

РАСЧЕТ АТОМА МОСКОВИЯ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВЫХ АЛГОРИТМОВ В ПРИСУТСТВИИ ШУМОВ

А. В. Дурова^{1,2,*}, *И. А. Мальцев*^{1,2,**}, *М. Э. Грошев*^{1,2,***},
В. М. Шабает^{1,2,****}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034, Россия

² Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, 188300, Россия

Исследована возможность расчета электронной структуры атомных систем на квантовом компьютере в присутствии шумов. С этой целью проведены расчеты энергии основного состояния атома московия на симуляторе Qiskit с использованием алгоритма Variational Quantum Eigensolver с анзацем dUCC-SD. Оптимизация параметров алгоритма осуществлялась с помощью процедуры Adam. Устойчивость алгоритма к шумам квантовых компьютеров была изучена в присутствии двухкубитного фазового затухания.

The possibility of calculating the electronic structure of atomic systems using a noisy quantum computer is investigated. For this purpose, the ground state energy of the moscovium atom is calculated using the Qiskit simulator and the Variational Quantum Eigensolver algorithm with the dUCC-SD ansatz. The algorithm parameters are optimized utilizing the Adam procedure. The robustness of the algorithm to noise is studied in the framework of a two-qubit phase damping noise.

PACS: 03.67.Ac; 27.90.+b; 31.15.xt; 42.50.Lc; 32.10.-f; 32.30.-r

ВВЕДЕНИЕ

Задача расчета электронной структуры имеет важное значение для понимания свойств химических соединений и атомов, а также играет большую роль при изучении характеристик различных материалов. Однако на современных классических компьютерах не всегда можно достичь желаемой точности. Это происходит из-за экспоненциального роста конфигурационного пространства с увеличением числа активных частиц.

* E-mail: st062846@student.spbu.ru

** E-mail: i.maltsev@spbu.ru

*** E-mail: st047648@student.spbu.ru

**** E-mail: v.shabaev@spbu.ru

Одним из способов решения данной проблемы является использование квантовых компьютеров.

В настоящее время существует несколько квантовых алгоритмов для расчета электронной структуры атомов и молекул [1]. Однако наличие шумов накладывает существенные ограничения на возможность проведения необходимых расчетов на современных квантовых компьютерах. Поэтому большой интерес представляет класс вариационных квантовых алгоритмов, в частности Variational Quantum Eigensolver (VQE) [2], которые одновременно используют квантовый и классический компьютеры. Благодаря своей гибридной структуре и вариационной природе они устойчивы к шумам и в ряде случаев были успешно использованы для расчетов электронной структуры небольших молекул на реальных квантовых компьютерах [1, 2]. Однако эти расчеты проводились в минимальных базисных наборах, и возможность их масштабирования на большие конфигурационные пространства все еще является открытым вопросом. Для атомных систем возможность масштабирования VQE в отсутствие шумов была продемонстрирована в работе [3]. Но для того, чтобы оценить возможность проведения соответствующих расчетов на реальных квантовых компьютерах, необходимо исследовать влияние шумов.

Целью данной работы является исследование электронной структуры атомных систем с помощью квантовых алгоритмов в присутствии шумов. Для этого были проведены расчеты основного состояния атома московия, который является удачным объектом для исследования возможностей квантовых алгоритмов [3]. Расчеты проводились с использованием алгоритма VQE на симуляторе шумного квантового компьютера из пакета Qiskit. Модель шумов включала в себя двухкубитное фазовое затухание. Этот тип шумов является доминирующим в некоторых случаях [4]. Оптимизация параметров алгоритма VQE осуществлялась с помощью градиентной процедуры Adam. Параметризация состояния проводилась с помощью анзаца dUCC-SD [1], который позволяет получить результат с высокой точностью за сравнительно небольшое число шагов оптимизационной процедуры.

АЛГОРИТМ VQE

VQE — это гибридный квантово-классический алгоритм. Его целью является поиск минимального собственного значения гамильтониана H . В основе алгоритма лежит вариационный принцип Рэлея–Ритца, согласно которому

$$E_g \leq \min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle, \quad |\psi(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_0\rangle, \quad (1)$$

где E_g — энергия основного состояния; $|\psi(\theta)\rangle$ — пробная волновая функция, которую также называют анзацем, подготовка которой осуществляется с помощью действия оператора $U(\theta)$ на ссылочное состояние $|\psi_0\rangle$;

θ — вектор параметров. Работа VQE основана на поиске минимального среднего значения гамильтониана путем вариации параметров θ . Квантовый компьютер используется для подготовки состояния и измерения среднего значения гамильтониана. Поиск оптимальных параметров осуществляется с помощью классической вариационной процедуры.

В формализме вторичного квантования гамильтониан системы имеет вид

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r, \quad (2)$$

где h_{pq} , h_{pqrs} — одно- и двухэлектронные интегралы; a^\dagger , a — операторы рождения и уничтожения релятивистских спин-орбиталей, полученных с помощью метода Дирака–Фока.

Для реализации расчетов на квантовом компьютере необходимо выразить гамильтониан (2) в терминах спиновых операторов Паули:

$$H = \sum_i \alpha_i P_i, \quad (3)$$

где α_i — вещественные коэффициенты, а $P_i \in \{I, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}^{\otimes n}$. Для этого мы применяем кодировку четности [5], в которой каждый кубит $|q_j\rangle$ хранит суммарную четность заполнения орбиталей p_j с индексами, меньшими или равными j :

$$p_j = \left(\sum_{i=0}^j f_i \right) \bmod 2, \quad (4)$$

где f_i — число заполнения орбитали с индексом i , а операторы рождения и уничтожения имеют вид

$$a_j^\dagger = \sigma_{N_{\text{orbs}}-1}^x \otimes \dots \otimes \sigma_{j+1}^x \otimes \mathcal{P}_j^+, \quad a_j = \sigma_{N_{\text{orbs}}-1}^x \otimes \dots \otimes \sigma_{j+1}^x \otimes \mathcal{P}_j^-, \quad (5)$$

где $\mathcal{P}_j^\pm = (1/2)(\sigma_j^x \otimes \sigma_{j-1}^z \mp i\sigma_j^y)$. Таким образом, среднее значение гамильтониана примет вид

$$\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle = \sum_i \alpha_i \langle \psi(\theta) | P_i | \psi(\theta) \rangle. \quad (6)$$

С помощью выражения (6) среднее значение гамильтониана можно найти путем измерения средних значений строк Паули на квантовом компьютере.

АНЗАЦ

Один из наиболее часто используемых подходов для построения анзаца основан на унитарном варианте теории связанных кластеров. Построенный с помощью такого подхода параметризующий оператор имеет вид

$$U(\theta) = e^{T-T^\dagger}, \quad T = \sum_{\mu}^{\text{exc}} \theta_{\mu} \tau_{\mu}, \quad \tau_{\mu} \equiv a_a^\dagger a_b^\dagger \dots a_j a_i, \quad (7)$$

где μ — мультииндекс для индексов i, j, \dots и a, b, \dots , которые нумеруют занятые и виртуальные орбитали ссылочного состояния. В качестве начального приближения используется состояние Дирака–Фока $|\psi_0\rangle$ (см. формулу (1)). Суммирование в операторе T обычно ограничивается однократными и двукратными возбуждениями. В таком случае состояние, полученное с помощью действия оператора $U(\theta)$ на $|\psi_0\rangle$, называется анзацем UCC-SD.

Разность $T - T^\dagger$ может быть представлена в виде линейной комбинации строк Паули, которые не всегда коммутируют между собой. Из-за этого анзац UCC-SD не может быть эффективно представлен в виде квантовой цепи. Поэтому в данной работе используется альтернативный вид анзаца (dUCC-SD):

$$|\psi_{\text{dUCC-SD}}\rangle = \prod_i e^{t_{\mu_i}(\tau_{\mu_i} - \tau_{\mu_i}^\dagger)} |\psi_0\rangle. \quad (8)$$

ШУМЫ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

В терминах операторных сумм [6] влияние шума квантового компьютера на состояние системы описывается следующим образом:

$$\epsilon(\rho) = \sum_k E_k \rho E_k^\dagger, \quad (9)$$

где ρ — матрица плотности системы; $\epsilon(\rho)$ — матрица плотности системы с учетом влияния шумов; $\{E_k\}_k$ — операторы Крауса.

Влияние двухкубитного фазового затухания на состояние описывается с помощью операторов Крауса, зависящих от уровня шума λ [6]:

$$E_i \otimes E_j \forall i, j \in \{0, 1\},$$

$$E_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\lambda} \end{pmatrix}, \quad E_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

С помощью этих операторов можно описать влияние шумов на каждую двухкубитную операцию анзаца (8), представленного в виде квантовой цепи.

РЕЗУЛЬТАТЫ

В представленной работе для расчетов использовался алгоритм VQE с градиентным оптимизатором Adam. Оценка градиента осуществлялась с помощью метода параметрического сдвига [7]. Расчеты проводились с замороженным атомным остовом и пятью активными валентными электронами. Параметры используемого базиса представлены в табл. 1. Соответствующие параметры анзаца приведены в табл. 2.

Влияние шумов на результат было исследовано с использованием двухкубитного дефазировочного канала, действие которого моделирова-

Таблица 1. Радиальные орбитали, используемые для построения базиса, соответствующие им число активных электронов N_e , число орбиталей N_{orbs} , число кубитов в кодировке четности N_q

Радиальные орбитали	N_e	N_{orbs}	N_q
$\{7s, 7p_{1/2}, 7p_{3/2}\}$	5	8	6

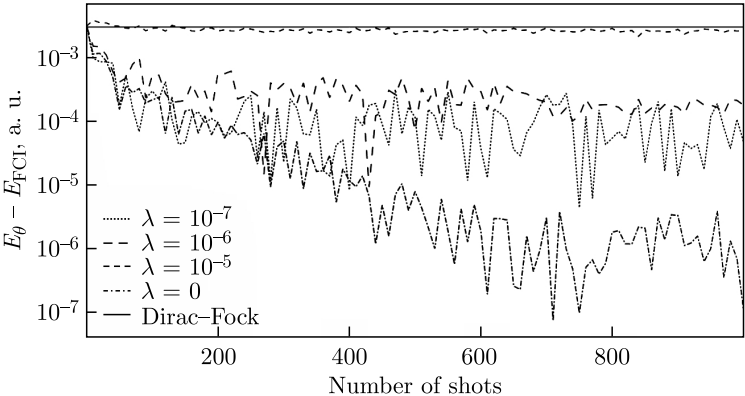
Таблица 2. Число параметров, соответствующих однократным возбуждениям N_{θ}^S и двукратным возбуждениям N_{θ}^D , а также количество детерминантов Слейтера $N_{\text{Sl.Det}}^{\text{SD}}$, генерируемых анзацем dUCC-SD, количество детерминантов Слейтера в методе полного конфигурационного взаимодействия $N_{\text{Sl.Det}}^{\text{FCI}}$, число двухкубитных операций N_{CNOT} и число однокубитных операций N_{U3}

N_{θ}^S	N_{θ}^D	$N_{\text{Sl.Det}}^{\text{SD}}$	$N_{\text{Sl.Det}}^{\text{FCI}}$	N_{CNOT}	N_{U3}
1	4	7	7	88	32

лось с использованием пакета Qiskit. Для оценки энергии проводилось усреднение по 10^6 результатам измерения квантовой цепи.

VQE запускался с различными значениями λ . Каждый запуск прерывался после 10^3 итераций оптимизационной процедуры. Полученные значения энергий E_{θ} оценивались относительно энергий E_{FCI} , найденных с помощью метода полного конфигурационного взаимодействия в том же базисе.

На рисунке представлена зависимость $E_{\theta} - E_{\text{FCI}}$ от числа итераций оптимизационной процедуры для разных значений λ . Из данных, приведенных на рисунке, можно сделать вывод, что Adam сходится с одной и той же скоростью при разных значениях λ . Однако точность результатов неуклонно ухудшается с увеличением уровня шума (табл. 3).



Разность $E_{\theta} - E_{\text{FCI}}$ как функция числа итераций оптимизационной процедуры для разных значений уровня шума λ

Таблица 3. Минимальные значения разности $E_\theta - E_{\text{FCI}}$ для различных значений уровня шума λ

Уровень шума	$E - E_{\text{FCI}}$, а. е.
10^{-9}	$4,9 \cdot 10^{-6}$
10^{-8}	$9,9 \cdot 10^{-6}$
10^{-7}	$4,7 \cdot 10^{-5}$
10^{-6}	$4,8 \cdot 10^{-4}$
10^{-5}	$2,5 \cdot 10^{-3}$

Таким образом, алгоритм VQE в присутствии шумов порядка 10^{-5} и меньше позволяет улучшить решение, найденное с помощью метода Дирака–Фока. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что точность результатов VQE довольно сильно ограничена шумами даже при расчете в небольшом базисе.

Финансирование. Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «Базис».

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. McArdle S., Endo S., Aspuru-Guzik A., Benjamin S.C., Yuan X. Quantum Computational Chemistry // *Rev. Mod. Phys.* 2020. V. 92, No. 1. 15003.
2. Peruzzo A., McClean J., Shadbolt P., Yung M.H., Zhou X.Q., Love P.J., Aspuru-Guzik A., O'Brien J.L. A Variational Eigenvalue Solver on a Photonic Quantum Processor // *Nature Commun.* 2014. V. 5, No. 1.
3. Zaytsev V.A., Groshev M.E., Maltsev I.A., Durova A.V., Shabaev V.M. Calculation of the Moscovium Ground-State Energy by Quantum Algorithms // *Intern. J. Quant. Chem.* 2023. V. 124, No. 1.
4. Benedetti C., Vento V., Olivares S., Paris M.G.A., Cialdi S. Experimental Realization of a Local-to-Global Noise Transition in a Two-Qubit Optical Simulator // *Phys. Rev. A.* 2020. V. 101, No. 3. 032112.
5. Seeley J.T., Richard M.J., Love P.J. The Bravyi–Kitaev Transformation for Quantum Computation of Electronic Structure // *J. Chem. Phys.* 2012. V. 137, No. 22. 224109.
6. Nielsen M.A., Chuang I.L. Quantum Computation and Quantum Information. 10th Anniversary Ed. Cambridge Univ. Press, 2011.
7. Schuld M., Bergholm V., Gogolin C., Izaac J., Killoran N. Evaluating Analytic Gradients on Quantum Hardware // *Phys. Rev. A.* 2019. V. 99, No. 3. 032331.