

Моделирование атомов и молекул с помощью квантовых компьютеров

Владимир Зайцев

в сотрудничестве с

Илья Мальцев, Анастасия Дурова, Максим Грошев,
Арсен Нурамагов, Владимир Шабаев

- ▶ Что такое квантовый компьютер?
- ▶ Зачем нужен квантовый компьютер?
- ▶ Алгоритмы для квантового компьютера

Что такое квантовый компьютер?

Это квантовая система, которой можно управлять



Квантовые эффекты (*суперпозиция и запутанность*)
можно использованы для вычислений



Юрий Манин,
Вычислимое и невычислимое,
(Сов. Радио, 1980)



Ричард Фейнман,
Simulating Physics with Computers,
Int. J. of Theor. Phys. (1982)

Что такое квантовый компьютер?

Кубит (квантовый бит)

двухуровневая квантовая система

Состояние такой системы

$$\begin{aligned} |\psi_{1q}\rangle &= \alpha_0 |g\rangle + \alpha_1 |e\rangle \\ &= \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \end{aligned}$$

где $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$

Что такое квантовый компьютер?

Кубит (квантовый бит)

двухуровневая квантовая система

Состояние такой системы

$$\begin{aligned} |\psi_{1q}\rangle &= \alpha_0 |g\rangle + \alpha_1 |e\rangle \\ &= \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \end{aligned}$$

где $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$



Бит



Кубит

Что такое квантовый компьютер?

Из кубитов собирается квантовый компьютер, самое сложное: взаимодействие между ними

2 кубита

$$\begin{aligned} |\psi_{2q}\rangle &= \alpha_0 |0\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_1 |0\rangle_1 |1\rangle_0 + \alpha_2 |1\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_3 |1\rangle_1 |1\rangle_0 \\ &= \alpha_0 |00\rangle + \alpha_1 |01\rangle + \alpha_2 |10\rangle + \alpha_3 |11\rangle \\ &= \sum_{x=0}^3 \alpha_x |x\rangle \end{aligned}$$

N кубитов

$$|\psi_N\rangle = \sum_{x=0}^{2^N-1} \alpha_x |x\rangle$$

Что такое квантовый компьютер?

Из кубитов собирается квантовый компьютер, самое сложное: взаимодействие между ними

2 кубита

$$\begin{aligned} |\psi_{2q}\rangle &= \alpha_0 |0\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_1 |0\rangle_1 |1\rangle_0 + \alpha_2 |1\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_3 |1\rangle_1 |1\rangle_0 \\ &= \alpha_0 |00\rangle + \alpha_1 |01\rangle + \alpha_2 |10\rangle + \alpha_3 |11\rangle \\ &= \sum_{x=0}^3 \alpha_x |x\rangle \end{aligned}$$

N кубитов

$$|\psi_N\rangle = \sum_{x=0}^{2^N-1} \alpha_x |x\rangle$$

Если 16 байт на α_x

N	память
26	1 Gb
36	1 Tb
56	1 Eb

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Детали:

- ▶ Разрешены только унитарные операции

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Детали:

- ▶ Разрешены только унитарные операции
- ▶ Как извлечь информацию?

Зачем нужен квантовый компьютер?

Алгоритмы:

- ▶ Шора (1994)
разложение числа на простые множители
- ▶ Phase Estimation Algorithm (1995)
нахождение собственных значений
- ▶ Гровера (1996)
поиск в неструктурированной базе данных
- ▶ HHL (2009)
обращение матриц
- ▶ Variational Quantum Eigensolver (2014)
вариационное решение задач оптимизации

quantumalgorithmzoo.org

Зачем нужен квантовый компьютер?

Приложения:

- ▶ Химическая и биологическая инженерия
- ▶ Моделирование физических систем
- ▶ Решение задач оптимизации
- ▶ Криптография
- ▶ Майнинг криптовалют 

Зачем нужен квантовый компьютер?

Приложения:

- ▶ Химическая и биологическая инженерия
- ▶ Моделирование физических систем
- ▶ Решение задач оптимизации
- ▶ Криптография
- ▶ Майнинг криптовалют 

Химическая и биологическая инженерия



расчеты атомов и молекул



вычисление энергии основного состояния

Вычисление энергии основного состояния

Рассмотрим атом у которого N_e электронов и N уровней

Ищем решение в виде

$$\Psi(x_1, \dots, x_{N_e}) = \sum_{\gamma} C_{\gamma} \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_{\gamma_1}(x_1) & \dots & \psi_{\gamma_1}(x_{N_e}) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\gamma_{N_e}}(x_1) & \dots & \psi_{\gamma_{N_e}}(x_{N_e}) \end{vmatrix},$$

где ψ – одноэлектронная функция

Оператор $H \rightarrow$ матрица \hat{H}

Размер матрицы \hat{H} растет \exp с ростом N

Чем могут помочь квантовые компьютеры?

Пространство Фока

$$|x\rangle = |f_{N-1} \dots f_0\rangle$$

где $f_n \in \{0, 1\}$ – числа заполнения спин-орбитали ψ_n

Представление вторичного квантования

$$a_j^\dagger |f_{N-1} \dots f_{j+1} 0 f_{j-1} \dots f_0\rangle = (-1)^{f_0 + \dots + f_{j-1}} |f_{N-1} \dots f_{j+1} 1 f_{j-1} \dots f_0\rangle$$

$$a_j |f_{N-1} \dots f_{j+1} 1 f_{j-1} \dots f_0\rangle = (-1)^{f_0 + \dots + f_{j-1}} |f_{N-1} \dots f_{j+1} 0 f_{j-1} \dots f_0\rangle$$

Чем могут помочь квантовые компьютеры?

В результате функция

$$\Psi = \sum_{\gamma} C_{\gamma} a_{\gamma_{N_e}}^{\dagger} \dots a_{\gamma_1}^{\dagger} |0 \dots 0\rangle$$

описывает N_e электронную систему

Квантовый компьютер позволяет вычислять (измерять)

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

Если $|\Psi\rangle = |\Psi_g\rangle$, то $E = E_g$

Чем могут помочь квантовые компьютеры?

В результате функция

$$\Psi = \sum_{\gamma} C_{\gamma} a_{\gamma N_e}^{\dagger} \dots a_{\gamma_1}^{\dagger} |0 \dots 0\rangle$$

описывает N_e электронную систему

Квантовый компьютер позволяет вычислять (измерять)

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

Если $|\Psi\rangle = |\Psi_g\rangle$, то $E = E_g$

Как создать $|\Psi_g\rangle$ из $|0 \dots 0\rangle$?

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Основан на эволюции во времени

$$e^{-iHt} |\Psi\rangle = e^{-iHt} \sum_n c_n |\Psi_n\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} c_n |\Psi_n\rangle$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Основан на эволюции во времени

$$e^{-iHt} |\Psi\rangle = e^{-iHt} \sum_n c_n |\Psi_n\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} c_n |\Psi_n\rangle$$

Квантовый алгоритм

$$\frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_{x=0}^{2^{N_a}-1} |x\rangle |\Psi_g\rangle \xrightarrow{C e^{-iHt}} \frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_x e^{-iE_g t x} |x\rangle |\Psi_g\rangle$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Основан на эволюции во времени

$$e^{-iHt} |\Psi\rangle = e^{-iHt} \sum_n c_n |\Psi_n\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} c_n |\Psi_n\rangle$$

Квантовый алгоритм

$$\frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_{x=0}^{2^{N_a}-1} |x\rangle |\Psi_g\rangle \xrightarrow{C e^{-iHt}} \frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_x e^{-iE_g t x} |x\rangle |\Psi_g\rangle$$
$$\xrightarrow{QFT^{-1}}$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Основан на эволюции во времени

$$e^{-iHt} |\Psi\rangle = e^{-iHt} \sum_n c_n |\Psi_n\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} c_n |\Psi_n\rangle$$

Квантовый алгоритм

$$\begin{aligned} \frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_{x=0}^{2^{N_a}-1} |x\rangle |\Psi_g\rangle &\xrightarrow{C e^{-iHt}} \frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_x e^{-iE_g t x} |x\rangle |\Psi_g\rangle \\ &\xrightarrow{QFT^{-1}} \left| \frac{E_g t}{2\pi} \right\rangle |\Psi_g\rangle \end{aligned}$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Если

$$|\Psi_g\rangle \rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle$$

то

$$\frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_x |x\rangle |\Psi\rangle \xrightarrow{\text{PEA}} \sum_n c_n \left| \frac{E_n t}{2\pi} \right\rangle |\Psi_n\rangle$$

Вероятность измерить E_g пропорциональна $|c_g|^2$

При этом функция Ψ коллапсирует в Ψ_g

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Если

$$|\Psi_g\rangle \rightarrow |\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle$$

то

$$\frac{1}{2^{N_a/2}} \sum_x |x\rangle |\Psi\rangle \xrightarrow{\text{PEA}} \sum_n c_n \left| \frac{E_n t}{2\pi} \right\rangle |\Psi_n\rangle$$

Вероятность измерить E_g пропорциональна $|c_g|^2$

При этом функция Ψ коллапсирует в Ψ_g

Вопросы

- ▶ Как реализовать Ce^{iHt} ?
- ▶ А как e^{iHt} ?
- ▶ А как выглядит H для квантового компьютера?

Phase Estimation Algorithm (PEA)

В терминах вторичного квантования

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s$$

Оператор рождения

$$a_j^\dagger |f_{N-1} \dots f_{j+1} 0 f_{j-1} \dots f_0\rangle = (-1)^{f_0 + \dots + f_{j-1}} |f_{N-1} \dots f_{j+1} 1 f_{j-1} \dots f_0\rangle$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

В терминах вторичного квантования

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s$$

Оператор рождения

$$a_j^\dagger |f_{N-1} \dots f_{j+1} 0 f_{j-1} \dots f_0\rangle = (-1)^{f_0 + \dots + f_{j-1}} |f_{N-1} \dots f_{j+1} 1 f_{j-1} \dots f_0\rangle$$

как операция над кубитами

$$a_j^\dagger = I_{N-1} \otimes \dots \otimes I_{j+1} \otimes \sigma_j^- \otimes \sigma_{j-1}^z \otimes \dots \otimes \sigma_0^z$$

где

$$\sigma^- \equiv \frac{1}{2}(\sigma^x - i\sigma^y)$$

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Тогда

$$H = \sum_{\gamma} c_{\gamma} \text{PS}_{\gamma}$$

где PS (Pauli String)

$$\text{PS}_{\gamma} = \sigma^{\gamma_{N-1}} \otimes \dots \otimes \sigma^{\gamma_0}$$

Как перевести

$$e^{iHt} = e^{it \sum_{\gamma} c_{\gamma} \text{PS}_{\gamma}}$$

в операции над кубитами?

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Троттеризация

$$e^{iHt} = \left[e^{iH(t/N)} \right]^N = \left[e^{i(t/N) \sum_{\gamma} c_{\gamma} \text{PS}_{\gamma}} \right]^N \approx \left[\prod_{\gamma} e^{i(t/N) c_{\gamma} \text{PS}_{\gamma}} \right]^N$$

Выражение

$$e^{i\theta \text{PS}} = U_1 \dots U_{N(\text{PS})}$$

может быть легко записано в виде операций над кубитами

Phase Estimation Algorithm (PEA)

Троттеризация

$$e^{iHt} = \left[e^{iH(t/N)} \right]^N = \left[e^{i(t/N) \sum_{\gamma} c_{\gamma} PS_{\gamma}} \right]^N \approx \left[\prod_{\gamma} e^{i(t/N) c_{\gamma} PS_{\gamma}} \right]^N$$

Выражение

$$e^{i\theta PS} = U_1 \dots U_{N(PS)}$$

может быть легко записано в виде операций над кубитами

Для реализовать Ce^{iHt} надо каждую $U \rightarrow CU$

CU операции выражаются через CNOT и однокубитные

Реальные квантовые компьютеры

Декогеренция и различные шумы

	Кубиты	Число стабильных операций
Google	72	?
IBM	65	7
ionQ	11	?
Honeywell	10	9
...		

Операции CNOT являются источником наибольших ошибок

Алгоритм PEA требует огромного количества CNOT операций

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

Приготовим систему в состояние

$$|\Psi(\vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta})|\Psi_0\rangle$$

Будем искать минимум

$$E_{\vec{\theta}} = \langle \Psi(\vec{\theta}) | H | \Psi(\vec{\theta}) \rangle,$$

варьируя $\vec{\theta}$

VQE - гибридный алгоритм

- ▶ квантовый компьютер – преобразование ВФ и вычисление среднего
- ▶ классический компьютер – определение нового $\vec{\theta}$

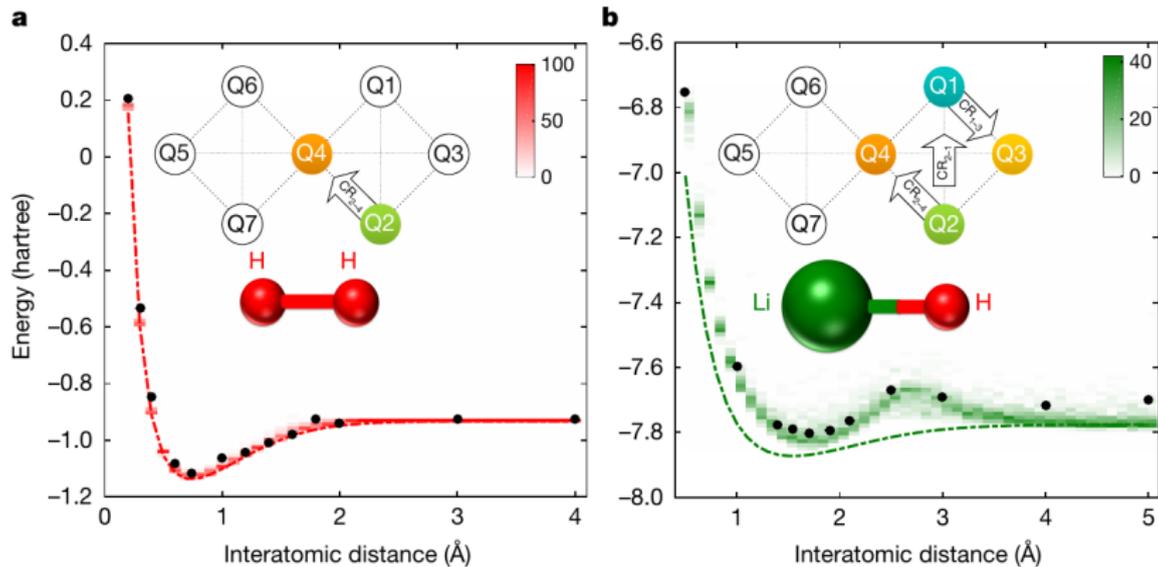
Variational Quantum Eigensolver (VQE)

Вариационная природа поглощает множество ошибок

Реальные расчеты

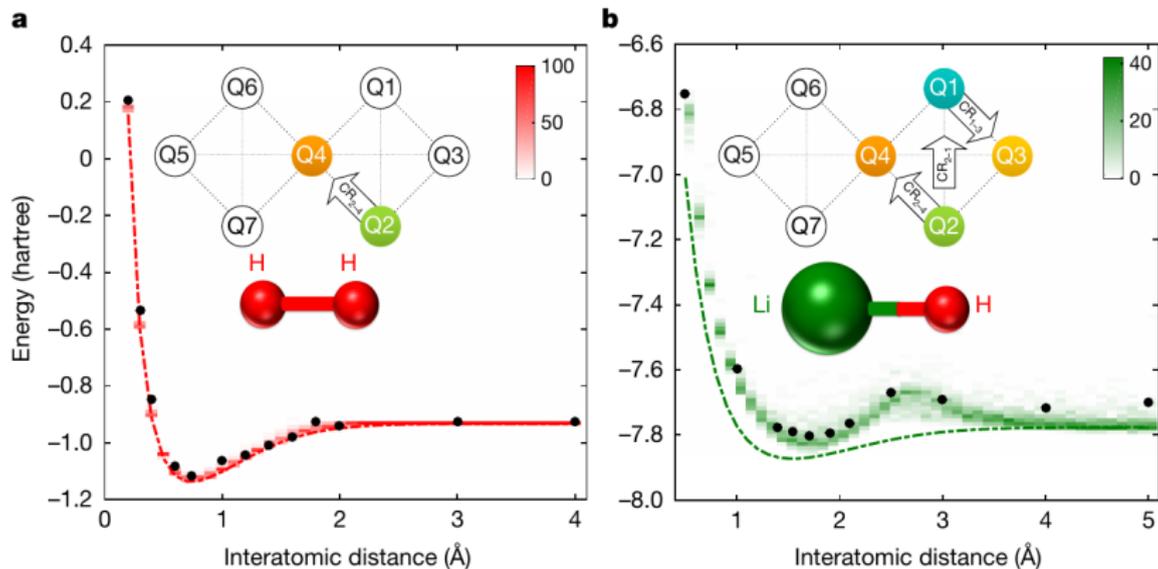
Peruzzo <i>et al.</i> , Nat. Commun. 5, 4213 (2014)	HeH ⁺
O'Malley <i>et al.</i> , Phys. Rev. X 6, 031007 (2016)	H ₂
Kandala <i>et al.</i> , Nature 549, 242 (2017)	H ₂ , LiH, BeH ₂
Hempel <i>et al.</i> , Phys. Rev. X 8, 031022 (2018)	H ₂ , LiH
Ollitrault <i>et al.</i> , Phys. Rev. Res. 2, 043140 (2020)	H ₂ , LiH, H ₂ O
Nam <i>et al.</i> , npj Quantum Inf. 6, 33 (2020)	H ₂ O
Rubin <i>et al.</i> , Science 369, 1084 (2020)	H ₆ , H ₈ , H ₁₀ , H ₁₂

Variational Quantum Eigensolver (VQE)



Kandala *et al.*, Nature 549, 242 (2017)

Variational Quantum Eigensolver (VQE)



Kandala *et al.*, Nature 549, 242 (2017)

Проблемы

нетривиальная многомерная классическая оптимизация

Другие алгоритмы

Quantum Imaginary Time Evolution

McArdle *et al.*, npj Quantum Inf. 5, 75 (2019)

Motta *et al.*, Nat. Phys. 16, 205 (2020)

anti-Hermitian Contracted Schrödinger Equation

Smart and Mazziotti, Phys. Rev. Lett. 126, 070504 (2021)

Требования к современным алгоритмам

- ▶ Устойчивость к ошибкам
- ▶ Малое количество операций

Мы работаем над

Многоэлектронными атомами, например,
московий (115 электронов)

Модифицированный алгоритм развития в мнимом времени

- + Постпроцессинг для уменьшения ошибок
- + Отбор состояний для конфигурационного взаимодействия
- + Процедура самосогласования (опционно)

Мы работаем над

Многоэлектронными атомами, например,
московий (115 электронов)

Модифицированный алгоритм развития в мнимом времени

- + Постпроцессинг для уменьшения ошибок
- + Отбор состояний для конфигурационного взаимодействия
- + Процедура самосогласования (опционно)

Спасибо за внимание!