

УДК 004.021

ПРИМЕНЕНИЕ АВТОМАТИЧЕСКОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ К ПОИСКУ ЭФФЕКТИВНЫХ ВАРИАЦИОННЫХ  
КВАНТОВЫХ АЛГОРИТМОВ

Козелько С.С. Университет ИТМО

Научный руководитель – кандидат технических наук, научный сотрудник ФИТиП

Чивилихин Д.С.

Университет ИТМО

В данной работе исследуется возможность повышения качества работы вариационных квантовых алгоритмов за счет использования производных в процессе оптимизации. Для борьбы с возникающими проблемами рассматриваются модификации методов оптимизации и альтернативные структуры квантовых схем.

**Введение.** Квантовые компьютеры развиваются очень стремительно в последние годы, но они все еще остаются экспериментальной технологией. Вариационные квантовые алгоритмы позволяют уже сейчас решать задачи на квантовых компьютерах средних размеров. Такие алгоритмы работают за счет комбинации квантового компьютера, на котором вычисляется результат работы параметризуемой квантовой схемы, и классического компьютера, на котором производится оптимизация параметров. Однако качество результата работы алгоритма зависит не только от правильного выбора метода оптимизации, но и от структуры используемой квантовой схемы.

**Основная часть.** Методы оптимизации, использующие производные, позволяют достичь нужных результатов значительно быстрее, чем методы нулевого порядка. Основная проблема, возникающая при таком подходе — это затухание градиента. Мы производим сравнение разных подходов, направленных на борьбу с этой проблемой на примере поиска энергии базового состояния молекул. Мы ставим целью достижение химической точности расчета с использованием минимальной глубины квантовой схемы и минимального числа итераций оптимизации.

В качестве базового метода оптимизации выбран градиентный спуск. Мы рассматриваем возможность повышения скорости сходимости метода за счет использования метрики Фубини-Штуди. В качестве альтернативы мы применяем оптимизацию параметров с заморозкой части слоев квантовой схемы и проверяем возможность комбинирования этих двух подходов. Затем мы изучаем влияние выбора структуры квантовой схемы на качество результатов. Мы сравниваем универсальные структуры с вариантом, учитывающим химическую природу задачи.

**Выводы.** Оптимизация параметров с заморозкой слоев и выбор подходящей структуры схемы не только повышают скорость получения результата, но и снижают требования к используемым квантовым компьютерам.