

# Проблемы квантового ускорения для алгоритмов, реализуемых на NISQ - процессорах.

*Бетеров Илья Игоревич (ИФП СО РАН, НГУ, ИЛФ СО РАН, НГТУ), Ашкарин Иван Николаевич, Журавлев Никита Алексеевич (НГУ, ИФП СО РАН), к.ф.-м.н. Дучков Антон Альбертович (ИНГГ СО РАН, НГУ), член-корр. РАН Рябцев Игорь Ильич (ИФП СО РАН).*

# Шумные квантовые компьютеры промежуточного масштаба (NISQ)

## Quantum Computing in the NISQ era and beyond

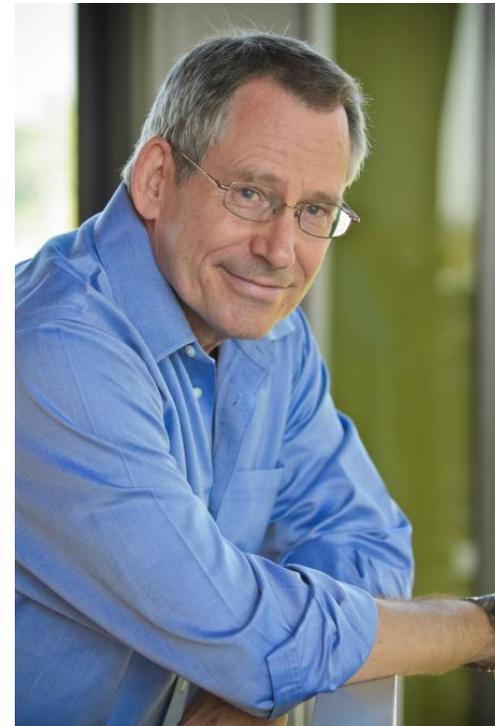
John Preskill

*Institute for Quantum Information and Matter  
California Institute of Technology, Pasadena CA 91125, USA*

27 January 2018

### Abstract

Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) technology will be available in the near future. Quantum computers with 50-100 qubits may be able to perform tasks which surpass the capabilities of today's classical digital computers, but noise in quantum gates will limit the size of quantum circuits that can be executed reliably. NISQ devices will be useful tools for exploring many-body quantum physics, and may have other useful applications, but the 100-qubit quantum computer will not change the world right away — we should regard it as a significant step toward the more powerful quantum technologies of the future. Quantum technologists should continue to strive for more accurate quantum gates and, eventually, fully fault-tolerant quantum computing.



# Тезисы Прескилла

**Квантовая информатика – новый фронт в физических исследованиях**

**Впервые в истории у нас появились возможности создавать и управлять перепутанными состояниями многочастичных квантовых систем**

**Принцип квантовой сложности и квантовой коррекции ошибок**

**Преимущества квантовых компьютеров: существование квантовых алгоритмов для классически неразрешимых задач, теория сложности, невозможность моделирования квантового компьютера на классическом**

**Промежуточный этап: 50–100 кубитов с точностью лучше 1%**

# NISQ

**Архитектура современных процессоров: связи между отдельными кубитами (не всеми)**

**Небольшая глубина алгоритмов (из-за ошибок)**

**Частичное использование коррекции ошибок**

**Классические вычисления и использование «квантового ядра» для вычислительно сложных элементов алгоритма**

# NISQ arXiv:2101.08448v2

## Noisy intermediate-scale quantum (NISQ) algorithms

Kishor Bharti,<sup>1, \*</sup> Alba Cervera-Lierta,<sup>2,3, \*</sup> Thi Ha Kyaw,<sup>2,3, \*</sup> Tobias Haug,<sup>4</sup> Sumner Alperin-Lea,<sup>3</sup> Abhinav Anand,<sup>3</sup> Matthias Degroote,<sup>2,3,5</sup> Hermanni Heimonen,<sup>1</sup> Jakob S. Kottmann,<sup>2,3</sup> Tim Menke,<sup>6,7,8</sup> Wai-Keong Mok,<sup>1</sup> Sukin Sim,<sup>9</sup> Leong-Chuan Kwek,<sup>1,10,11, †</sup> and Alán Aspuru-Guzik<sup>2,3,12,13, ‡</sup>

<sup>1</sup>*Centre for Quantum Technologies, National University of Singapore 117543, Singapore*

<sup>2</sup>*Department of Computer Science, University of Toronto, Toronto, Ontario M5S 2E4, Canada*

<sup>3</sup>*Chemical Physics Theory Group, Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario M5G 1Z8, Canada*

<sup>4</sup>*QOLS, Blackett Laboratory, Imperial College London SW7 2AZ, UK*

<sup>5</sup>*current address: Boehringer Ingelheim, Amsterdam, Netherlands*

<sup>6</sup>*Department of Physics, Harvard University, Cambridge, MA 02138, USA*

<sup>7</sup>*Research Laboratory of Electronics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA*

<sup>8</sup>*Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139, USA*

<sup>9</sup>*Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University, Cambridge, MA 02138, USA*

<sup>10</sup>*MajuLab, CNRS-UNS-NUS-NTU International Joint Research Unit UMI 3654, Singapore*

<sup>11</sup>*National Institute of Education and Institute of Advanced Studies, Nanyang Technological University 637616, Singapore*

<sup>12</sup>*Vector Institute for Artificial Intelligence, Toronto, Ontario M5S 1M1, Canada*

<sup>13</sup>*Canadian Institute for Advanced Research, Toronto, Ontario M5G 1Z8, Canada*

# Теория сложности arXiv:2101.08448v2

**EXPTIME:** classically solvable in exponential time  
*Unrestricted chess on an  $n \times n$  board*

**PSPACE:** classically solvable in polynomial space  
*Restricted chess on an  $n \times n$  board*

**QMA:** quantumly verifiable in polynomial time

**NP:** classically verifiable in polynomial time

**NP-Complete:** hardest problems in NP  
*Traveling salesman problem*

**P:** classically solvable in polynomial time  
*Testing whether a number is prime*

*Integer factorization*

**BQP:** quantumly solvable in polynomial time

**QMA-Complete:** hardest problems in QMA  
*Quantum Hamiltonian ground state problem*

**P** – задача решается за полиномиальное время  
**NP** – решение проверяется за полиномиальное время  
**BPP** – решается на вероятностной машине Тьюринга за полиномиальное время  
**BQP** – решается на квантовом компьютере, если вероятность правильного выхода  $2/3$

# Типы квантовых алгоритмов

arXiv:1804.03719v2

Основные парадигмы:

- Оператор Гровера (GO)
- Квантовое преобразование Фурье (QFT)
- Алгоритм Харроу - Хассидим - Ллойда (HHL)
- Вариационный поиск собственных значений (VQE)
- Прямое моделирование гамильтониана (SIM)

# Типы квантовых алгоритмов

arXiv:1804.03719v2

Класс	Проблема/алгоритм	Инструмент
Расчет обратной функции	Алгоритм Гровера Алгоритм Бернштейна-Вазириани	GO n/a
Теория чисел	Алгоритм Шора	QFT
Алгебраические задачи	Системы линейных уравнений Матричные элементы представления группы Проверка произведения матриц Изоморфизм подгрупп	NNL QFT  GO QFT
Графы	Квантовые случайные блуждания Минимальное остовное дерево Задача о максимальном потоке Приблизительные квантовые алгоритмы	n/a GO GO SIM
Машинное обучение	Квантовый метод главных компонент Квантовый метод опорных векторов Статистическая сумма	QFT QFT QFT

# Типы квантовых алгоритмов

arXiv:1804.03719v2

Класс	Проблема/алгоритм	Инструмент
Квантовое моделирование	Моделирование уравнения Шрёдингера	SIM
	Поперечная модель Изинга	VQE
Вспомогательные алгоритмы	Приготовление начального состояния	
	Квантовая томография	
	Квантовая коррекция ошибок	

# Вариационный поиск собственных значений

Гамильтониан: 
$$H = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Для произвольного состояния: 
$$\langle H \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i \langle \psi | \psi_i \rangle^2$$

Минимальное значение энергии: 
$$\langle H \rangle_{\psi_{\min}} = \langle \psi_{\min} | \hat{H} | \psi_{\min} \rangle = \lambda_{\min}$$

Преобразование анзаца: 
$$\hat{U}(\theta)|\psi\rangle \quad \hat{U}3 = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -e^{i\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i\lambda+i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle \text{ --- } \boxed{U3(\theta, \phi, \lambda)} \text{ --- } U(\theta, \phi, \lambda) |\psi\rangle$$

# Приложения NISQ алгоритмов

Физика многочастичных систем и квантовая химия  
 определение энергии молекул  
 анализ механизмов химических реакций  
 вариационные квантовые симуляторы

Квантовое машинное обучение

Комбинаторная оптимизация (графы)

Решение вычислительных задач (факторизация, решение систем линейных уравнений)



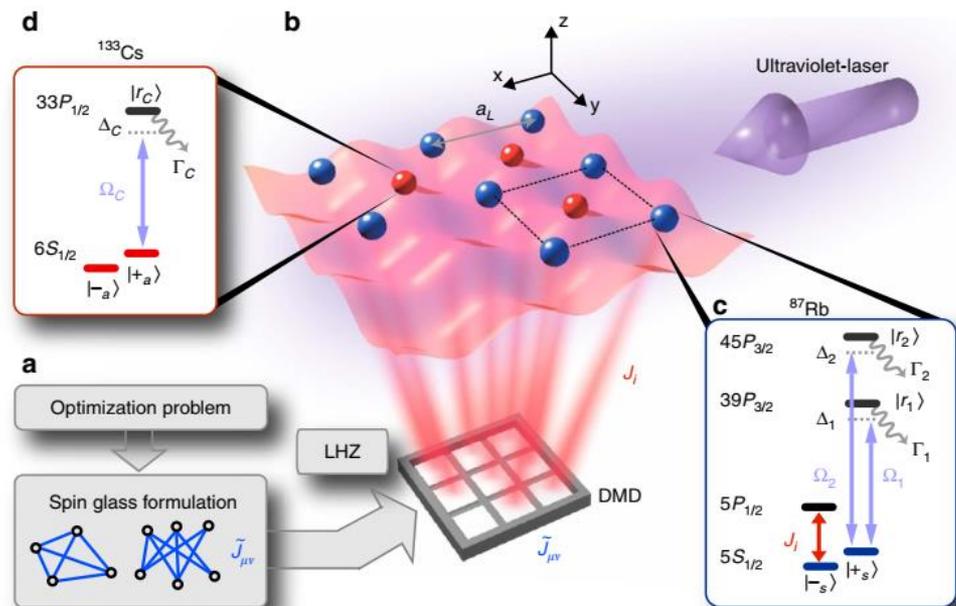
ARTICLE

Received 27 Oct 2016 | Accepted 4 May 2017 | Published 22 Jun 2017

DOI: 10.1038/ncomms15813 OPEN

A coherent quantum annealer with Rydberg atoms

A.W. Glaetzle<sup>1,2,3,4,\*</sup>, R.M.W. van Bijnen<sup>1,2,\*</sup>, P. Zoller<sup>1,2</sup> & W. Lechner<sup>1,2</sup>



## Quantum computing in geophysics: algorithms, computational costs and future applications

Shahpoor Moradi<sup>1</sup>, Daniel Trad<sup>1</sup>, and Kristopher A. Innanen<sup>1</sup>

<sup>1</sup>University of Calgary, Department of Geoscience, Calgary, Canada

Распространение сейсмических волн в трехмерной модели Земли.  
Проблема: размерность системы. Решение: алгоритм HHL

## Алгоритм Дейкстры

ISSN 0278-6419, Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics, 2019, Vol. 43, No. 1, pp. 47–51. © Allerton Press, Inc., 2019.  
Russian Text © K.R. Khadiev, L.I. Safina, 2019, published in Vestnik Moskovskogo Universiteta, Seriya 15: Vychislitel'naya Matematika i Kibernetika, 2019, No. 1, pp. 76–83.

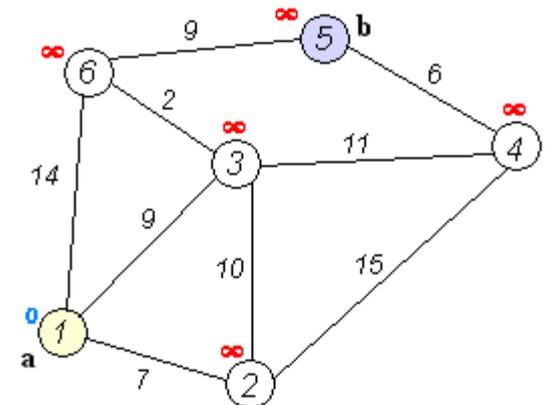
### Quantum Algorithm for Shortest Path Search in Directed Acyclic Graph<sup>#</sup>

K. R. Khadiev<sup>1,2\*</sup> and L. I. Safina<sup>2\*\*</sup>

<sup>1</sup>ООО Квантовые Интеллектуальные Технологии, Kazan, 420111 Russia

<sup>2</sup>Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, 420008 Russia

Received July 26, 2018



# Пример задачи: моделирование молекулы H

Гамильтониан:

$$\hat{H}_{mol} = \begin{pmatrix} -1.8310 & 0.1813 \\ 0.1813 & -0.2537 \end{pmatrix}$$

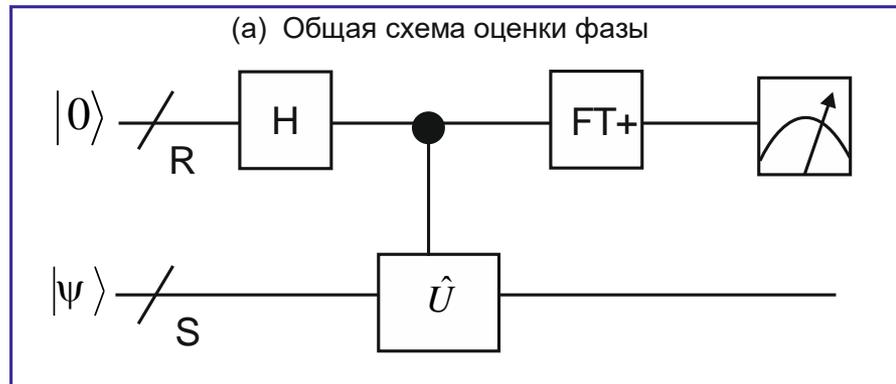
Унитарный оператор эволюции:

$$\hat{U}|\psi\rangle = \exp(i\hat{H}_{mol}\tau)|\psi\rangle = \exp(2\pi i\varphi)|\psi\rangle$$

Находим энергию:

$$E_{изм} = 2\pi\varphi/\tau$$

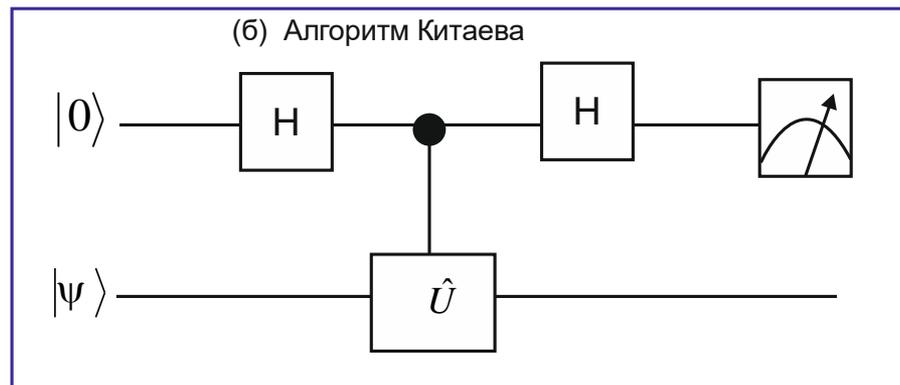
# Пример задачи: моделирование молекулы H



Применяем к регистру:  $\hat{U}_k = \exp(i\hat{H}_{mol}\tau)^{2^k}$

Получаем состояние:  $|R\rangle \otimes |S\rangle = \sum_n \exp(2\pi i \varphi n) |n\rangle \otimes |\psi\rangle$

# Пример задачи: моделирование молекулы H



## Алгоритм Китаева:

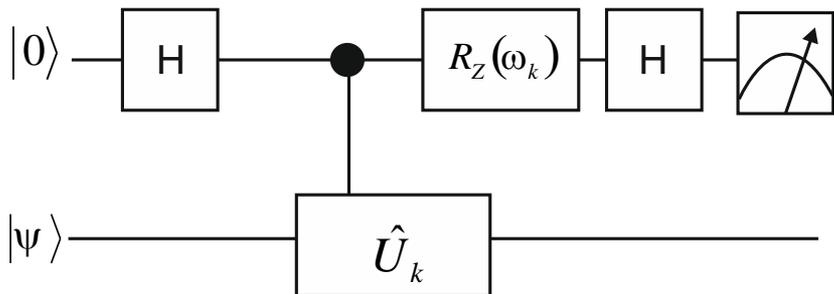
После контролируемого  $U$ :  $\frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + \exp(2\pi i \varphi) |1\rangle] |\psi\rangle$

После вентиля Адамара:  $\frac{1}{2} [1 + \exp(2\pi i \varphi)] |0\rangle |\psi\rangle + \frac{1}{2} [1 - \exp(2\pi i \varphi)] |1\rangle |\psi\rangle$

Вероятность найти в состоянии «0»:  $P = \cos^2(\pi\varphi)$

# Пример задачи: моделирование молекулы H

(г) Адаптивная схема оценки фазы



Запишем фазу с помощью  $m$  битов:

$$\varphi = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_m = \frac{\varphi_1}{2} + \frac{\varphi_2}{4} + \dots + \frac{\varphi_m}{2^m}$$

Первый шаг:  $\hat{U}_m = \left[ \exp(i\hat{H}_{mol}\tau) \right]^{2^m}$

Вероятность получить «0»:

$$P_0 = \cos^2 \left[ \pi(0.\varphi_m) \right]$$

Второй шаг:  $\hat{U}_m = \exp(i\hat{H}\tau)^{2^{m-1}}$

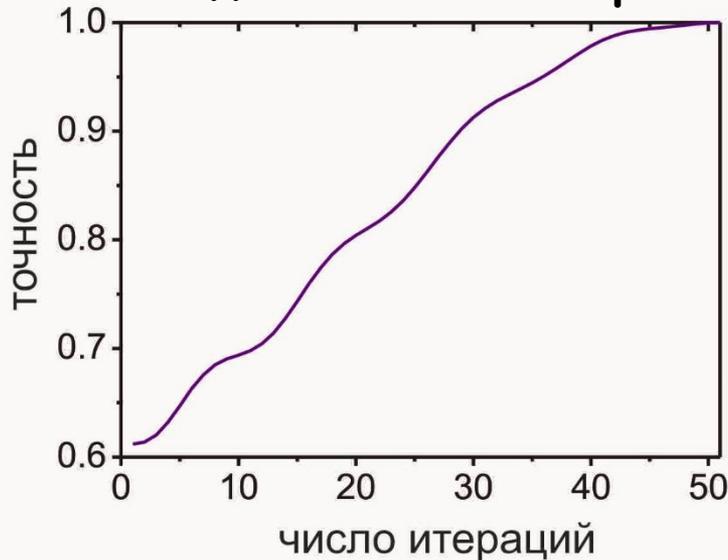
Состояние системы:  $\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |0\rangle + \exp(2\pi i 0.\varphi_{m-1}\varphi_m) |1\rangle \right] |\psi\rangle$

Выполним вращение:  $R_Z(\omega_{m-1}) \quad \omega_{m-1} = -2\pi(0.\varphi_{m-1}\varphi_m)$

Вероятность получить «0»:  $P_0 = \cos^2 \left[ \pi(0.\varphi_{m-1}) \right]$

# Пример задачи: моделирование молекулы H

Адиабатическое приготовление начального состояния:



Выберем начальное состояние:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Гамильтониан зависит от времени:

$$\hat{H}_{ad}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) \sigma_x + \frac{t}{T} \hat{H}_{mol}$$

Преобразование состояния на каждом шаге:

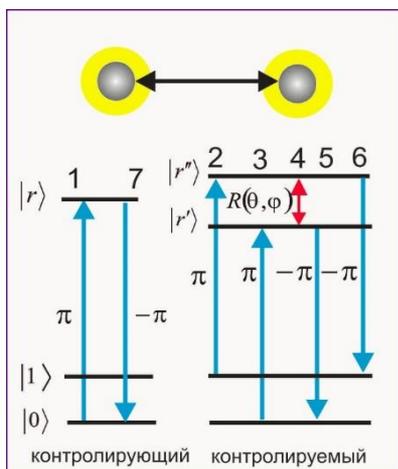
$$\hat{U}_{ad}^m(t) = \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right) \frac{\Delta T}{2} \sigma_x\right] \exp\left[-i \frac{m \Delta T}{M} \hat{H}_{mol}\right] \exp\left[-i\left(1 - \frac{m}{M}\right) \frac{\Delta T}{2} \sigma_x\right]$$

# Пример задачи: моделирование молекулы H

Разложение по базису:  $\hat{H}_{mol} = \frac{1}{2} \sum_i Tr(\hat{H}_{mol} \sigma_i) \sigma_i$

Троттеризация:  $\exp[t(\hat{A} + \hat{B})] = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \exp\left(\hat{A} \frac{t}{n}\right) \exp\left(\hat{B} \frac{t}{n}\right) \right]^n$

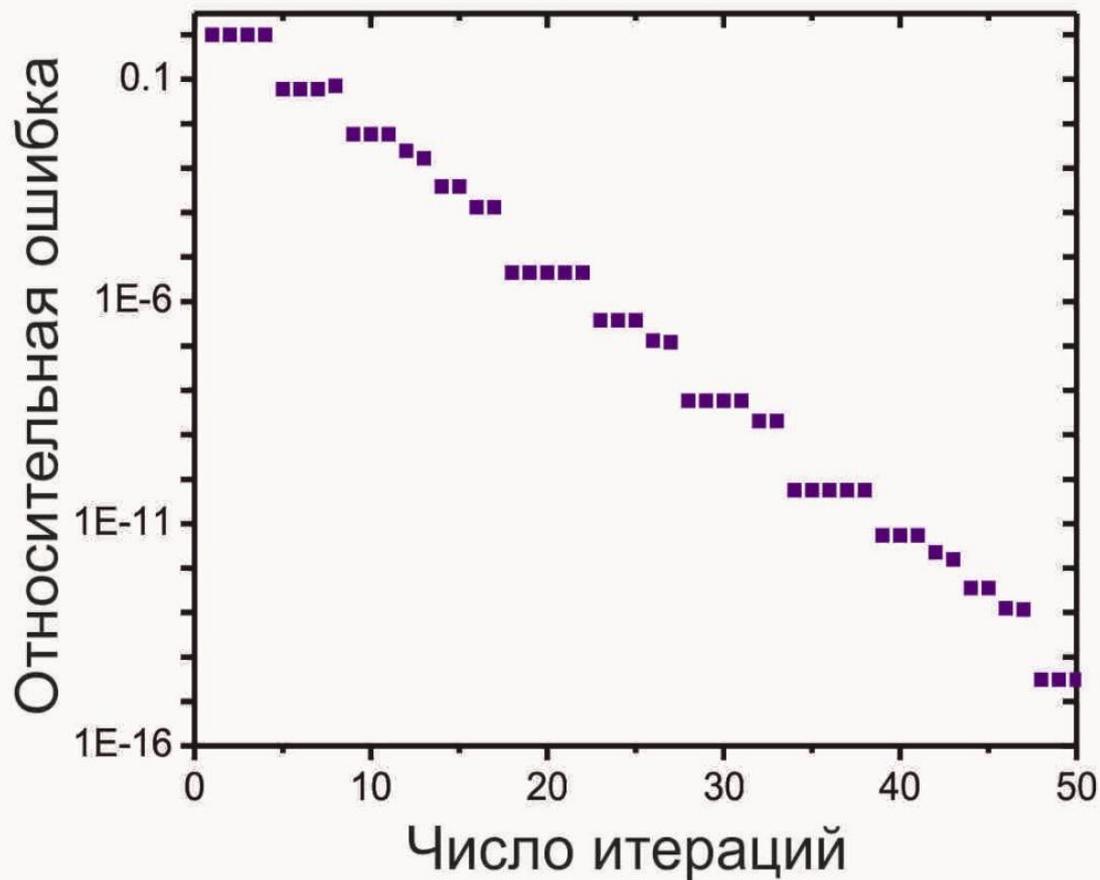
Схема реализации с атомами:



$$R(\theta, \chi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & ie^{-i\chi} \sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{i\chi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

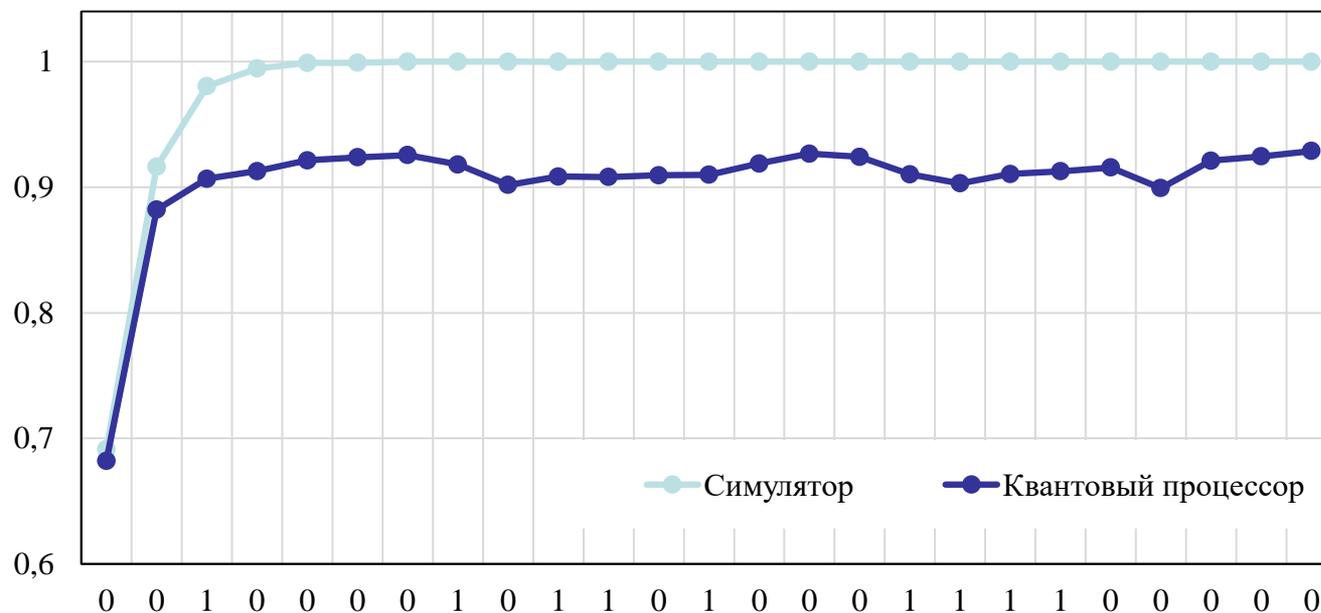
И. Н. Ашкарин, И. И. Бетеров, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин, Е. А. Якшина, И. И. Рябцев, Схема квантового симулятора молекулы водорода на основе двух ультрахолодных атомов рубидия, Квантовая электроника, 2019, т.49. с.449

# Пример задачи: моделирование молекулы Н



# Пример задачи: моделирование молекулы H

Результат моделирования на процессоре IBM:



Н.А. Журавлев, И.И. Бетеров Итеративная квантовая оценка фазы с использованием квантового процессора IBM, Квантовая электроника 2021, т.51. 506-510

# Выводы

**Практическая применимость квантовых алгоритмов на NISQ процессорах – основной вопрос для дальнейшего развития квантовых вычислений**

**Наиболее перспективны направления, связаны с вариационными подходами, оптимизацией, машинным обучением, теорией графов**

**Уже в ближайшее время могут быть сформулированы алгоритмы, интересные для геофизических задач**

**Метод квантовой оценки фазы перспективен для выполнения на NISQ процессорах**