



РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



Разработка квантовых алгоритмов и программного обеспечения

Федоров Алексей Константинович

PhD по физике, руководитель научной группы

«Квантовые информационные технологии»

Российского квантового центра

Цели и задачи ДК в части алгоритмов и ПО на 2021 год



Российский
Квантовый
Центр



№ ЦП в ДК	Наименование целевого показателя	Значение	Ответственный исполнитель
8.1.	Основные технологические показатели		
8.1.10.	Количество кубитов в эмуляторе квантового процессора с реалистичными моделями декогеренции	20	Федоров А.К.
8.1.11.	Количество экспериментов/работ, выполненных на облачной платформе	1000	Федоров А.К.

8.2.	Прочие технологические показатели		
8.2.5.	Количество квантовых алгоритмов (в т.ч. квантовая оптимизация, квантовая химия, квантовое моделирование, обработка больших данных) (нарастающим итогом)	5	Федоров А.К.
8.2.6.	Количество процессоров/эмуляторов с доступом к облачной платформе (нарастающим итогом)	3	Федоров А.К.
8.2.7.	Количество экспериментальных тестов с использованием облачной платформы в части тестирования кодов коррекции ошибок	10	Федоров А.К.
8.2.8.	Количество модулей облачной платформы для осуществления квантовых вычислений и разработки элементов различных уровней стека программного обеспечения (нарастающим итогом)	3	Федоров А.К.

8.2.5 Количество квантовых алгоритмов (5)



Российский
Квантовый
Центр

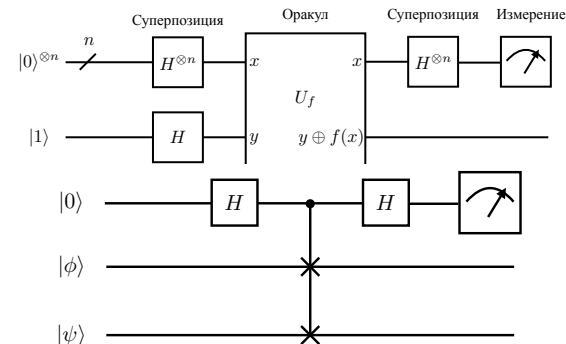


Реализация и верификация алгоритмов (стандартные квантовые алгоритмы, назначение: верификация квантовых вычислительных устройств и образование):

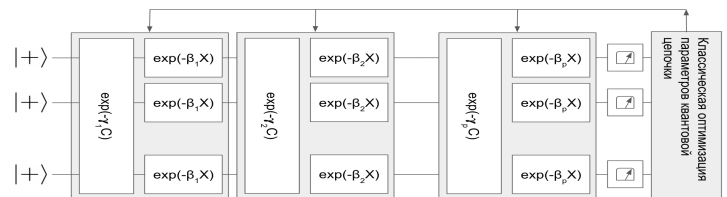
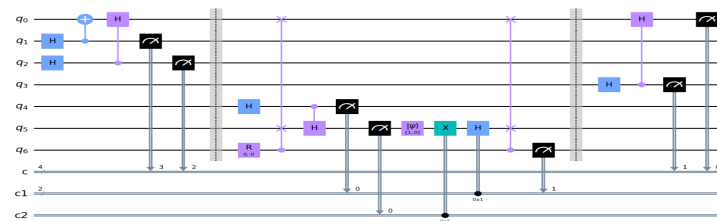
- Алгоритм **Дойча-Йожи** классификации сбалансированных и константных функций.
- Алгоритм **Саймона** определения периода булевой функции по отношению к операции «исключающее ИЛИ».
- Алгоритм **обменного теста** сравнения квантовых состояний.

Разработка, реализация и верификация алгоритмов (оригинальные квантовые алгоритмы, назначение: решение соответствующих прикладных задач приоритетных отраслей для внедрения СЦТ):

- Алгоритм **квантовой приближенной оптимизации для задачи MAX-3SAT** – Квантовая оптимизация
- Алгоритм **симуляции протокола квантового распределения ключей** – Защита информации (квантовые коммуникации, квантовая криптография)



Квантовые схемы реализованных алгоритмов

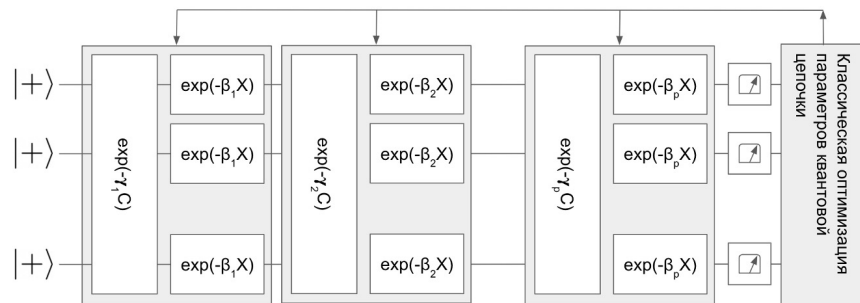


Квантовые схемы разработанных алгоритмов



Алгоритм квантовой приближенной оптимизации для задачи MAX-3SAT

Разработанный алгоритм квантовой приближенной оптимизации для NP-сложной задачи MAX-3SAT служит отправной точкой для дальнейшего развития вариационных алгоритмов применительно к различным задачам дискретной оптимизации. Целевая функция закладывается непосредственно в гамильтониан многочастичного взаимодействия, используемого в каждом из слоев вариационного анзаца. Также заложена возможность гибкого варьирования параметров алгоритма, включающих в себя числа слоев, количество запусков для вычисления значения целевой функции, и метода классической оптимизации



Алгоритм симуляции протокола квантового распределения ключей

Разработанный алгоритм может быть использован для демонстрации особенностей поведения квантовой информации в процессе ее передачи через открытый канал, анализа защищённости протокола квантового распределения ключей от атак злоумышленника, оценки скорости генерации симметричных ключей с учётом существующих процедур классической постобработки, а также бенчмаркинга квантовых процессоров.

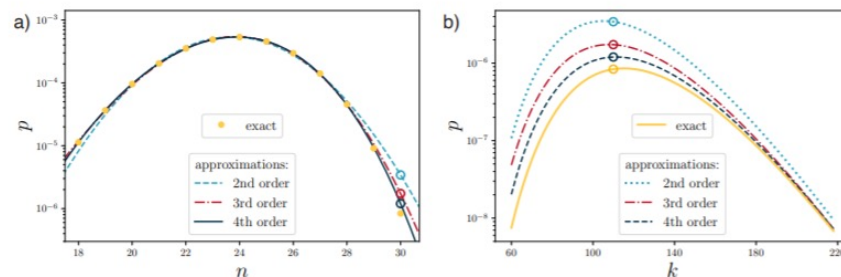
8.2.6 Количество процессоров / эмуляторов с доступом (3)

Реализован доступ Облачной платформы к 3 эмуляторам разработанным и верифицированным в рамках ДК эмуляторов (разрабатываются группой А. Рубцова), с использованием модуля интерфейсов доступа к квантовым эмуляторам :

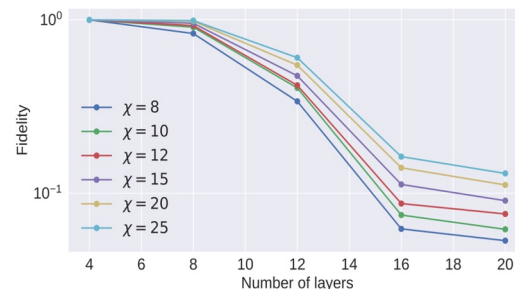
- Квантовый эмулятор бозонного сэмпинга с 20 модами
- Эмулятор идеального квантового процессора с 20 кубитами
- Первая версия эмулятора квантового процессора с выбором топологии и моделей декогеренции с 20 кубитами
- * Разработана перспективная технология приближенного моделирования квантовых процессоров на основе метода MERA (сейчас ведется эксперимент с 81 кубитом). Показано 99.7% точности выполнения каждой операции для 27 кубитов



Российский
Квантовый
Центр



Преодоление порога квантового превосходства для разработанного эмулятора бозонного сэмпинга с 20 модами



Зависимость перекрытия точной волновой функции квантового процессора и волновой функции рассчитанной с использованием тензорной сети MERA от числа слоев в квантовой программе и значения гиперпараметра

8.2.7 Количество экспериментальных тестов кодов коррекции ошибок (10)



Российский
Квантовый
Центр

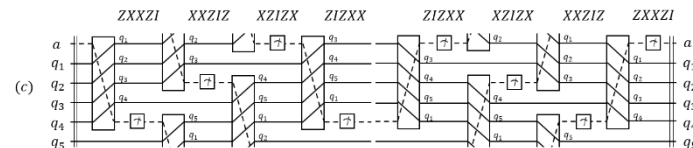
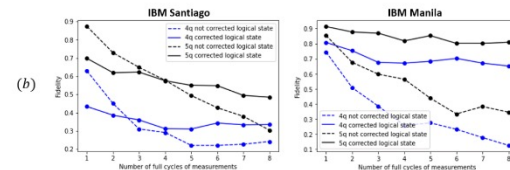
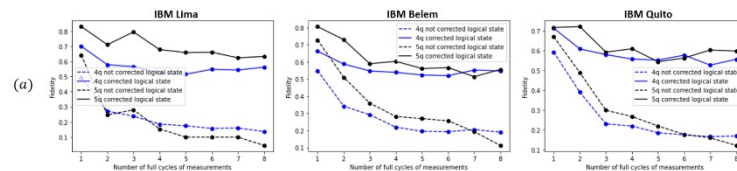
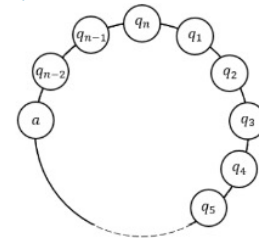


Разработаны собственные (оригинальные) методы коррекции и подавления ошибок:

- пятикубитный код коррекции ошибок для кругового типа соединений с одной анциллой для сохранения квантового состояния;
 - метод подавления ошибок на основе унитарных операций
- Верификация оригинального пятикубитного кода коррекции ошибок для кругового типа соединений с одной анциллой для сохранения квантового состояния путем экспериментальных тестов на доступном эмуляторе (QasmSimulator).

Экспериментальные тесты (10) проведены с использованием доступного эмулятора для различных параметров известного кода коррекции ошибок с повторением для кругового типа соединения с одной анциллой для сохранения квантового состояния.

Выявлены параметры функционирования кодов, обеспечивающих повышение точности восстановления сохраняемого состояния не менее, чем на 1%



8.2.7 Количество экспериментальных тестов кодов коррекции ошибок (10)



РКЦ

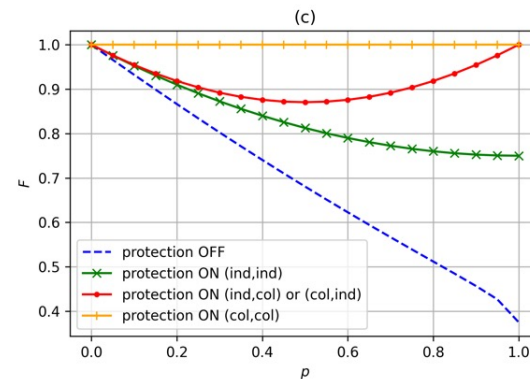
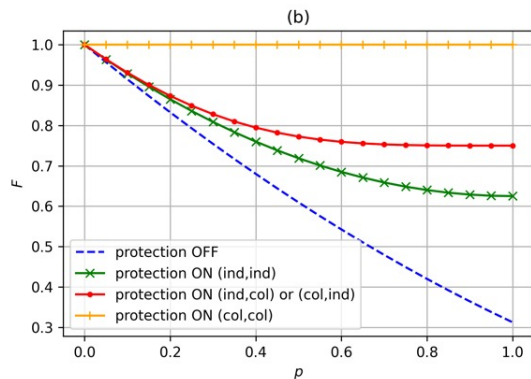
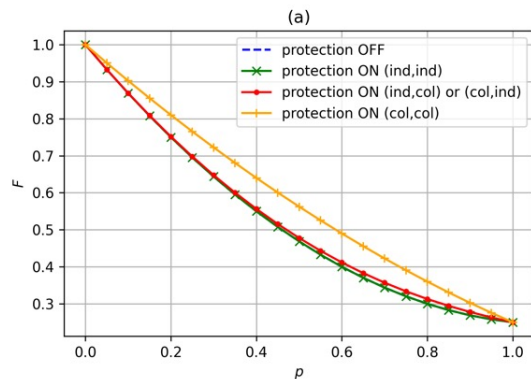
Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ

Разработан метод подавления ошибок на основе применения унитарных операций для многокубитных квантовых состояний, отдельный кубит которых подвергается действию каналов декогеренции.

Рассмотрено обобщение метода на случай действия каналов декогеренции на все кубиты состояния одновременно.



Структурная схема облачной платформы



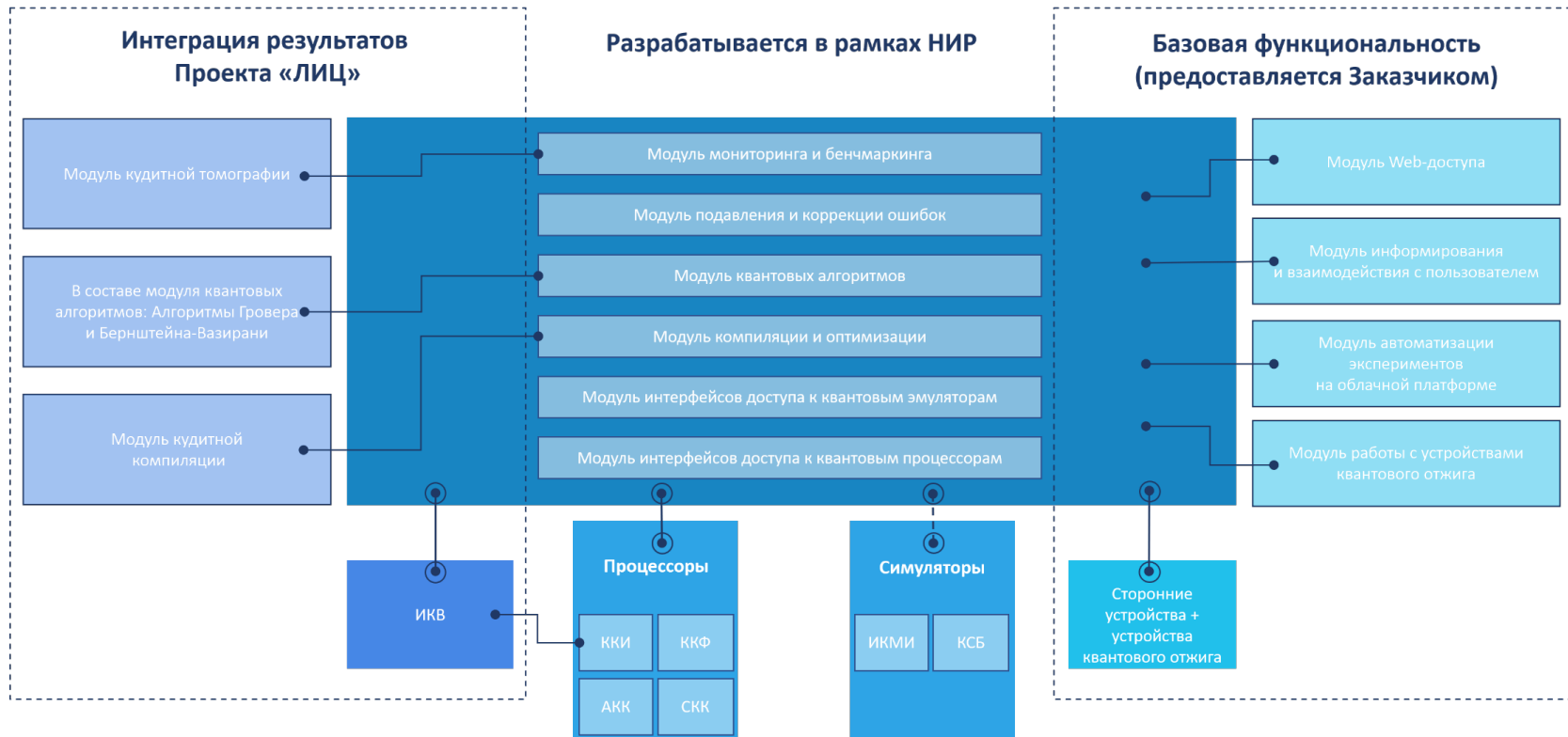
РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ

Облачная платформа квантовых вычислений



8.2.8 Количество модулей облачной платформы (3)

В 2021 году разработана общая архитектура облачной платформы.

Проведена разработка и верификация 3 модулей платформы:

- модуль подавления и коррекции ошибок;
- модуль квантовых алгоритмов;
- модуль интерфейсов доступа к квантовым эмуляторам.

8.1.10 Количество кубитов в эмуляторе квантового процессора (20)

Достижение показателя по количеству кубитов в эмуляторе продемонстрировано с использованием первой версии эмулятора квантового процессора с выбором топологии и моделей декогеренции путем запуска разработанного программного кода для 20-кубитной цепочки.

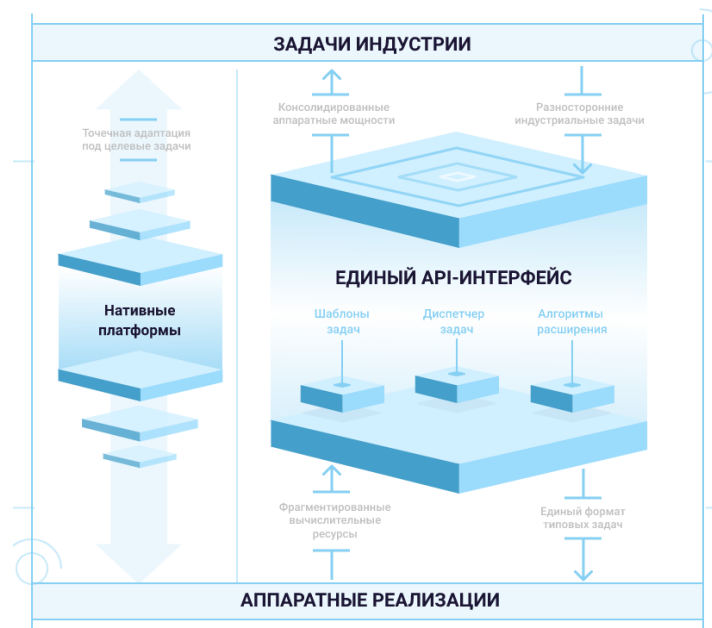


РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ



8.1.11 Количество экспериментов, выполненных на облачной платформе (1000)



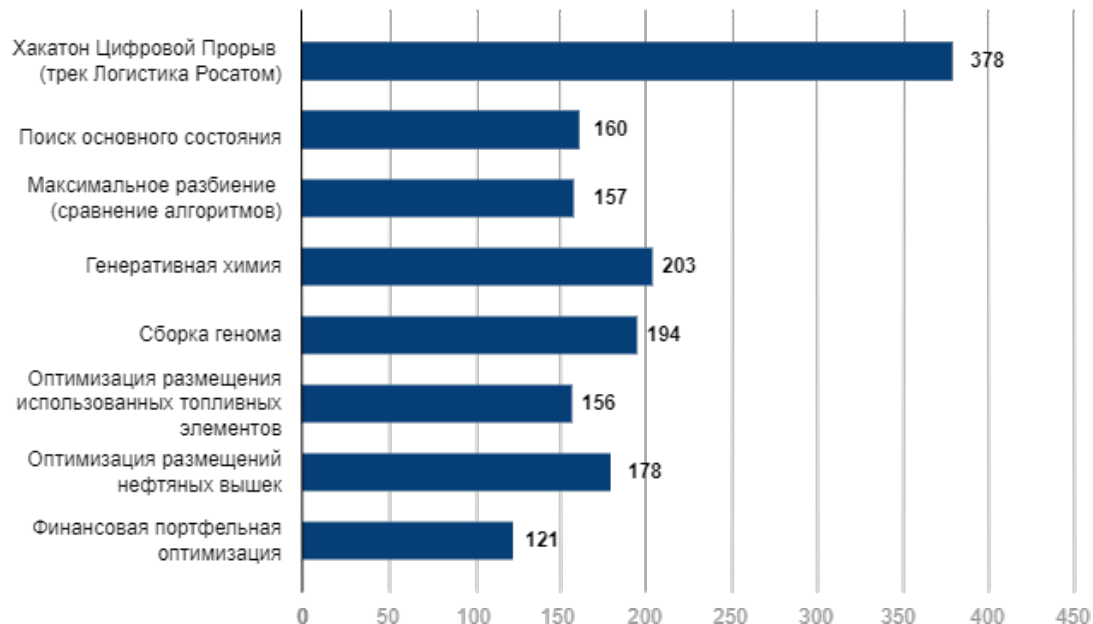
РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ

В 2021 году в пилотном режиме проведено 1547 экспериментов, с использованием модулей базовой функциональности облачной платформы



Цифровой
прорыв

РОССИЯ –
СТРАНА
ВОЗМОЖНОСТЕЙ

Хакатон

Транспорт
и логистика

Кейс:
Разработка оптимального
маршрута передвижения
по городу с помощью
квантового компьютера

Целевые показатели



Российский
Квантовый
Центр



Задачи, поставленные в 2021 году в рамках НИОКР в части разработки квантовых алгоритмов и квантового программного обеспечения выполнены в полном объеме. Все плановые Целевые показатели достигнуты.

№ ЦП в ДК	Наименование целевого показателя	Плановое значение показателя	Фактическое значение показателя	Процент выполнения
8.1.10.	Количество кубитов в эмуляторе квантового процессора с реалистичными моделями декогеренции	20	20	100%
8.1.11.	Количество экспериментов/работ, выполненных на облачной платформе	1000	1547	155%
8.2.5.	Количество квантовых алгоритмов (в т.ч. квантовая оптимизация, квантовая химия, квантовое моделирование, обработка больших данных) (нарастающим итогом)	5	5	100%
8.2.6.	Количество процессоров/эмуляторов с доступом к облачной платформе (нарастающим итогом)	3	3	100%
8.2.7.	Количество экспериментальных тестов с использованием облачной платформы в части тестирования кодов коррекции ошибок	10	10	100%
8.2.8.	Количество модулей облачной платформы для осуществления квантовых вычислений и разработки элементов различных уровней стека программного обеспечения (нарастающим итогом)	3	3	100%

Для результатов работ 2021 года показана как научная, так и практическая значимость.



Научная значимость подтверждается подготовленными научными публикациями, а также апробацией результатов работы на профильных конференциях.

- Разработан метод приближенного моделирования квантовых вычислений на классическом компьютере с применением тензорных сетей и методов машинного обучения, а также для задач бозонного сэмплинга [1, 2]
- Разработана модель для описания одномерных квантовых систем [3]
- Разработана модель динамики нелинейных квантово-оптических систем [4]
- Предложен новый квантовый алгоритм для классификации [5]
- Предложен новый метод компиляции квантовых алгоритмов [6].
- Предложен новый способ реализации класса кодов коррекции ошибок (публикация планируется в июле 2022 года).



Практическая значимость работ подтверждается использованием полученных результатов для прототипирования методов решения востребованных задач. Проведение аналитического обзора квантовых алгоритмов для приложений биоинформатики и моделирования материалов



- Новая платформа квантовых вычислений на основе поляритонов:
 - *Y. Xue, I. Chestnov, E. Sedov, E. Kiktenko, A.K. Fedorov, S. Schumacher, X. Ma, and A. Kavokin, Split-ring polariton condensates as macroscopic two-level quantum systems, Physical Review Research 3, 013099 (2021); arXiv:1907.00383.*
- Разработан метод приближенного моделирования квантовых вычислений на классическом компьютере с применением тензорных сетей и методов машинного обучения, а также для задач бозонного сэмпинга:
 - *I.A. Luchnikov, A.V. Berezutskii, and A.K. Fedorov, Simulating quantum circuits using the multi-scale entanglement renormalization ansatz, arXiv:2112.14046.*
 - *A. S. Popova and A.N. Rubtsov, Cracking the quantum advantage threshold for Gaussian boson sampling, arXiv:2106.01445.*
- Разработана модель для описания одномерных квантовых систем:
 - *A.S. Mastiukova, D.V. Kurlov, V. Gritsev, and A.K. Fedorov, Free Fock parafermions in the tight-binding model with dissipation, arXiv:2203.03554.*
- Разработана модель динамики нелинейных квантово-оптических систем:
 - *L.R. Bakker, M.S. Bahovadinov, D.V. Kurlov, V. Gritsev, A.K. Fedorov, and D.O. Krimer, Driven-dissipative time crystalline phases in a two-mode bosonic system with Kerr nonlinearity, arXiv:2204.07533.*
- Предложен новый квантовый алгоритм для классификации:
 - *D. Bokhan, A.S. Mastiukova, A.S. Boev, D.N. Trubnikov, and A.K. Fedorov, Multiclass classification using quantum convolutional neural networks with hybrid quantum-classical learning, arXiv:2203.15368.*
- Предложен новый метод компиляции квантовых алгоритмов
 - *N.A. Nemkov, E.O. Kiktenko, I.A. Luchnikov, and A.K. Fedorov, Efficient variational synthesis of quantum circuits with coherent multi-start optimization, arXiv:2205.01121.*
- Предложен новый способ реализации класса кодов коррекции ошибок (публикация планируется в июле 2022 года).

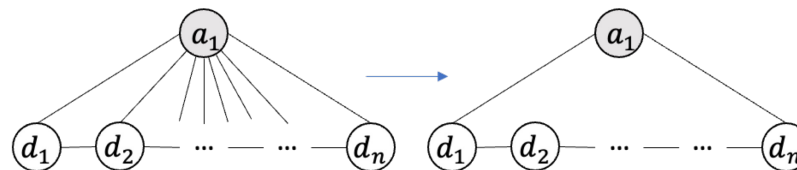
Приложение: коды коррекции ошибок



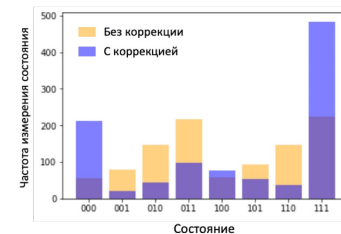
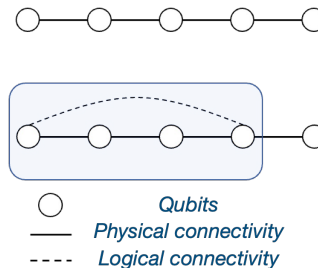
Российский
Квантовый
Центр



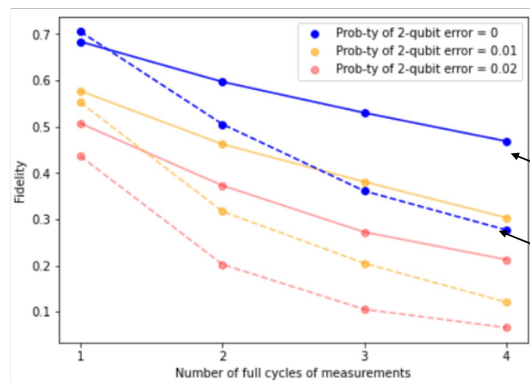
- Wide class of codes (Special structure of stabilisers)
- Circle-like connectivity (no all-to-all / ancilla-to-all)
- Low-noise two-qubit gates
- New efficient decoding system



3-qubit code



5-qubit code



Correction

No correction

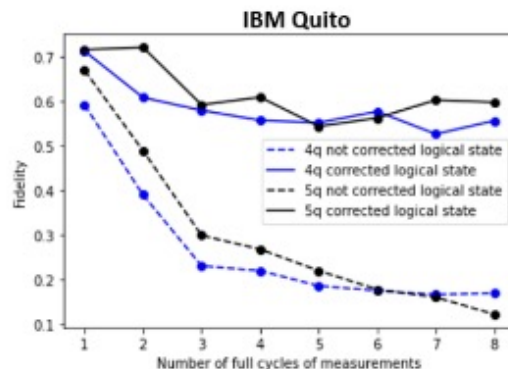
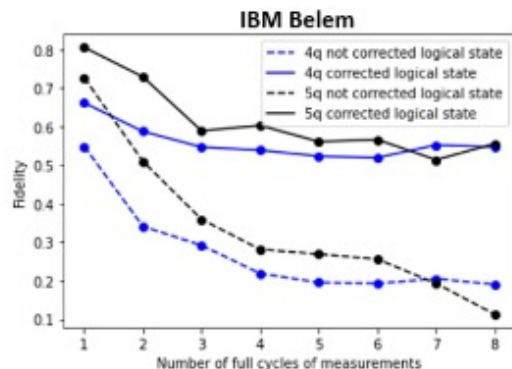
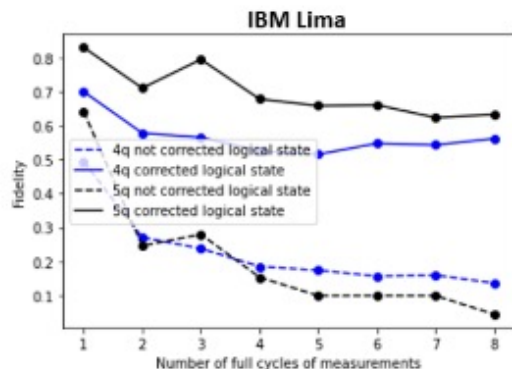
Приложение: коды коррекции ошибок



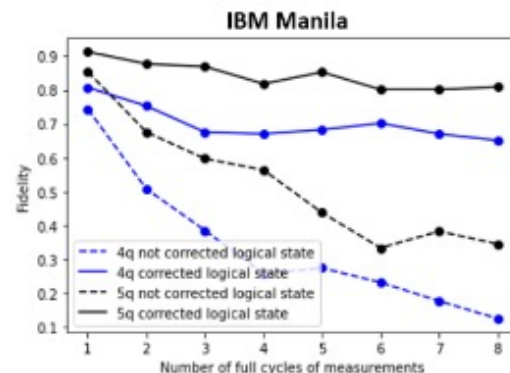
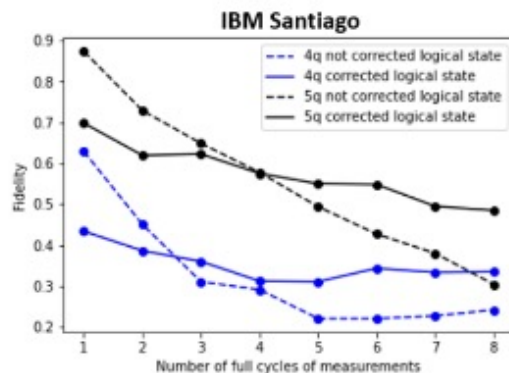
Российский
Квантовый
Центр

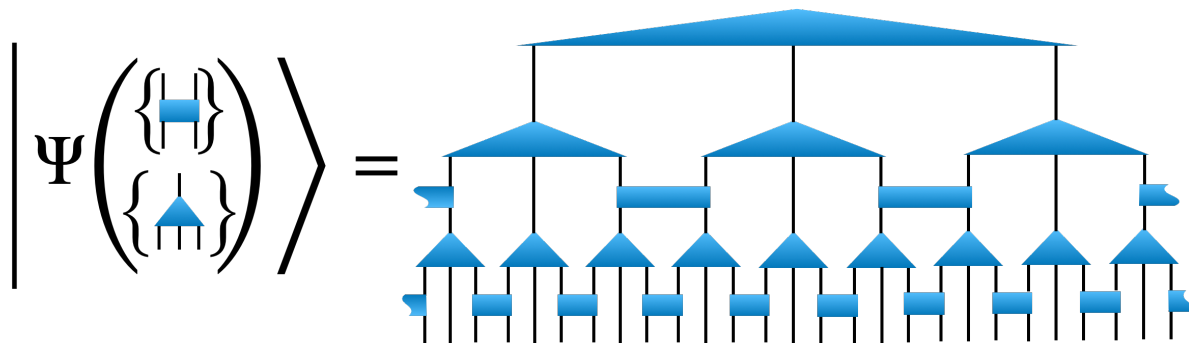


(a)

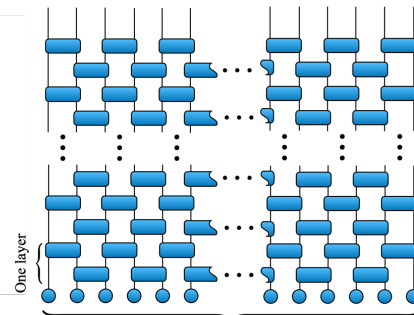
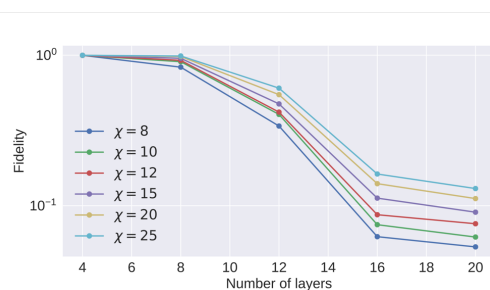


(b)





- periodic boundary conditions;
- normalized states;
- update of the ansatz;
- “compression” parameters (χ);
- maximising fidelity.



Приложение: интерфейс платформы

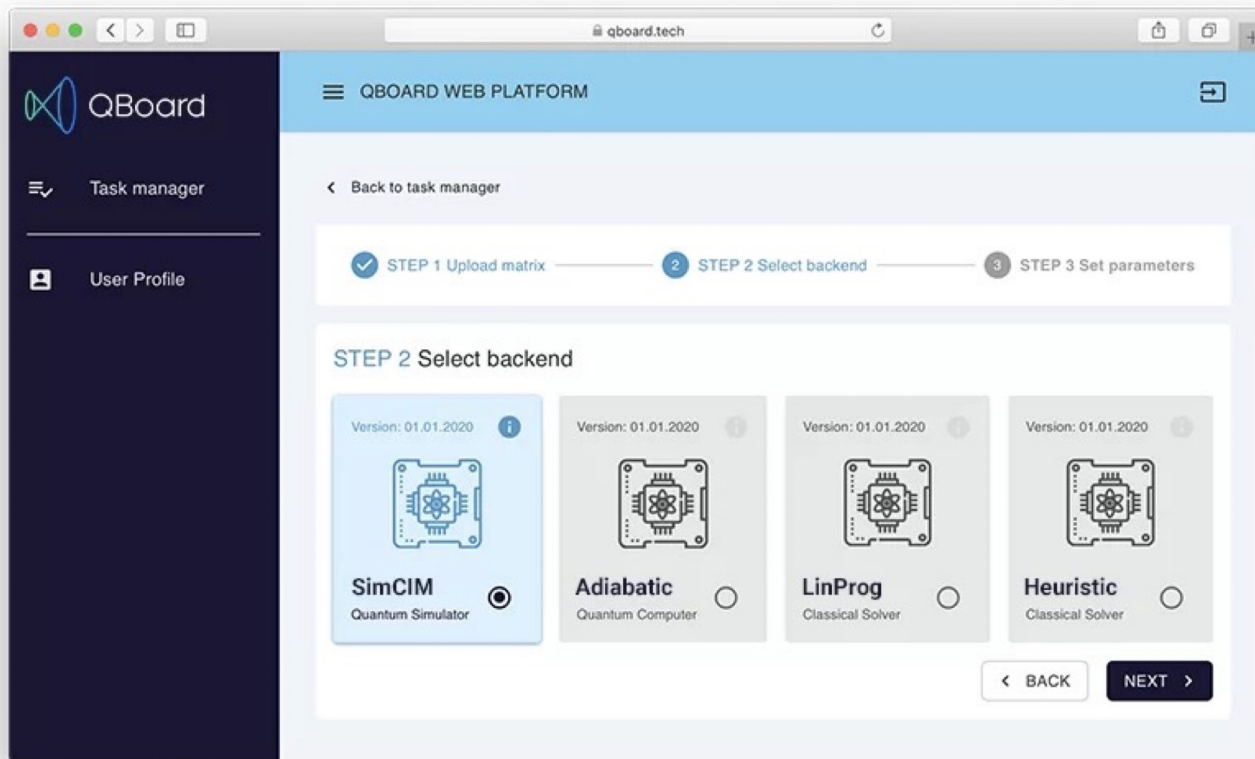


РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM



Приложение: интерфейс платформы



Российский
Квантовый
Центр



RQC | Russian Quantum Center

Dashboard

Tasks

Circuits

Services

Dashboard

Recent tasks

NEW

IN PROGRESS

COMPLETED

Task 201

Completed 10.04.2021 at 12:21:54

Task 200

Completed 10.04.2021 at 12:19:18

Task 199

Completed 10.04.2021 at 11:49:39

Task 198

Completed 10.04.2021 at 11:49:25

Task 197

Completed 09.28.2021 at 13:04:25

[All tasks](#)

NEW TASK

API key

.....

Add news

News

30.04

[Link](#)

Компания QBoard была представлена в аналитическом материале о перспективны...

15.04

[Link](#)

Читайте интервью с руководителем по стратегии QBoard Alex Fedorov в блоге ком...

11.03

[Link](#)

Российский квантовый центр, организация, спин-оффом которой является QBoard вош...

[Terms of use](#) [Privacy Policy](#)

Technical support

Приложение: интерфейс платформы



РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ

RQC | Russian Quantum Center

Dashboard

Tasks

Circuits

Services

New task



Select the type of compute service:

Gate Model

Universal computing model with a wide range of basic operations

Adiabatic Model

Highly available and mature quantum computing model

Next

[Terms of use](#) [Privacy Policy](#)

[Technical support](#)

Приложение: работа в рамках ЛИЦ

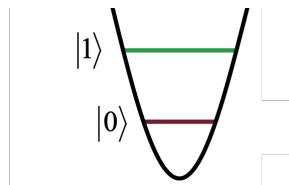


Российский
Квантовый
Центр

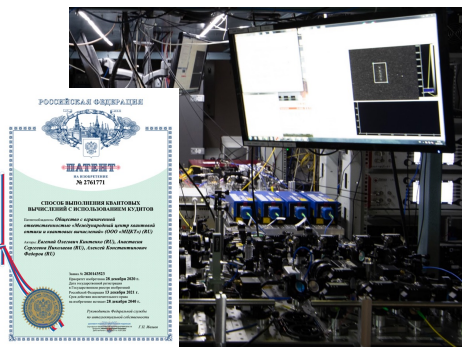


- Традиционный подход – использование кубитов: квантовых аналогов битов: «0» или «1» в случае бита; и «0», и «1» в случае кубита.
- Реальные системы (атомы, сверхпроводниковые контакты, фотоны) содержат более 2 уровней, поэтому они являются кудитами (многоуровневыми системами, позволяющими создавать более сложные логические состояния).
- С 2015 года* в России ведутся активные исследования по разработке квантовых алгоритмов на основе кудитов.
- В 2021 году в мире было продемонстрировано 3 кудитных процессора:
 - AQT (Австрия) – ионы,
 - Rigetti (США) – сверхпроводники;
 - РКЦ / ФИАН (Россия) – ионы.
- В 2021 год был получен патент на реализацию квантового процессора на основе кудитов, а также создан компилятор для квантовых алгоритмов.
- Использование кудитов в рамках ДК утверждено Методикой Минцифры России

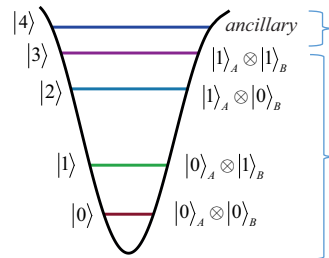
Кубит: идеализация
физической системы,
«забываем» про другие уровни



Ионный кудитный процессор:
2 иона-кукварта, 4 кубита



Кудит: реальная
(многоуровневая) система,
используем доп. уровни



Дополнительны
й уровень-
«буфер» для
хранения
информации

Почему кудиты?

- большее количество носителей информации при фиксированном количестве физических объектов (атомов, ионов, сверхпроводников), 2 кудита с 4 уровнями = 4 кубита;
 - выше точность двухкубитных операций внутри одного кудита (их точность практически равна однокубитным).
- Результат:** более эффективные реализации квантовых алгоритмов с точки зрения количества и качества операций.

* E.O. Kiktenko, A.K. Fedorov, A.A. Strakhov, and V.I. Man'ko, Single qudit realization of the Deutsch algorithm using superconducting many-level quantum circuits, *Physics Letters A* 379, 1409–1413 (2015); E.O. Kiktenko, A.K. Fedorov, O.V. Man'ko, and V.I. Man'ko, Multilevel superconducting circuits as two-qubit systems: Operations, state preparation, and entropic inequalities, *Physical Review A* 91, 042312 (2015).

Приложение: работа в рамках ЛИЦ

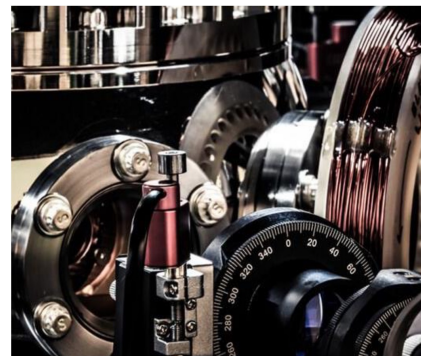
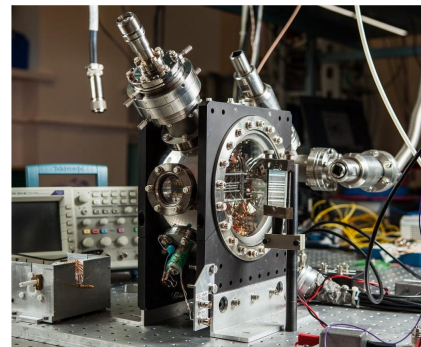


РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



РОСАТОМ



Облачная платформа доступа к квантовому процессору на основе ионов

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



PKC

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM

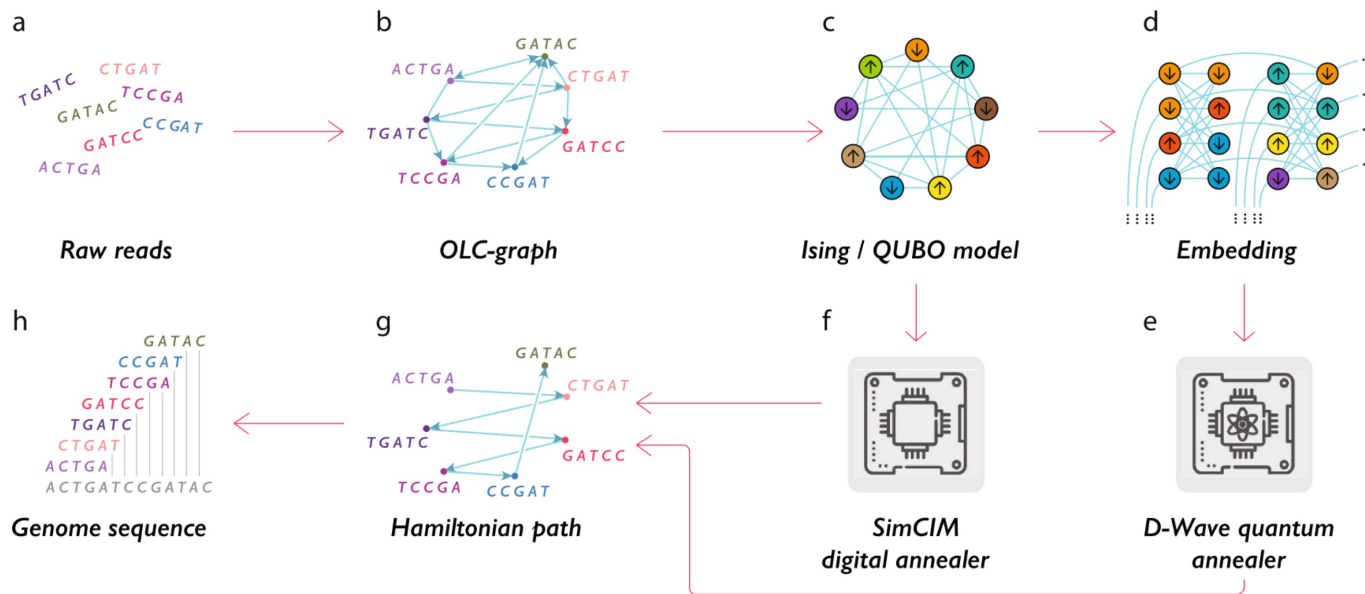


Figure 1. Solving the *de novo* genome assembly problem using quantum annealers and quantum-inspired (digital) annealing algorithms: (a) raw reads; (b) raw reads are transformed to the overlap-layout-consensus (OLC) graph; (c) finding the Hamiltonian path for the OLC graph is reduced to the QUBO problem; (d) the QUBO problem should be embedded to the architecture of the quantum annealer (D-Wave): for this purpose each logical variable of the the QUBO problem is assigned with several qubits of the quantum annealer; (e) and (f) the Ising problem in QUBO form can be solved using quantum annealers (D-Wave) and quantum-inspired algorithms (SimCIM), correspondingly; (g) the output is the Hamiltonian path; (h) the genome sequence is obtained as the solution.

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



ПКЦ

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM

Experiments characteristics:

- annealing time = 20 microseconds;
- annealing runs = 10^3 ;
- standard configurations of the processor.

		Mean, μs	Min, μs	Max, μs	90%
Quantum annealer	CPU	8483	8314	8619	8579
	QPU	535	369	672	600
Quantum-inspired annealer (SimCIM)		262	9.9	7212	1061

Table 1. Genome assembly time for ϕX 174 bacteriophage for 1000 instances. For the data based on experiments with quantum annealers we highlight required classical processor unit (CPU) time and quantum processor unit (QPU) time.

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



РКЦ

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM

	Train set	D-Wave sampl. (75 epochs)	Gibbs sampl. (75 epochs)	Gibbs sampl. (300 epochs)
MW	409.99	374.16	397.81	416.14
LogP	3.41	3.68	3.64	3.61
QED	0.54	0.54	0.54	0.52
SAS	2.96	3.12	3.04	3.13
Validity	1.0	0.54	0.55	0.69

Table I. The parameters of distributions of basic physical and medicinal chemistry properties of the molecules produced by the generative models discussed in this work. The entries in the table are mean values computed with the help of RDKit library [29] to obtain the molecular weight (MW), LogP, QED, and the synthetic accessibility score (SAS) [28].

We kept track of molecular weight (MW), the water-octanol partition coefficient (logP), the synthetic accessibility, and drug-likeness (QED) scores; we generated 2331 novel chemical structures with medicinal chemistry and synthetic accessibility properties in the ranges typical for molecules from ChEMBL.

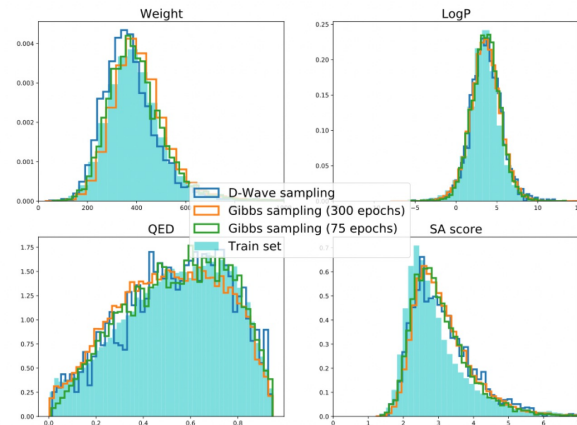


Figure 3. Distributions of basic physical and medicinal chemistry properties of the molecules produced by the proposed generative models discussed (same as in Table I).

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



Российский
Квантовый
Центр

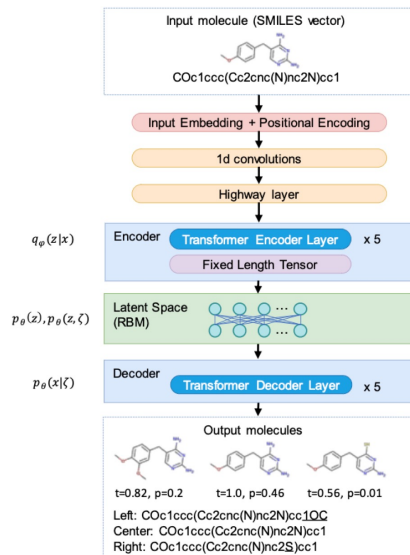


Figure 1. Scheme of the DVAE learning a joint probability distribution over the molecular structural features x and their latent variable-representations (discrete z and continuous ζ). Here, $q_\phi(z|x)$ and $p_\theta(x|\zeta)$ are the encoder and decoder distributions, respectively, whereas $p_\theta(z)$ is the prior distribution in the latent variable space and is approximated by RBM. We provide an example of reconstruction of a target molecule (diaveridine) using Gibbs-300 model saved after 300 epochs of training (here t is the Tanimoto similarity between the initial molecule and its reconstruction, $t = 1.0$ corresponds to perfect reconstruction, p is the output probability).

The model learns useful representations of chemical structures from ChEMBL, which is the manually curated database of biologically active molecules with drug-like properties

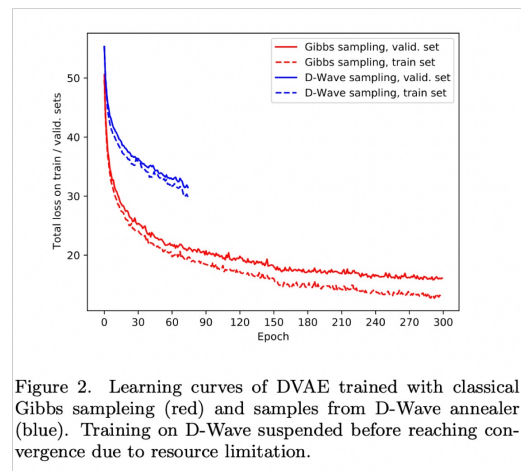
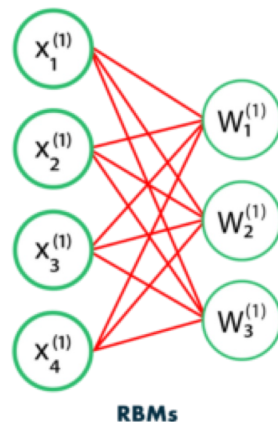


Figure 2. Learning curves of DVAE trained with classical Gibbs sampling (red) and samples from D-Wave annealer (blue). Training on D-Wave suspended before reaching convergence due to resource limitation.

The two layers of RBM contain 128 units each since an RBM of precisely this size could be sampled on readily available quantum annealers.

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



PKC

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM

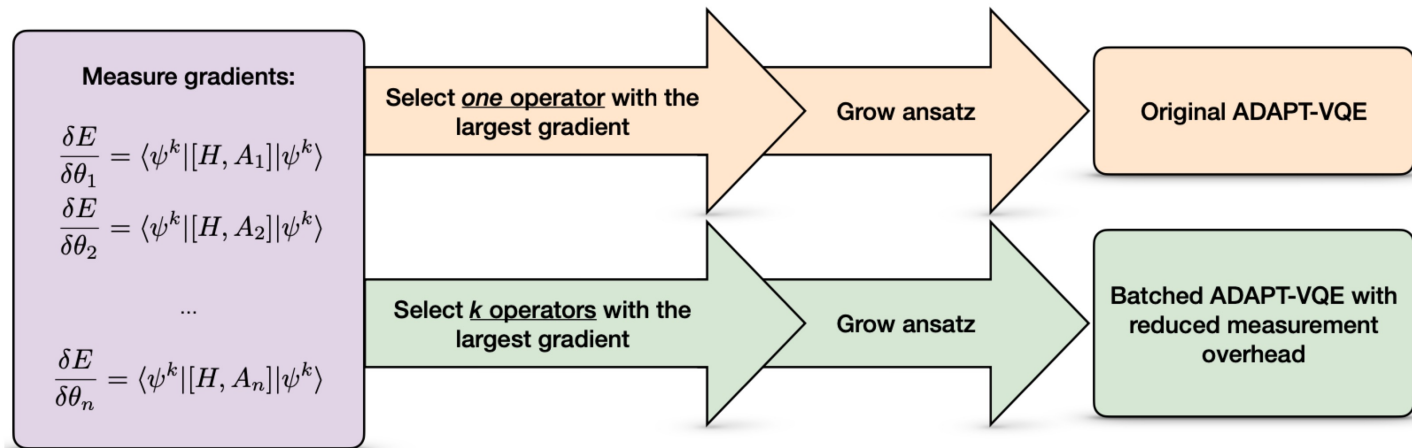


Figure 1. **Scheme of the ansatz growing procedure in original and batched ADAPT-VQE.** At each iteration, the original ADAPT-VQE adds a single operator with the largest gradient value. In our implementation of batched ADAPT-VQE, at each step of the ansatz growing procedure we add multiple operators with largest gradients; k is the number of gradients that differ from the largest one by less than r .

Приложение: работа над квантовыми алгоритмами для задач индустрии



PKC

Российский
Квантовый
Центр



POCATOM

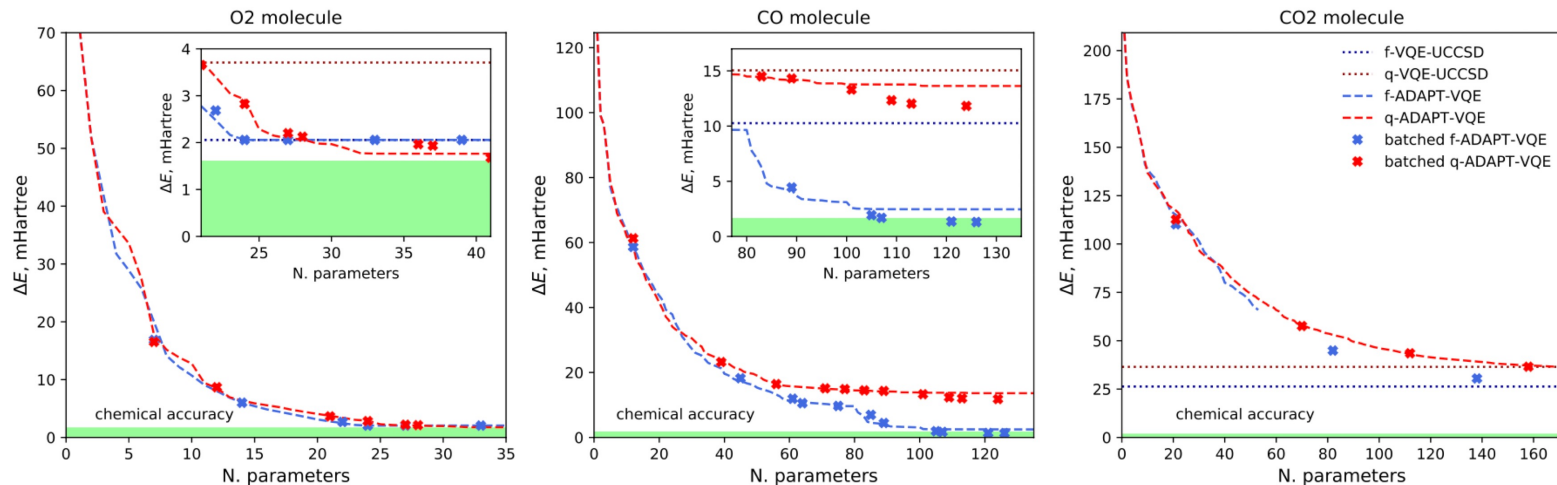


Figure 3. **Energy convergence for the considered implementations of ADAPT-VQE and VQE-UCCSD methods for O₂ (a), CO (b) and CO₂ (c) molecules.** We run batched ADAPT-VQE for all molecules beyond the simulation of original ADAPT-VQE. While for O₂ and CO molecules the original implementation converges, batched implementation continues to improve the energy. For CO₂, the original ADAPT-VQE takes infeasible amount of time, while batched version is much faster. We run limited iterations of the original ADAPT-VQE implementation to verify the similarity with batched ADAPT-VQE convergence.