [DAPN21] Prasanna Date, Davis Arthur, and Lauren Pusey-Nazzaro. Qubo formulations for training machine learning models. *Scientific Reports*, 11:10029, May 2021. URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-89461-4>, doi:10.1038/s41598-021-89461-4.
- [DPP19] Prasanna Date, Robert Patton, and Thomas Potok. Efficiently embedding qubo problems on adiabatic quantum computers. *Quantum Information Processing*, 18:117, Mar 2019. URL: <https://doi.org/10.1007/s11128-019-2236-3>, doi:10.1007/s11128-019-2236-3.
- [DFO20] Marc Peter Deisenroth, A Aldo Faisal, and Cheng Soon Ong. *Mathematics for machine learning*. Cambridge University Press, 2020. <https://mml-book.github.io/book/mml-book.pdf>.
- [DHM+18] Danial Dervovic, Mark Herbster, Peter Mountney, Simone Severini, Naiři Usher, and Leonard Wossnig. Quantum linear systems algorithms: a primer. 2018. arXiv:1802.08227.
- [FGG14] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, and Sam Gutmann. A quantum approximate optimization algorithm. 2014. arXiv:1411.4028.
- [FGGS00] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, Sam Gutmann, and Michael Sipser. Quantum computation by adiabatic evolution. 2000. arXiv:0001106.
- [GKD19] Fred Glover, Gary Kochenberger, and Yu Du. A tutorial on formulating and using qubo models. 2019. arXiv:1811.11538.
- [GBC16] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. <http://www.deeplearningbook.org>.
- [GK21] Peter Groszkowski and Jens Koch. Scqubits: a python package for superconducting qubits. *arXiv e-prints*, jul 2021. arXiv:2107.08552.
- [HHL09] Aram W. Harrow, Avinatan Hassidim, and Seth Lloyd. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, Oct 2009. URL: <https://arxiv.org/abs/0811.3171v3>, doi:10.1103/physrevlett.103.150502.
- [Has70] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1):97–109, 04 1970. URL: <https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97>, arXiv:<https://academic.oup.com/biomet/article-pdf/57/1/97/23940249/57-1-97.pdf>, doi:10.1093/biomet/57.1.97.
- [HavlivcekCorcolesT+19] Vojtěch Havlíček, Antonio D Córdoles, Kristan Temme, Aram W Harrow, Abhinav Kandala, Jerry M Chow, and Jay M Gambetta. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature*, 567(7747):209–212, Mar 2019. URL: <https://arxiv.org/abs/1804.11326>, doi:10.1038/s41586-019-0980-2.
- [HSchatzleNoe20] Jan Hermann, Zeno Schätzle, and Frank Noé. Deep-neural-network solution of the electronic schrödinger equation. *Nature Chemistry*, 12(10):891–897, 2020. URL: <https://www.nature.com/articles/s41557-020-0544-y>.

- [HAGH+20] Mohamed Hibat-Allah, Martin Ganahl, Lauren E Hayward, Roger G Melko, and Juan Carrasquilla. Recurrent neural network wave functions. *Physical Review Research*, 2(2):023358, 2020. URL: <https://arxiv.org/abs/2002.02973>.
- [HZL+17] He-Liang Huang, You-Wei Zhao, Tan Li, Feng-Guang Li, Yu-Tao Du, Xiang-Qun Fu, Shuo Zhang, Xiang Wang, and Wan-Su Bao. Homomorphic encryption experiments on ibm's cloud quantum computing platform. 2017. [arXiv:1612.02886](https://arxiv.org/abs/1612.02886).
- [HPM+19] William Huggins, Piyush Patil, Bradley Mitchell, K Birgitta Whaley, and E Miles Stoudenmire. Towards quantum machine learning with tensor networks. *Quantum Science and Technology*, 4(2):024001, Jan 2019. URL: <https://arxiv.org/abs/1803.11537>, doi:10.1088/2058-9565/aaea94.
- [Isi25] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31(1):253–258, 1925.
- [Jas55] Robert Jastrow. Many-body problem with strong forces. *Physical Review*, 98(5):1479, 1955.
- [KN98] Tadashi Kadowaki and Hidetoshi Nishimori. Quantum annealing in the transverse ising model. *Phys. Rev. E*, 58:5355–5363, Nov 1998. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.58.5355>, doi:10.1103/PhysRevE.58.5355.
- [KMT+17] Abhinav Kandala, Antonio Mezzacapo, Kristan Temme, Maika Takita, Markus Brink, Jerry M Chow, and Jay M Gambetta. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549(7671):242–246, 2017. URL: <https://www.nature.com/articles/nature23879>, doi:10.1038/nature23879.
- [KYG+07] Jens Koch, Terri M Yu, Jay Gambetta, A A Houck, D I Schuster, J Majer, Alexandre Blais, M H Devoret, S M Girvin, and R J Schoelkopf. Charge-insensitive qubit design derived from the Cooper pair box. *Physical Review A*, 10 2007. doi:10.1103/physreva.76.042319.
- [KKY+19] P Krantz, M Kjaergaard, F Yan, T P Orlando, S Gustavsson, and W D Oliver. A Guide to Superconducting Qubits for New Quantum Information Engineers. *Applied Physics Review*, 2019. [arXiv:1904.06560v1](https://arxiv.org/abs/1904.06560v1).
- [Lan50] Cornelius Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 1950.
- [LD10] Ailsa H Land and Alison G Doig. An automatic method for solving discrete programming problems. In *50 Years of Integer Programming 1958-2008*, pages 105–132. Springer, 2010.
- [LTG21] Junde Li, Rasit Topaloglu, and Swaroop Ghosh. Quantum generative models for small molecule drug discovery. 2021. [arXiv:2101.03438](https://arxiv.org/abs/2101.03438).
- [LJGS+90] EY Loh Jr, JE Gubernatis, RT Scalettar, SR White, DJ Scalapino, and RL Sugar. Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems. *Physical Review B*, 41(13):9301, 1990.
- [Lom04] Chris Lomont. The hidden subgroup problem-review and open problems. *arXiv preprint quant-ph/0411037*, 2004.
- [Luc14] Andrew Lucas. Ising formulations of many np problems. *Frontiers in physics*, 2:5, 2014. URL: <https://arxiv.org/abs/1302.5843>, doi:<https://doi.org/10.3389/fphy.2014.00005>.
- [MBK21] Andrea Mari, Thomas R. Bromley, and Nathan Killoran. Estimating the gradient and higher-order derivatives on quantum hardware. *Physical Review A*, 103(1):012405, Jan 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2008.06517>, doi:10.1103/physreva.103.012405.
- [MST17] Kyle Mills, Michael Spanner, and Isaac Tamblyn. Deep learning and the schrödinger equation. *Physical Review A*, 96(4):042113, 2017. URL: <https://arxiv.org/abs/1702.01361>.
- [MKF19] Kosuke Mitarai, Masahiro Kitagawa, and Keisuke Fujii. Quantum analog-digital conversion. *Phys. Rev. A*, 99:012301, Jan 2019. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.99.012301>, doi:10.1103/PhysRevA.99.012301.

- [MNKF18] Kosuke Mitarai, Makoto Negoro, Masahiro Kitagawa, and Keisuke Fujii. Quantum circuit learning. *Physical Review A*, 98(3):032309, Sep 2018. URL: <https://arxiv.org/abs/1803.00745>, doi:10.1103/PhysRevA.98.032309.
- [MRT18] Mehryar Mohri, Afshin Rostamizadeh, and Ameet Talwalkar. *Foundations of Machine Learning*. Adaptive Computation and Machine Learning. MIT Press, Cambridge, MA, 2 edition, 2018. ISBN 978-0-262-03940-6.
- [NSS+08] Chetan Nayak, Steven H. Simon, Ady Stern, Michael Freedman, and Sankar Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, 80(3):1083–1159, Sep 2008. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.80.1083>, doi:10.1103/revmodphys.80.1083.
- [New06] M. E. J. Newman. Modularity and community structure in networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(23):8577–8582, May 2006. URL: <https://arxiv.org/abs/physics/0602124>, doi:10.1073/pnas.0601602103.
- [RGM+17] Marco Roth, Marc Ganzhorn, Nikolaj Moll, Stefan Philipp, Gian Salis, and Sebastian Schmidt. Analysis of a parametrically driven exchange-type gate and a two-photon excitation gate between superconducting qubits. *Physical Review A*, 2017. doi:10.1103/PhysRevA.96.062323.
- [SZK+18] N. Samkharadze, G. Zheng, N. Kalhor, D. Brousse, A. Sammak, U. C. Mendes, A. Blais, G. Scappucci, and L. M. K. Vandersypen. Strong spin-photon coupling in silicon. *Science*, 359(6380):1123–1127, 2018. URL: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aar4054>, doi:10.1126/science.aar4054.
- [SRL12] Jacob T. Seeley, Martin J. Richard, and Peter J. Love. The bravyi-kitaev transformation for quantum computation of electronic structure. *The Journal of chemical physics*, 137(22):224109, 2012. URL: <https://arxiv.org/abs/1208.5986>.
- [SK75] David Sherrington and Scott Kirkpatrick. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35:1792–1796, Dec 1975. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.35.1792>, doi:10.1103/PhysRevLett.35.1792.
- [SB19] Semyon Sinchenko and Dmitry Bazhanov. The deep learning and statistical physics applications to the problems of combinatorial optimization. *arXiv preprint arXiv:1911.10680*, 2019. URL: <https://arxiv.org/abs/1911.10680>.
- [SCZ17] Robert S. Smith, Michael J. Curtis, and William J. Zeng. A practical quantum instruction set architecture. 2017. [arXiv:1608.03355](https://arxiv.org/abs/1608.03355).
- [SCBR14] Stanislav Sobolevsky, Riccardo Campari, Alexander Belyi, and Carlo Ratti. General optimization technique for high-quality community detection in complex networks. *Phys. Rev. E*, 90:012811, Jul 2014. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.012811>, doi:10.1103/PhysRevE.90.012811.
- [SBC+21] Samuel A. Stein, Betis Baheri, Daniel Chen, Ying Mao, Qiang Guan, Ang Li, Bo Fang, and Shuai Xu. Qugan: a generative adversarial network through quantum states. 2021. [arXiv:2010.09036](https://arxiv.org/abs/2010.09036).
- [SF14] Leonard Susskind and Art Friedman. *Quantum mechanics: the theoretical minimum*. Basic Books, 2014.
- [SYG+20] Yudai Suzuki, Hiroshi Yano, Qi Gao, Shumpei Uno, Tomoki Tanaka, Manato Akiyama, and Naoki Yamamoto. Analysis and synthesis of feature map for kernel-based quantum classifier. *Quantum Machine Intelligence*, 2(1):1–9, Jul 2020. URL: <https://arxiv.org/abs/1906.10467>, doi:10.1007/s42484-020-00020-y.
- [TKTD20] Alexander Teplukhin, Brian K Kendrick, Sergei Tretiak, and Pavel A Dub. Electronic structure with direct diagonalization on a d-wave quantum annealer. *Scientific reports*, 10(1):1–11, 2020.
- [VDS98] Jan Von Delft and Herbert Schoeller. Bosonization for beginners—refermionization for experts. *Annalen der Physik*, 7(4):225–305, 1998.
- [VD17] Uri Vool and Michel Devoret. Introduction to quantum electromagnetic circuits. *International Journal of Circuit Theory and Applications*, 45(7):897–934, 2017. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cta.2359>, doi:10.1002/cta.2359.

- [WSB+05] A. Wallraff, D. I. Schuster, A. Blais, L. Frunzio, J. Majer, M. H. Devoret, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf. Approaching unit visibility for control of a superconducting qubit with dispersive readout. *Physical Review Letters*, 95(6):060501, 8 2005. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.95.060501>, arXiv:0502645, doi:10.1103/PhysRevLett.95.060501.
- [WBD+19] K. Wright, K. M. Beck, S. Debnath, J. M. Amini, Y. Nam, N. Grzesiak, J. S. Chen, N. C. Pisenti, M. Chmielewski, C. Collins, K. M. Hudek, J. Mizrahi, J. D. Wong-Campos, S. Allen, J. Apisdorf, P. Solomon, M. Williams, A. M. Ducore, A. Blinov, S. M. Kreikemeier, V. Chaplin, M. Keesan, C. Monroe, and J. Kim. Benchmarking an 11-qubit quantum computer. *Nature Communications*, 10(1):1–6, dec 2019. arXiv:1903.08181, doi:10.1038/s41467-019-13534-2.
- [Zac77] Wayne W Zachary. An information flow model for conflict and fission in small groups. *Journal of anthropological research*, 33(4):452–473, 1977.
- [01] Кокин А. А. Валиев К. А. *Квантовые компьютеры: надежды и реальность*. НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2001.
- [89] Лифшиц Е. М. Ландау Л. Д. *Квантовая механика: Нерелятивистская теория*. Наука, 1989. URL: <https://www.math.purdue.edu/~eremenko/dvi/LL.pdf>.
- [15a] Иванов М.Г. *Как понимать квантовую механику*. Регулярная и хаотическая динамика, 2015. URL: <https://mipt.ru/upload/medialibrary/533/quant-2.pdf>.
- [07] Килин С. Я. Могилевцев Д. С. *Методы квантовой оптики структурированных резервуаров*. Белорусская наука, 2007. URL: <https://www.litres.ru/d-s-mogilevcev/metody-kvantovoy-optiki-strukturirovannyh-rezervuarov-7073607/>.
- [15b] Леонард Сасскинд and Арт Фридман. *Квантовая механика. Теоретический минимум*. СПб.: Питер, 2015.