

Зачем нужны квантовые вычисления?

Часть 3. Современные квантовые вычислители

Виктор Алексеев (victor.alexeev@gmail.com)

В третьей части статьи приведён краткий обзор других существующих на сегодняшний день основных типов квантовых компьютеров:

- квантовые адиабатические вычислители (Adiabatic Quantum Processing Unit);
- вычислители с квантовым отжигом (Quantum Annealing Processing Unit – QAPU);
- вариационные квантовые вычислители (Variational Quantum Eigensolvers);
- вычислители собственных значений с квантовым отжигом (Quantum Annealer Eigensolver – QAE).

Адиабатические квантовые вычисления

В начале 2000-х годов существенно замедлился рост исследований в области создания универсального квантового цифрового компьютера (Universal Digital Gate Quantum Computer – UDQGC), способного взламывать любые шифры. Стало понятно, что создать такой компьютер на базе существующих технологий просто невозможно.

В одной из последних статей, опубликованной в августе 2022 года, отмечается, что пока ещё нельзя говорить о явном преимуществе универсальных цифровых квантовых компьютеров с вентиляционной обработкой UDQGC перед классическими компьютерами с бинарной логикой SDBLC в каких-либо приложениях. На современном этапе развития всё больше экспертов склоняются к направлению совмест-

ного использования UDQGC и SDBLC в гибридных схемах VQE [1] (рис. 1).

Ещё двадцать лет назад разработчики квантовых компьютеров задумались о том, нельзя ли, не прерывая начатые направления исследований и используя существующий на тот момент уровень развития науки и техники, сделать ещё что-нибудь полезное из кубитов, кроме UDQGC.

Одной из актуальных задач прикладной математики является поиск алгоритмов решений оптимизационных задач с нахождением минимальных значений целевых функций. В качестве примера таких задач в первую очередь рассматриваются задачи комбинаторной оптимизации типа «Non-deterministic polynomial NP – class» (класс недетерминированных полиномиальных задач). Задачи NP являются изначально настолько трудными, что для них нет алгоритмов решения с

помощью классических стандартных цифровых компьютеров с бинарной логикой (SDBLC) [2].

В качестве примера можно вспомнить известную задачу, в которой нужно определить оптимальный маршрут, по которому коммивояжеру нужно объехать N пунктов за минимальное время (travelling salesman problem – TSP). Количество всех возможных вариантов маршрутов в этой задаче рассчитывается по формуле $N! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot N$ (N -факториал). Для небольшого количества пунктов задача TSP решается с помощью стандартных компьютеров с двоичной логикой. Однако, например, для ста пунктов назначения количество всех возможных вариантов будет представлено уже 158-значным числом, и решение становится непосильным даже для самых мощных современных SDBLC. Решения подобных задач носят не только чисто теоретический характер, но также являются крайне важными для таких приложений, как крупные логистические схемы, моделирование новых фармакологических препаратов, модели атомов и молекул и других аналогичных приложений.

Известные алгоритмы решения задач типа NP натолкнули физиков, знакомых с классической теорией адиабатических процессов [3], на мысль о том, что есть много общего в алгоритмах, описывающих поведение простых квантово-механических систем, и известных алгоритмах решения некоторых «трудных задач». В общем случае термин «адиабатический» относится к тем процессам с участием квантово-механических систем, в которых сохраняется полная энергия.

В упрощённой формулировке адиабатический подход к квантовой механике можно сформулировать в следующем виде: «Если интервал времени, в течение которого длится внешнее воздействие, направленное на некоторую квантово-механическую систему, будет настолько большим, что система не сможет преодолеть ближайший энергетический барьер, то она может оставаться сколь угодно долго в состоянии с минимальной суммарной энергией и с изменёнными координатами



Рис. 1. Отладочный комплект «Microsoft quantum development kit» позволяет совместно использовать стандартный и квантовый компьютеры в режиме VQE [1]

вектора состояния в гильбертовом пространстве». Поэтому можно использовать алгоритмы, описывающие переход квантово-механической системы в состояние с наименьшей энергией, для решения задач типа NP.

Для того чтобы понять, как связаны изменения квантово-механической системы с решением математической задачи, нужно всё же использовать некоторые специальные термины. Известно, что энергетическое состояние физической системы описывается оператором полной энергии – гамильтонианом \mathbf{H} , в математическую формулу которого входят параметры, характеризующие потенциальную и кинетическую энергию системы, импульс, координаты, векторы скорости и ускорения и т.д. Не вдаваясь в подробности, можно сказать, что гамильтониан \mathbf{H} – это просто название некоторой матрицы, с помощью которой в математическом виде записывается полная энергия системы.

С учётом отмеченного подхода к адиабатическим изменениям алгоритм решения задач класса NP можно свести к поискам минимальных значений гамильтониана в энергетическом спектре системы. Состояние системы, соответствующее минимальному гамильтониану, получило название «собственное» состояние с минимально возможной полной энергией.

Другим мощным стимулом для создания адиабатических квантовых вычислителей AQC стала опубликованная в 2000 году работа Эдварда Фархи (Edward Farhi), который вместе с группой своих сотрудников доказал, что определённый класс задач комбинаторной оптимизации достаточно легко сводится к квантовому алгоритму с поиском минимума гамильтониана в основном состоянии системы. Кроме того, для этого класса задач можно в принципе разработать адиабатический квантовый компьютер, который будет способен решать подобные задачи [4].

Гамильтониан, зависящий от времени, для некоторой абстрактной системы можно записать в следующем виде:

$$H(t) = (1-S)H_b + SH_p,$$

где $S = t/T$;

t – текущее время;

T – полное время эволюции;

H_b – начальный гамильтониан при $t = 0$;

H_p – конечный гамильтониан системы в основном (наименьшем энергетическом) состоянии при $t = T$.

Если оставить некоторую абстрактную систему в покое и оградить её от любого внешнего воздействия, то она постепенно будет стремиться к своему основному состоянию с минимальной суммарной энергией. В качестве очень приблизительной иллюстрации эволюционного перехода системы из одного начального состояния в «собственное» состояние можно привести чашку со льдом, которую переставили из морозильной камеры холодильника на массивный постамент в «стерильной» комнате с очищенным от пыли воздухом и с положительной температурой, близкой к точке росы, исключаяющей испарение. Если никак не влиять извне на процесс таяния (не подогревать, не трясти лёд и т.д.), то постепенно без испарения лёд перейдёт полностью в воду, которая через некоторое время примет температуру окружающей среды. Важно то, что эволюция системы зависит от времени. В предельных случаях, когда время (t) стремится к нулю, динамическое состояние системы остаётся неизменным. В другом случае, при стремлении времени (t) к бесконечности, будет происходить идеальный адиабатический эволюционный переход. Для идеального случая справедливо полное выполнение всех условий адиабатической теоремы, а именно утверждение о том, что если система первоначально в момент времени $t = 0$ находилась в основном состоянии с гамильтонианом $H_b = H(0)$, то при адиабатической эволюции в момент времени $t = T$ система перейдёт в основное состояние с гамильтонианом $H_p = H(T)$, но с другими координатами. При этом необходимо учитывать, что мы имеем дело не с обычными декартовыми координатами x, y, z материальной точки, а с координатами вектора состояния квантово-механической системы в гильбертовом пространстве. В указанном выше примере лёд в чашке занимал один объём, а образовавшаяся вода – другой.

Опуская другие научные достижения в области AQC, можно говорить о том, что в начале 2000-х была подготовлена теоретическая база адиабатических квантовых вычислений (AQC). При этом основополагающей стала идея, заключающаяся в том, чтобы создать алгоритм решения «трудно решаемой задачи» в формате алгоритма поведения некоей квантово-механической системы, для которой экспериментальное нахождение её основного состояния с минимальным значением

гамильтониана было бы одновременно и искомым решением для первоначальной NP-задачи.

Дело оставалось за «малым» – необходимо было создать аппаратную часть адиабатического квантового вычислителя AQC.

Сама конструкция адиабатического квантового вычислителя (AQC) принципиально отличается от конструкции универсального цифрового квантового компьютера с вентиляционной обработкой (UDGQC), рассмотренного в первой части статьи [5].

В универсальных цифровых квантовых компьютерах UDGQC вычисления контролируются с помощью унитарных квантовых логических вентилях, изменяющих состояния каждого кубита.

В противоположность системе контроля каждого отдельного кубита адиабатический квантовый вычислитель не имеет вентилях и не использует алгоритмы и квантовые операторы, которые были рассмотрены в первой части статьи для квантовых компьютеров типа UDQC. В адиабатическом вычислителе управление реализуется через манипулирование полной энергетической картиной всей системы в целом с помощью внешних магнитных полей, которые действуют как на запутанные комбинации кубитов, так и на связи между ними.

На первом этапе разработок AQC нужно было найти конструкцию простых и легко масштабируемых кубитов, а также средства контроля их состояния.

Ещё в 1999 году в Кембридже была разработана конструкция кубита, состоящая из трёх «Джозенсоновских переходов ДП» (Josephson Junction – JJ), расположенных на алюминиевом кольце диаметром около двадцати нанометров. Два ДП, в которых генерировались токи противоположных направлений, использовались в качестве кубитов. Третий ДП был изготовлен в конструктиве «SQID – Superconducting Quantum Interference Device» и использовался для контроля состояния двух других ДП. Авторы разработки назвали свою конструкцию «Superconducting persistent-current qubit». По существу, этот кубит представлял собой прототип современного потокового квантового кубита с ДП [6].

Принцип действия кубитов, основанный на эффекте Джозефсона в сверхпроводниках, был рассмотрен в первой части статьи. Коротко, в общем виде

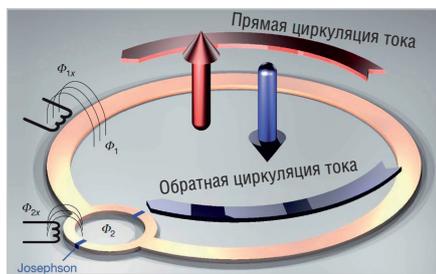


Рис. 2. Токи сверхпроводимости, возникающие в конструкциях кубитов с переходами Джозефсона (Josephson junction), в зависимости от направления формируют два основных состояния суперпозиции [7]

работу кубитов типа «Superconducting Persistent Current Qubit – SPCQ» можно представить следующим образом. При криогенных температурах в кольцеобразном сверхпроводнике, разделённом тонким слоем изолятора, циркулирующие токи сверхпроводимости проходят через ДП благодаря туннельному эффекту. Разность фаз волновой функции обуславливает магнитный поток. Поскольку ток и разность фаз не могут быть точно определены одновременно, то их крайние положения можно использовать в качестве основных состояний кубита, а текущее состояние – в качестве суперпозиции. Таким образом, токи сверхпроводимости, возникающие в такой конструкции, в зависимости от направления формируют два основных состояния кубита (рис. 2) [7].

Внешнее электромагнитное поле может переключать систему в одно из конечных состояний. Конечное состояние кубита считывается с помощью SQUID. Этот сверхпроводящий квантовый интерференционный датчик (СКВИД) на базе сверхпроводящей петли, содержащей ДП, предназначен для измерения сверхмалых магнитных полей, вплоть до 5×10^{-14} Т (Tesla). В упрощённом варианте СКВИД представляет собой сверхпроводящее кольцо с двумя джозефсоновскими переходами, которые разделяют контур на две части. Под воздействием внешнего магнитного поля образующиеся сверхпроводящие токи на одном из контактов будут вычитаться из постоянно внешнего тока и складываться на втором контакте. В результате между туннельными контактами возникнет разность фаз, вызывающая интерференцию, зависящую от приложенного внешнего магнитного поля. Специальный алгоритм контроля зависимости напряжения от внешнего поля позво-

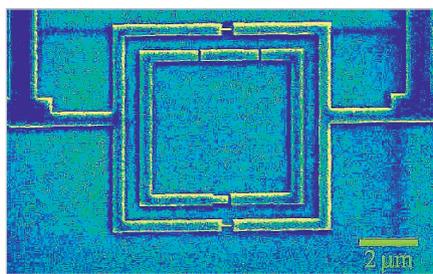


Рис. 3. Структура кубита типа SPCQ с тремя Джозефсоновскими переходами, использованного в лабораторной модели квантового вычислителя голландского технического университета TU Delft [9]

ляет обнаруживать отдельные кванты магнитного потока.

Следует отметить, что существуют также конструкции SQUID с одним ДП. Подробно модель работы кубитов типа SPCQ, контролируемых с помощью SQUID, описана в [8].

На рис. 3 показана структура 3-секционного кубита типа SPCQ, окружённого системой считывания SQUID [9]. Эта конструкция использовалась в ранних лабораторных моделях квантового вычислителя голландского технического университета TU Delft. В правой части приведена эквивалентная схема этого кубита. Сам кубит соответствует внутреннему контуру с тремя ДП (разрывы на рис. 3). Внешний контур, окружающий кубит, соответствует системе считывания SQUID. Разрывы во внешнем контуре указывают на два дополнительных ДП на системе считывания SQUID.

Одним из основных преимуществ этой конструкции является то, что она изготавливалась методом стандартной литографии, позволяющим делать практически идентичные дешёвые копии кубитов в массовом производстве.

Впервые адиабатические квантовые вычисления для решения трудной задачи «MAX CUT» были опробованы объединённой группой, в состав которой вошли учёные и инженеры из Cambridge Massachusetts, Stanford, California, Berkeley, California, IBM Almaden Research Center, San Jose, California [10].

В эксперименте была задействована лабораторная установка с ядерно-магнитным резонансом (ЯМР), в которой в качестве кубитов использовались поляризованные молекулы химического раствора [11].

Для оптимизации задачи «MAX CUT» был разработан адиабатический кван-

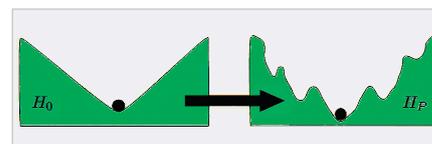


Рис. 4. Упрощённая схема изменения мгновенных значений гамильтониана в процессе адиабатических квантовых вычислений [13]

товый алгоритм, с помощью которого медленно менялся зависящий от времени гамильтониан системы. Результаты этой работы для упрощённого варианта «MAX CUT» хорошо согласовывались с результатами, полученными с помощью стандартного компьютера с двоичной логикой. Таким образом, экспериментально была доказана возможность использования квантовых адиабатических вычислений для решения трудно-го класса задач NP [12].

Дальнейшее развитие аппаратной части АКС проходило по линии усовершенствования описанных выше кубитов и систем контроля их состояния.

Одновременно разрабатывались и теоретические алгоритмы работы АКС.

Весь процесс вычислений с помощью АКС можно разбить на следующие этапы:

- математическая формулировка поставленной задачи с учётом методов оптимизации;
- определение граничных условий;
- квантовые вычисления в процессе эволюции системы.

Процесс адиабатического квантового вычисления можно проиллюстрировать на следующем примере. Пусть в некоторой системе со связанными кубитами используются спины электронов с состояниями «вверх», «вниз» и суперпозицией этих состояний. В качестве механизма, управляющего кубитами, применяется внешнее магнитное поле, которое изменяет энергетическое состояние системы, а значит, и гамильтониан \mathbf{H} , по заданному алгоритму. Упрощённая схема алгоритма адиабатических квантовых вычислений показана на рис. 4 [13]. В рассматриваемом нами примере на первом этапе мощное магнитное поле повернуло спины всех кубитов системы в одном направлении и перевело систему в основное состояние с гамильтонианом \mathbf{H}_0 (левый график рис. 4). Затем мы снимаем внешнее воздействие, то есть выключаем внешнее магнитное поле, и наблюдаем, как система постепенно переходит в своё конечное основное состояние с гамиль-

тонианом H_p (правый график рис. 4). При идеальном адиабатическом процессе система минует все локальные энергетические уровни и переходит в конечное состояние с минимальным из всех возможных значений гамильтониана.

На практике наиболее близкой к рассмотренному примеру оказалась математическая модель статистической физики, описывающая взаимодействие между отдельными магнитными моментами в ферромагнитном веществе, «модель «Изинга»» (Ising model) [14].

В самом простом виде одномерной модели «Изинга» считается, что электроны расположены в узлах регулярной плоской решетки и можно учитывать взаимодействие между собой только соседних магнитных моментов. В идеальном случае, если убрать внешнее магнитное поле, то при отсутствии любого другого внешнего воздействия такая система постепенно переходит в состояние с наименьшей суммарной энергией, при котором все магнитные моменты останутся ориентированными вдоль некоторого выделенного направления. Это соответствует «ферромагнитной модели «Изинга»». Следует отметить, что для случая неферромагнитных материалов спины в основном состоянии для соседних решеток будут ориентированы в противоположных направлениях.

В реальной жизни на систему могут воздействовать различные внешние факторы, такие, например, как тепловое движение электронов, магнитное поле Земли, микровибрации и т.д. Поэтому в реальных условиях полностью равновесного состояния с одинаковой ориентацией всех магнитных моментов не будет. Достаточно подробно модель «Изинга» рассмотрена в [15].

Изначально модель «Изинга» была разработана для того, чтобы описать фазовые переходы в магнетиках. Однако алгоритм этой модели со временем стал основой для широкого класса так называемых решётчатых моделей (lattice model), позволяющих исследовать и другие процессы, которые можно свести к задаче о взаимном влиянии микросистем, размещённых в узлах регулярной решетки при различных внешних условиях [16].

Свойство алгоритма модели «Изинга» адаптироваться для решения других задач позволило создать целый класс так называемых «задач оптими-

зации Изинга». Например, в рассмотренной выше задаче коммивояжёра минимальное время прохождения по всему маршруту будет соответствовать минимальному значению гамильтониана в оптимизационной задаче «Изинга».

Если вернуться к задаче о коммивояжёре и оставить ему только три пункта назначения (рис. 5) [17], то минимальное время, за которое будет пройден весь маршрут с одной и той же скоростью, можно записать в такой форме:

$$T = V[S1 + S2 + S3 + S4 + S5 + S6],$$

где $S1(0, 1, 2, 3, 0)$ – это расстояние по маршруту от стоянки коммивояжёра (точка 0) до посёлка 1, затем до посёлка 2, затем до посёлка 3 и обратный путь и т.д. (рис. 5).

Для простейшего варианта 2-D модели «Изинга», в которой рассматривается вариант с четырьмя спинами, размещёнными по углам квадрата, гамильтониан системы можно записать в следующем виде:

$$H_4 = -J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1 + \sigma_1\sigma_3 + \sigma_4\sigma_2),$$

где: суммируются только спиновые переменные соседних пар σ_i ;

$J > 0$ – это константа, описывающая силу взаимодействия между соседними спинами.

Всего в модели с четырьмя спинами в углах квадрата взаимодействие реализуется по периметру квадрата (4 варианта) плюс 2 варианта по диагоналям.

В модели «Изинга» суммируется энергия взаимодействий между спинами каждой соседней пары. При этом взаимодействие между соседними спинами определяет параллельное выстраивание магнитных моментов вдоль некоторого выделенного направления, понижая тем самым энергию системы и внося в неё отрицательный вклад $-J$. С другой стороны, антипараллельная ориентация соседних моментов энергетически невыгодна и приводит к увеличению энергии на величину $+J$.

Суммарная энергия системы зависит от того, выровнены одинаково все спины или нет. В идеальном случае все слагаемые приведённого выше гамильтониана должны иметь отрицательное значение.

Сравнивая последнюю, приведённую выше, формулу гамильтониана для 2-D «модели Изинга» (2D – 4 nodes) с формулой минимального времени прохождения маршрута в задаче с коммивояжером, можно увидеть, что оба математических выражения аналогичны по структуре, за исключением констант.

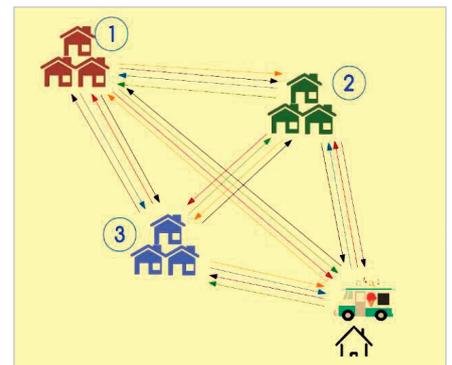


Рис. 5. Возможные варианты маршрутов для задачи коммивояжёра из трёх пунктов [17]

Таким образом, мы можем исходную задачу с коммивояжёром свести к алгоритму её решения с помощью модели «Изинга», используемой в адиабатическом квантовом вычислителе [18].

В общем случае основная задача адиабатических квантовых вычислений сводится к тому, чтобы представить поставленную задачу оптимизации в такой форме, в которой её сможет решить соответствующий квантовый вычислитель. Развитие аппаратной части этих вычислителей способствовало развитию нового направления, получившего название адиабатической квантовой оптимизации (adiabatic quantum optimization – AQO). В настоящее время это направление успешно используется в самых различных приложениях для решения трудных NP-задач.

К сожалению, идеальный адиабатический квантовый вычислитель, в котором полностью выполнялись бы все условия адиабатического процесса, крайне сложно реализовать на практике.

Кроме того, для решения задач класса NP с приемлемыми точностями необходимы довольно большие времена вычисления. При этом необходимо использовать большие количества кубитов, что, в свою очередь, увеличивает и шум, и время обработки [19–21].

Поэтому был разработан упрощённый вариант адиабатических квантовых вычислений, в котором эволюционный процесс идёт «не сам по себе», а регулируется внешним магнитным полем.

Лидером в разработке и производстве таких квантовых вычислителей является канадская фирма «D-Wave Systems», предложившая почти 20 лет назад упрощённую модель адиабатического устройства с управляемым эволюционным процессом, которое получило

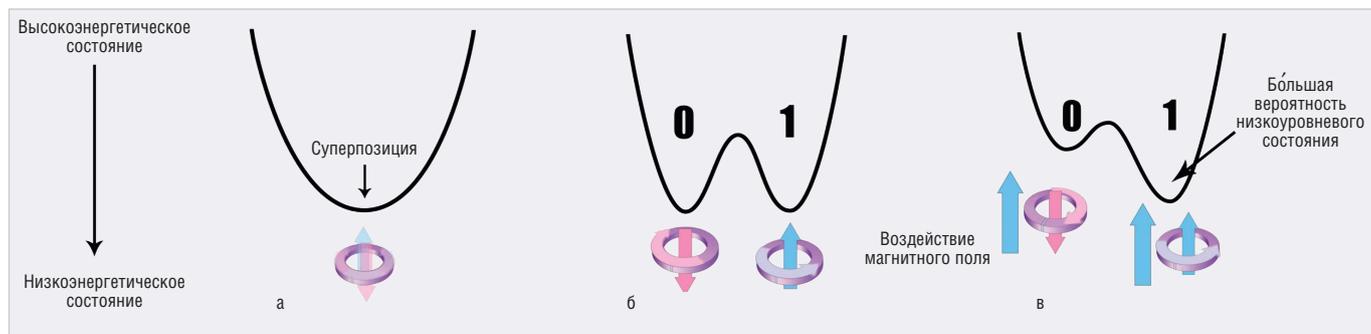


Рис. 6. Три этапа квантового отжига (quantum annealing – QA) [23]

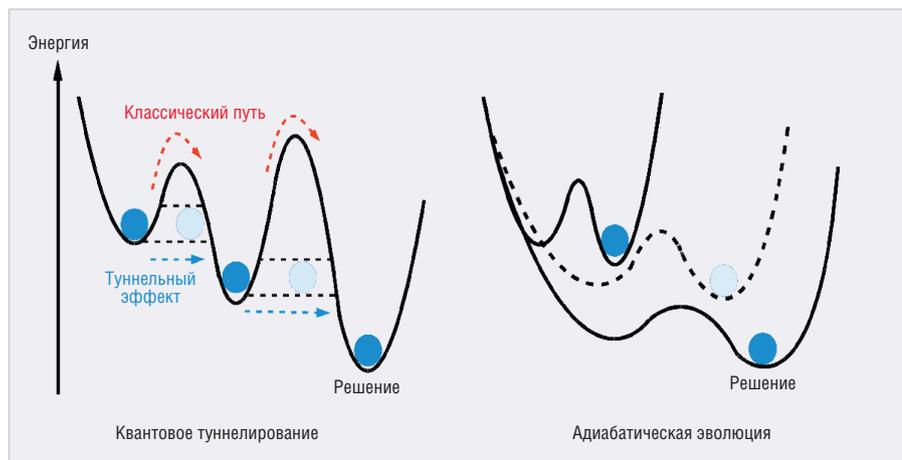


Рис. 7. Прохождение энергетических барьеров при квантовом отжиге (левый рисунок) и в классическом адиабатическом варианте (правый рисунок) [24]

название «quantum annealing processing solver QAPS» – вычислитель с квантовым отжигом [22].

Входящий в название этого вычислителя термин «annealing processing» (процесс отжига) заимствован из металлургии, где методика отжига, подразумевающая нагрев металла до определённой температуры с последующим остыванием при различных режимах, позволяет снять внутренние напряжения и получить заданную кристаллическую структуру.

Процесс квантового отжига можно пояснить графиками, приведёнными на рис. 6 [23]. Предположим, мы передали системе определённое количество энергии, например, нагрели до нужной температуры, при которой она находится в некотором основном начальном состоянии с гамильтонианом H_0 . Далее нам нужно гарантированно перевести систему в основное состояние с минимальным конечным гамильтонианом H_p . Энергия системы меняется в процессе квантовой эволюции. В начале процесса есть только один энергетический минимум (рис. 6а). Для того чтобы система не «зависла» в одном из локальных минимумов, можно «облегчать» пре-

одоление этих экстремумов с помощью внешнего магнитного поля.

В результате появляется второй энергетический минимум (рис. 6б). В этом состоянии, получившем название «двухъямный потенциальный барьер» (double-well potential), кубиты находятся в состоянии суперпозиции. При этом левый кубит соответствует состоянию «ноль», а правый кубит – состоянию «единица».

Если каким-либо образом не воздействовать на систему, то в конце процесса кубит может оказаться в одном из крайних состояний («ноль» или «единица») с равной вероятностью 50%. Используя внешнее магнитное поле, можно управлять процессом квантовой эволюции и остановить процесс в той точке, где кубит с наибольшей вероятностью будет иметь минимальное значение гамильтониана H_p (рис. 6в).

При чисто адиабатическом процессе эволюции квантовой системы частица может «застрять» в какой-нибудь энергетической яме, как это показано в правой части рис. 7 [24]. Внешнее магнитное поле в процессе квантового отжига помогает частице «проходить насквозь» локальные энергетические экстремумы состояний за счёт «кван-

тового туннелирования между ними (левая часть рис. 7). Таким образом, мы можем управлять процессом квантовой эволюции, искусственно корректируя энергетический ландшафт с целью получить желаемый результат с более вероятным исходом.

Эффект квантового туннелирования заключается в том, что электрон при определённых условиях может преодолеть потенциальный барьер, разделяющий энергетические уровни. Причём перемещение на другой уровень происходит практически мгновенно. Квантовое туннелирование – это одно из самых интересных явлений микромира, обещающее в будущем возможность создавать уникальные устройства, например, транзисторы с быстродействием, в миллиард раз превышающим современные уровни [25].

Процесс квантового туннелирования при квантовом отжиге можно понять, если представить себе теннисный мячик, попавший в лунку, соединённую наклонным туннелем с другой лункой. В результате игрок достанет мячик из лунки, находящейся ближе к финишу. Эффект туннелирования часто иллюстрируют также процессом пробивания пульей мишеней из разных материалов. Через один энергетический барьер электрон может свободно проходить насквозь на другой уровень, а через другие – нет.

Квантовые вычислители с отжигом работают под управлением магнитных полей, изменяющихся в соответствии с квантовыми алгоритмами. Для решения задач оптимизации в настоящее время разработано достаточно большое количество квантовых адиабатических алгоритмов [26].

Внешнее программируемое магнитное поле, изменяющееся по заданному алгоритму, способно смещать динамику отжига в сторону желаемого решения. В терминах адиабатических квантовых вычислений такие поля

получили название «поле смещения – bias field». Эти продольные поля также могут применяться в качестве «антисмещения – antibias», отфильтровывающего нежелательные переходы в процессе квантовой эволюции [27].

Исключительно важным моментом, обеспечивающим успешный результат квантового отжига, является связь между кубитами. Объединение кубитов в квантовых вычислителях реализуется с помощью устройства, получившего в англоязычной литературе название – «coupler». Это устройство, использующее свойства «запутанности» квантовых частиц, может быть запрограммировано так, чтобы в конечной точке квантового отжига оба кубита оказались в одном из четырёх возможных состояний: либо «ноль», либо «единица», либо две противоположные друг другу позиции.

Рабочие ячейки современных квантовых вычислителей с отжигом содержат сеть перестраиваемых и связанных между собой ВЧ-сверхпроводящих квантово-интерференционных кубитов (ВЧ-СКВИД кубиты). Гамильтониан составного кубита (Compound Josephson Junction CJJ), содержащий два ДП и SQUID, включает в себя члены, описывающие как квантовые состояния токов сверхпроводимости в петле СКВИД и в самих кубитах, так и магнитные потоки, порождаемые этими токами. При наличии внешнего управляющего магнитного поля в формулу гамильтониана добавляется ещё один член, описывающий это поле.

Полный гамильтониан, описывающий текущее состояние сложной квантовой системы, включает в себя матрицы, соответствующие каждому компоненту системы. Детальный анализ такого гамильтониана представляет собой достаточно сложную задачу и требует специальных знаний. Поэтому стоит поверить выводам статьи [28], в которой показано, что текущее состояние составного кубита определяется, кроме всего прочего, непрерывным взаимодействием между собой магнитных полей, обусловленных токами сверхпроводимости самих кубитов и SQUID. Благодаря этому взаимодействию кубиты находятся в связанном между собой состоянии. Иными словами, состояние одного кубита однозначно определяет состояние другого кубита, и наоборот. Более подробно работа современных квантовых процессоров, содержащих JJ кубиты и SQUID, рассмотрены в статье [29].

На рис. 8 [30] показана структурная схема ячейки квантового вычислителя с отжигом, содержащая: составной потоковый кубит с двумя ДП (CCJJ); квантовое интерферометрическое устройство (rf – SQUID); компенсатор тока сверхпроводимости (IPC); устройство считывания состояния кубитов (RO); индукционный тюнер (LT) и два внешних регулятора смещения. Процесс квантового отжига управляется с помощью потока смещения $\Phi_{ccjj}^x(t)$. Общий компенсационный ток смещения I_q обеспечивается током $I_g(t)$. Для управления кубитами используется одна общая линия смещения тока вместо множества индивидуальных для каждого кубита. Смещение CCJJ, в принципе, можно обеспечить для всех кубитов одновременно с использованием одного глобального управляющего сигнала.

Такая схема устойчива к мелким конструктивным отклонениям, которые неизбежно возникают в процессе изготовления и обуславливают вариации критических токов джозефсоновского перехода.

Для хранения независимых от времени управляющих сигналов, которые могут генерироваться непосредственно на кристалле, используется масштабируемая программируемая магнитная память (programmable magnetic memory – PMM). Приведённая на рис. 8 схема также содержит индукционный тюнер (LT), который предназначен для компенсации изменений индуктивности кубита в процессе настройки межкубитных ответвителей [30].

Структура ячейки из таких кубитов обеспечивает однородность поперечного магнитного поля, в котором все входящие в систему кубиты ведут себя одинаковым образом [31].

Для решения сложных задач необходимы квантовые вычислители, способные организовать разветвлённую программно-аппаратную платформу, с помощью которой можно было бы формировать соответствующие алгоритмы. Для этого необходимы квантовые вычислители с большим количеством кубитов. Если два связанных кубита имеют четыре возможных состояния, определяющие энергетический ландшафт, то три кубита имеют уже восемь таких состояний. Количество возможных состояний растёт в геометрической прогрессии с числом кубитов, значительно расширяя энергетический ландшафт и увеличивая

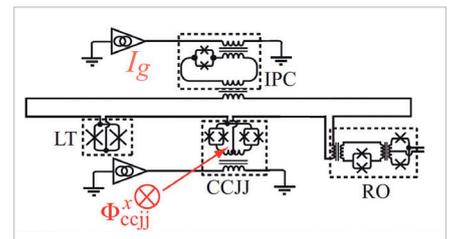


Рис. 8. Структурная схема ячейки квантового вычислителя с отжигом, содержащая составной потоковый кубит с двумя JJ [30]

степень сложности решаемой задачи. С другой стороны, добавление количества кубитов катастрофически увеличивает шум, не позволяя различать текущее состояние кубитов на уровне электронных помех. Кроме того, квантовая система, содержащая более десяти кубитов, перестаёт вести себя в полном соответствии с современной теорией квантовой физики.

В этой статье мы не будем сосредотачиваться на этих вопросах. Эти специальные, очень непростые с точки зрения математического аппарата, вопросы рассмотрены, например, в статьях [32, 33].

Учитывая проблемы, связанные с масштабированием, в современных вычислителях с квантовым отжигом кубиты объединяют в вычислительные кластеры, которые, в свою очередь, объединяются в сложные топологические сети (quantum processing unit – QPU). Выбор схемы объединения кубитов обусловлен несколькими факторами. Во-первых, универсальная топология должна обеспечить возможность использования различных по структуре квантовых алгоритмов. Во-вторых, важно то, каким именно способом реализуется управление кубитами с помощью специального встроенного модуля. В качестве примера можно привести разработанный в фирме D-Wave Systems Inc «встраиваемый сверхпроводящий цифро-аналоговый конвертер магнитного потока с ультранизким потреблением (ultra-low power embedded superconducting digital-to-analog flux converters – SDACF). Этот конвертер позволяет обеспечить максимальную плотность магнитного потока на единице площади [34].

Следует отметить, что предложенные в данной работе идеи в дальнейшем нашли своё воплощение в прикладных проектах. Например, исследователи проекта Flux Quantum Electronics (FQE) использовали свойства кубитов с ДП для разработки криогенных сверх-

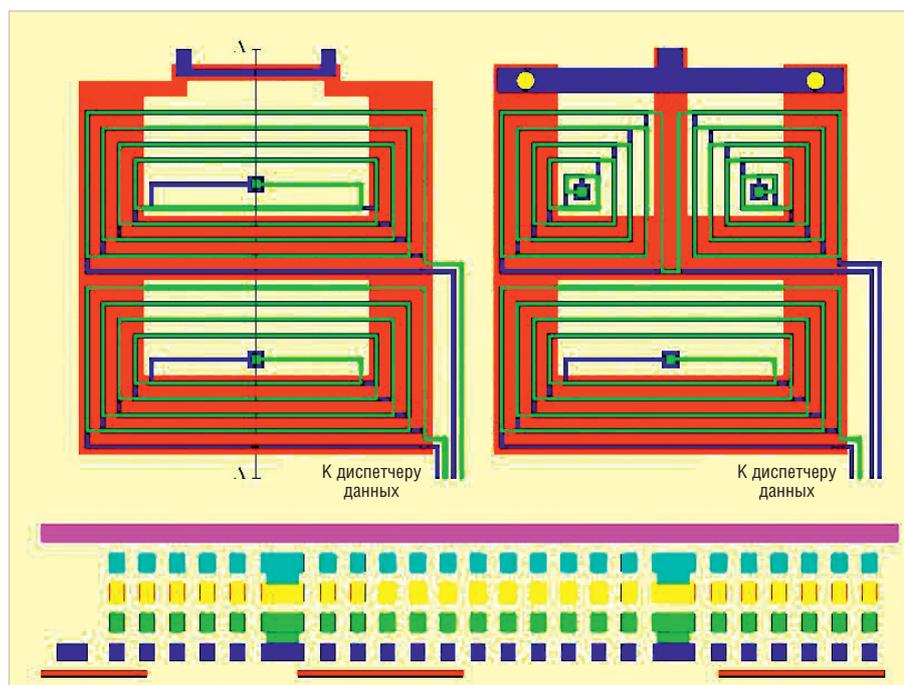


Рис. 9. Структурная схема сверхпроводящего конвертера магнитного потока SDACF [36]

проводящих схем, предназначенных для таких приложений, как высокоскоростные энергоэффективные вычисления, беспроводная связь, сверхточная метрология [35].

Кроме функций управления и цифро-аналогового преобразования SDACF выполняет также функцию памяти. Структура SDACF показана на рис. 9 [36]. Конструктивно сверхпроводящий конвертер магнитного потока выполнен в виде комбинации спиралевидных индуктивностей, связанных между собой при помощи полосковых волноводов и микротрансформаторов.

Две накопительные катушки индуктивности (1 нГн) реализованы в виде концентрических спиральных колец (синяя и зелёная). На рис. 9 показана обмотка в два слоя металла. Модели D-Wave второго поколения используют четырёхслойные спирали с шириной линии и расстоянием между ними порядка 0,25 мкм.

Левая катушка, соответствующая грубой настройке данных (least significant – LSD), связана с выходом целевого устройства. Правая катушка, предназначенная для тонкой настройки (most significant – MSD), выполняет управляющую функцию в узком диапазоне и соединена с джозефсоновским переходом через многоступенчатую индуктивную схему (MSD ladder stage – MSDLS). Обе катушки подключены к высокочастотному источнику управляющих импульсов SFQ, обеспечивающих смещение по току для всех программируе-

мых устройств на кристалле. Для того, чтобы минимизировать статическую мощность, рассеиваемую на кристалле во время программирования, использовались очень низкие токи смещения, порядка 50 мкА, и прецизионные шунтирующие резисторы с номиналами в районе десятых долей Ома.

Магнитный поток LSD связан с контуром тонкой настройки не только через индуктивную схему MSDLS, но также и напрямую через магнитный выход MSD. Таким образом, SDACF представляет собой трёхпортовое устройство (LSD, MSD и OUT), позволяющее работать с полной матрицей индуктивности.

Токи сверхпроводимости генерируют кванты магнитного поля, которые фиксируются в каждом новом цикле с помощью SQUID. В свою очередь, SDACF генерирует соответствующие значения MSD и LSD. Эти значения записываются и сохраняются в самом сверхпроводящем конвертере. Отдельные кванты магнитного потока могут быть загружены или выгружены из SDACF с помощью источника высокочастотных импульсов SFQ.

Если петля MSD, например, может хранить до 8 квантов магнитного потока любой полярности, то SDACF может обеспечить 16 различных значений выходного потока. Таким образом, может быть реализован 4-битный сверхпроводящий цифро-аналоговый преобразователь магнитного потока. В случае, когда петля MSD способна запомнить 16 различных значений

сохранённого потока, двухкаскадное устройство будет представлять собой 8-битный конвертер.

Блок MSD позволяет смещать цикл кубита CCJJ в узком динамическом диапазоне шириной около 5 бит. С помощью LSD реализуется грубое смещение потока кубитов во всём динамическом диапазоне.

Жёлтыми кружками на верхней правой части рис. 9 обозначены переходы Джозефсона.

В нижней части рис. 9 показана схема поперечного сечения реального макета SDACF вдоль линии разреза.

Следует отметить, что управление одним кубитом может быть реализовано также с помощью нескольких SDACF.

Краткий обзор этих нескольких статей позволяет сказать, что общая схема процессора вычислителя с квантовым отжигом должна содержать как минимум следующие элементы: логические кубиты; системы объединения кубитов rf-SQUID; системы управления SDACF; кубиты, используемые для коррекции вычислительных ошибок.

Поскольку наиболее близкими к квантовому отжигу по структуре процесса являются задачи типа «Изинга», то их пошаговые алгоритмические точки отработки можно интерпретировать в виде узлов в графах. Для решения сложных задач идеальным представляется вариант, когда все узлы в графах объединены между собой, то есть каждый кубит системы связан со всеми остальными кубитами системы. Однако пытаться реализовать на практике этот вариант очень сложно технически и крайне невыгодно экономически.

Связанная система из восьми кубитов ведет себя как «истинный квантовый макрообъект», полностью подчиняющийся законам современного уровня физики микромира. Если в системе больше десяти связанных кубитов, то ими становится трудно управлять, а также становится проблематично моделировать их поведение.

Кроме того, размеры «ответвителей», связывающих устройства управления кубитами, не должны быть больше определённых значений, превышение которых может привести к потере когерентности и увеличению времени вычислений. Процессоры на базе ДП в современных квантовых вычислителях изготавливают в виде сложных микросхем, содержащих не только чисто вычислительные кубиты, но также промежуточные схемы внешне-

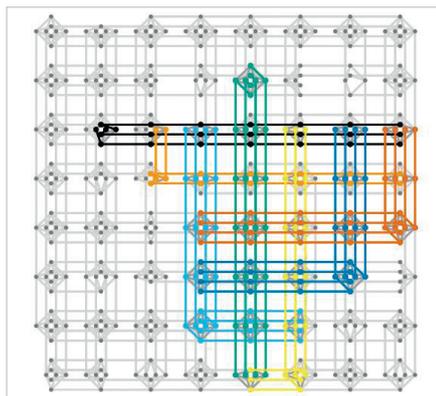


Рис. 10. Кубиты в элементарной ячейке QPU D-Wave 2000Q в топологии Chimera имеют форму удлинённых петель, соединённых между собой [37]

го управления и аналоговые линии для персональной связи с кубитами. Эти особенности стараются учитывать все производители квантовых вычислителей. Поэтому количество приемлемых типов структуры квантовых вычислителей тоже ограничено.

Например, лидирующая в этом направлении канадская фирма D-Wave использует в конструкциях своих процессоров для квантовых вычислителей с отжигом всего три основных типа топологий: Chimera; Pegasus; Zephyr. Конструкция одного из наиболее известных вычислителей QPU D-Wave 2000Q содержит 2048 кубитов и 6016 ответвителей, соединённых в топологии Chimera.

Кубиты в элементарной ячейке QPU в топологии Chimera имеют форму удлинённых петель (рис. 10) [37]. Каждый кубит связан с четырьмя другими в пределах своей ячейки через встроенные соединительные элементы. Между собой элементарные ячейки взаимодействуют с помощью внешних цепей, которые соединяют коллинеарные пары кубитов в одной строке или столбце. Внутри каждой ячейки также размещены цифро-аналоговые объединительные устройства (SDACFF), конструкция которых была рассмотрена выше.

В процессорах с топологией Pegasus элементарная ячейка состоит из 48 кубитов, половина петли которых принадлежит одной ячейке, а другая половина находится на территории соседней ячейки (рис 11) [38]. Кубиты ориентированы вертикально или горизонтально, аналогично тому, как это сделано в топологии Chimera. Разница заключается в том, что в случае Pegasus внутренние ответвители сое-

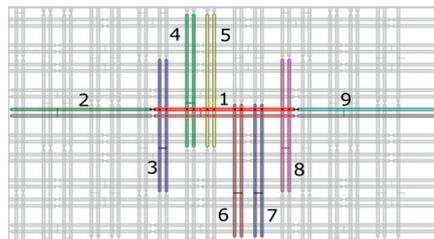


Рис. 11. Топология Pegasus в квантовых вычислителях D-Wave [38]

диняют пары ортогональных кубитов с противоположной ориентацией. Каждый кубит соединён с 12 другими кубитами с помощью внутренних коммутирующих линий. В этой топологии существуют три разные функциональные группы соединителей: внутренние (internal couplers), внешние (external) и дополнительные (odd couplers). При этом кубиты в каждой из групп объединяются по специальным схемам.

Связанные кубиты показаны на рис. 11 в виде горизонтальных и вертикальных петель. Горизонтальный кубит № 1 в центре, а также его нечётный соединитель (odd coupler) и парный кубит, выделенные красным, внутренне связаны (internally coupler) с вертикальными кубитами, в парах от 3 до 8. Каждая пара и её нечётный соединитель (odd coupler) внешне (externally coupler) связаны с горизонтальными кубитами 2 и 9. Они показаны разными цветами.

В новом процессоре QPU D-Wave применяется топология следующего поколения, названная «Zephyr», в которой кубиты ориентированы вертикально или горизонтально, как в Chimera и Pegasus, и связаны объединителями трёх типов, аналогичными «Pegasus coupler». Кубиты в топологии Zephyr имеют шестнадцать внутренних соединителей, связывающих их с ортогональными кубитами. Кроме того, предусмотрены два дополнительных внешних и два нечётных соединителя. Фрагмент топологии Zephyr показан на рис. 12 [39].

Таким образом, существующие технологии квантового отжига позволяют решать сложные задачи с алгоритмами на базе графов с сотнями тысяч вершин. Правда, нужно ещё раз подчеркнуть, что квантовый отжиг даёт не точное решение, а позволяет получить лишь только результат с вероятностью, наиболее приближённой к оптимальному ответу.

Современные квантовые вычислители – это сложные технические устройства стоимостью в миллионы долларов

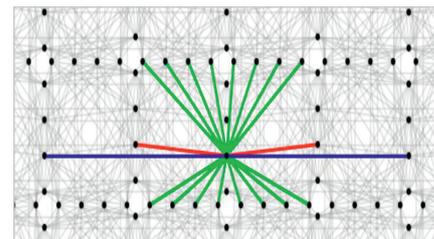


Рис. 12. Фрагмент топологии Zephyr в квантовых вычислителях D-Wave [39]

США. Поэтому ведущие разработчики и производители QPU предлагают воспользоваться облачными сервисами, позволяющими бесплатно в тестовом режиме получить навыки работы с квантовыми вычислениями и оценить необходимость приобретения такого устройства.

Например, D-Wave поддерживает интернет-портал «The Leap™ Quantum Cloud Service», который предоставляет в реальном времени удалённый доступ к одному из современных квантовых вычислителей [40].

Кроме того, в линейке продукции D-Wave есть мощное программное средство «Ocean», позволяющее подобрать соответствующий квантовый алгоритм и адаптировать его под конкретную задачу пользователя.

Сервис другой известной фирмы «Amazon Braket», предназначенный для удалённых квантовых вычислений в облаке, позволяет запускать собственные алгоритмы в симуляторе или на реальном оборудовании для квантовых вычислений (QPU). На этой платформе процесс программирования может быть реализован с помощью Amazon Braket SDK с использованием языка Python [41].

Удалённое обслуживание разработчиков алгоритмов квантового отжига, предназначенных для конкретных приложений, таких как машинное обучение, оптимизация городского трафика, квантовое моделирование и других, предлагает испанская фирма Qilimanjaro Quantum Tech [42], которая работает в рамках «Проекта Европейской комиссии AVaQus H2020» по квантовому отжигу [43].

Наряду с интенсификацией развития направления разработок оборудования для квантового отжига в последнее время наблюдается также рост новых публикаций о достижениях в области эмуляций квантового отжига. Это относительно новое направление, разработанное концерном Fujitsu, получило название «Цифровой отжиг – Digital

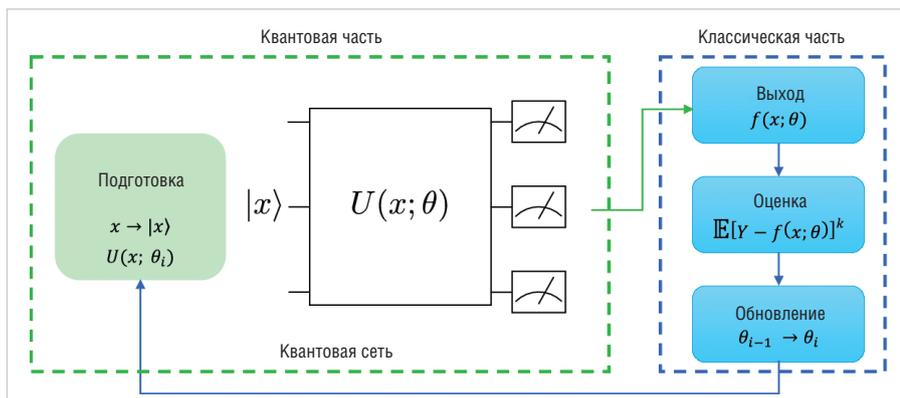


Рис. 13. Обобщённая структурная схема вариационного квантового вычислителя собственных значений «Variational Quantum Eigensolver – VQE» [49]

Annealer (DA)». Метод Fujitsu DA, предназначенный для решения задач квадратичной неограниченной двоичной оптимизации (QUBO), основан на эмуляции процесса квантового отжига с помощью уникальной микросхемы. Эта микросхема также была разработана фирмой Fujitsu специально для решения задач комбинаторной оптимизации с использованием параллельных вычислений возможных состояний на основе весовых матриц и векторов смещения. Данная технология позволяет решать сложные задачи с использованием 1024 переменных. В настоящее время Fujitsu разрабатывает модификацию микросхемы, которая позволит увеличить количество переменных до 8192 [44].

В этой связи можно также отметить японский электронный концерн NEC, который успешно реализует на практике свои новые симуляторы отжига на основе векторных компьютеров, предназначенные для решения крупномасштабных задач комбинаторной оптимизации.

Вариационные квантовые вычислители собственных значений

В современной квантовой химии и физике твёрдого тела существует обширный класс задач, связанных с моделированием атомов, молекул и их кластеров. Решение этих задач является крайне актуальным для областей, связанных с разработкой новых материалов и лекарственных препаратов. Суть проблемы заключается в поиске точных решений уравнений Шрёдингера для сложных атомов и молекул.

В начале 2000-х годов для моделирования простейших атомов и молекул стали использовать квантовые компьютеры и алгоритмы квантовой фазовой

оценки (quantum phase estimation – QPE). Алгоритм квантовой оценки фазы QPE эффективно решает задачу нахождения собственных значений (eigenvalue) конкретного собственного вектора (eigenvector) путём тщательной, многоэтапной переборки различных вариантов в процессе эволюции квантовой системы [45].

В начале 2000-х годов для подобных задач стали использовать универсальные цифровые вентильные квантовые компьютеры (UDGQC) и квантовые вычислители с отжигом [46, 47].

Однако после первых удачных работ выяснилось, что UDGQC и QPU с квантовым отжигом не справляются с решением более сложных задач из-за крайне сложных квантовых алгоритмов моделей атомов и молекул. Поэтому остро встал вопрос оптимизации сложных расчётов, проводимых с помощью квантовых вычислений.

Процесс квантовых вычислений, реализуемый как с помощью UDGQC, так и при использовании QPU с квантовым отжигом, состоит из двух основных этапов. На первом этапе задача, которую нужно решить, адаптируется под существующие квантовые алгоритмы. При этом используются стандартные компьютеры с бинарной логикой (SBLC). На втором этапе реализуется непосредственно процесс вычислений с помощью квантового компьютера.

В процессе поисков решения проблемы оптимизации квантовых вычислений возникла идея о том, чтобы разделить сложную задачу на более простые составляющие и распределить этапы их выполнения между классическим и квантовым компьютером. В результате на свет появились два класса устройств, получившие название «вариационные квантовые вычислители собственных значений».

Вариационный квантовый вычислитель собственных значений («Variational Quantum Eigensolver – VQE») был разработан специально для получения вероятностных оценок основных состояний (eigensolvers) сложных квантовых систем с использованием вариационного метода (variational) на базе универсальных цифровых вентильных квантовых компьютеров (UDGQC) и стандартных цифровых компьютеров с двоичной логикой (SBLC) [48].

Другой тип вариационных вычислителей собственных значений, объединивший классический цифровой бинарный компьютер и вычислитель с квантовым отжигом, получил название «Quantum Annealer Eigensolver – QAE». Этот тип вычислителей рассмотрен во второй части данного раздела статьи.

Обобщённая структурная схема вариационного квантового вычислителя собственных значений показана на рис. 13 [49].

В случае цифрового вентильного квантового компьютера UDGQC некоторое начальное квантовое состояние системы закодировано каким-либо образом в n кубитах. Цель квантовых вычислений заключается в том, чтобы получить решение уравнения Шрёдингера для волновой функции времени. Основной и наиболее трудной задачей в этих вычислениях является поиск алгоритма, описывающего последовательность использования квантовых операторов (gate). В результате действия этих операторов нужно сформировать аппроксимирующую функцию с некоторой заданной погрешностью.

Вариационные квантовые решатели основных состояний (VQE) фактически представляют собой симбиоз классического и квантового компьютеров. При этом роли между ними распределяются следующим образом. Классический компьютер SBLC производит градиентный поиск в пространстве всех возможных аргументов функций, чей минимум требуется найти. Квантовый компьютер (UDGQC) определяет мгновенные значения гамильтониана системы и находит с некоторой вероятностью его основное (наименьшее) значение.

Одним из основных моментов в теории VQE является хорошо известный «вариационный метод». Не вдаваясь в математические подробности, в первом приближении суть этого метода можно представить как упрощение сложной задачи на начальном этапе решения с

целью получения некоего начального оценочного результата. Вместо задачи с многочисленными неизвестными варьируемыми параметрами в качестве первого пробного варианта используют какую-нибудь упрощённую функцию с небольшим количеством параметров. При этом ожидаемое значение гамильтониана, вычисленного в пробном состоянии, оценивается в рамках VQE как целевая функция. Шаг за шагом, варьируя параметры, на каждом из следующих этапов вычислений получают результат, максимально соответствующий искомой функции.

С точки зрения квантовой механики в нашем случае полезно вспомнить утверждение о том, что среднее значение гамильтониана в любом состоянии не может быть ниже, чем его среднее значение в основном (наименьшем) состоянии. Поэтому, если в процессе вычислений мы будем пытаться пошагово минимизировать средние значения гамильтониана в промежуточных состояниях, мы не сделаем грубых ошибок.

Как правило, опытному специалисту, знакомому с предметом, удаётся найти такие простые подстановочные функции (ansatz), которые позволяют аппроксимировать минимальное значение гамильтониана.

Таким образом, упрощённый процесс вычислений с помощью VQE можно представить как последовательность следующих этапов:

- 1) определение пробной функции (ansatz) и характеризующих её параметров с помощью блока классического компьютера;
- 2) определение мгновенных и средних значений гамильтониана в промежуточных точках с помощью блока квантового вычислителя;
- 3) нахождение наиболее вероятного минимального значения гамильтониана путём перебора параметров с помощью блока квантового компьютера.

В том случае, когда используется раздельная схема, квантовый компьютер и стандартный компьютер с двоичной логикой решают каждый свою задачу последовательно.

В квантовых вычислениях с использованием метода VQE часто используется термин «ansatz» (анзац), под которым подразумевается пробная эвристическая функция на отправной точке вычислений. Как правило, ansatz имеет несколько параметров, позволяю-

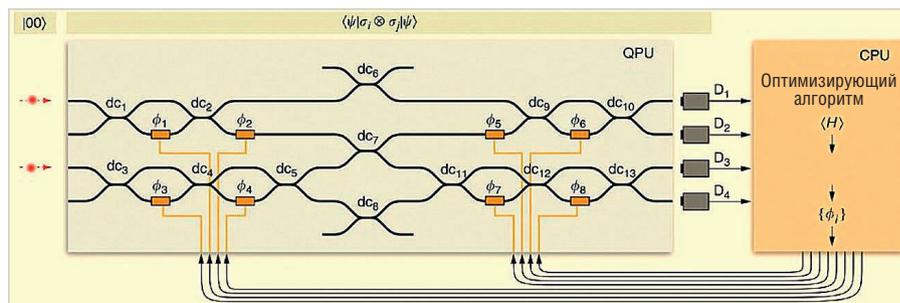


Рис. 14. Структурная схема работы экспериментальной установки VQE [53]

щих варьировать поведение функции в широком диапазоне. Зная, какой процесс мы моделируем, можно на основе имеющегося опыта предположить, какую примерно целевую функцию мы ищем. Чем точнее первое предположение (ansatz) – тем удачнее будет окончательное решение. В варианте гибридной схемы первоначально с помощью квантового процессора подготавливается эта пробная функция «ansatz». Квантовый компьютер UDQC, перебирая заданные для ansatz параметры, ищет наиболее вероятное минимальное значение целевой функции. При этом стандартный компьютер SBLC контролирует и корректирует параметры ansatz на каждом этапе работы. Практические рекомендации и простые примеры решения задач с помощью VQE приведены на сайтах [50, 51].

Исторически сложилось так, что большинство опубликованных статей приводят результаты расчётов методом VQE с использованием универсальных цифровых вентильных квантовых компьютеров UDQC. Так, например, в работе [52] расчёты выполнены с помощью квантового компьютера «Google Sycamore quantum processor».

Впервые метод VQE был на практике реализован с помощью квантового компьютера с фотонными кубитами. На рис. 14 показана структурная схема работы экспериментальной установки VQE из этой работы [53].

Принимая во внимание обозначения, приведенные на рис. 13, работу установки можно объяснить следующим образом. В гибридной схеме использован квантовый вентильный компьютер (QPU) с фотонными кубитами. Квантовые состояния кубитов $|00\rangle$ зависят от их вертикальной или горизонтальной поляризации. Управление состояниями фотонов реализовано с помощью лазеров с перестраиваемой частотой. Для обработки квантовой информации были использованы чипы с выгравированными

волноводами, по которым мог перемещаться фотон. На схеме, показанной на рис. 14, ожидаемое значение целевой функции «QUDIO», вычислялось с помощью квантового процессора с вентильным управлением QPU. Состояние волновой функции $|\psi\rangle$ варьировалось с помощью фазовращателей ϕ_1 – ϕ_8 , обозначенных на рис. 14, как оранжевые прямоугольники. Кроме того, один гейт типа CNOT задействован для управления контролирующими и контролирующими кубитами. Измерения текущих состояний кубитов выполнялись с помощью фотонных детекторов $dc(1-4)$ и $dc(9-13)$ с коэффициентом отражения 50% и направленных ответвителей $dc(5-7)$ с коэффициентом отражения 30%. Сигналы со схем совпадений $D(1-4)$ передавались на центральный процессор с двоичной логикой CPU, который вычислял набор параметров, необходимых для вычисления следующего квантового состояния системы и записывал их в память QPU.

Одно из основных преимуществ использования метода VQE заключается в том, что он позволяет разбить исходную задачу на несколько упрощённых подзадач и распределить их по разным квантовым процессорам. Для того чтобы полностью использовать такие вычислительные преимущества в крупномасштабных задачах, применяется схема квантовой распределённой оптимизации «Quantum Distributed Optimization – QUDIO», которая разбивает исходную задачу на k подзадач и распределяет их по k квантовым процессорам с последующей параллельной оптимизацией.

Другой метод, получивший название «Shuffle-QUDIO», позволяет значительно снизить частоту обмена данными между квантовыми процессорами, а также снизить погрешность аппроксимации в прикладных задачах квантовой химии [54].

Схема Shuffle-QUDIO включает в себя три программно-аппаратных блока, выполняющих соответственно функции инициализации, локального обновления и финальной синхронизации. На этапе инициализации несколько копий исходного анзаца (ansatz) и соответствующий проблемный гамильтониан H рассылаются в каждый из локальных процессоров. При этом каждый процессор использует одинаковые начальные значения генератора случайных чисел. Для каждой новой итерации в локальных процессорах набор наблюдаемых мгновенных значений H_i принимает случайный по порядку следований характер. Поэтому наблюдаемые значения каждого процессора не пересекаются друг с другом, а объединение полученных с их помощью результатов вычислений позволяют с большой точностью оценить целевой гамильтониан. После выполнения назначенных локальных итераций параметры каждого локального анзаца агрегируются и переназначаются всем локальным процессорам. Этот процесс получил название глобальной синхронизации. Когда будет достигнуто максимальное число t итераций, алгоритм Shuffle-QUDIO выполняет окончательную финальную синхронизацию и выводит конечные результаты вычисления параметров целевой функции.

Следует обратить внимание на то, что вычислители VQE на базе вентильных квантовых компьютеров позволяют вычислять не только значения гамильтониана и волновой функции, но также и её производные. Последнее объясняется тем, что дифференцирование уравнения волновой функции по параметру сводится к измерению некоего набора операторов, рассмотренных в первой части статьи. Этой функции лишены вычислители на базе квантового отжига.

Конструктивно VQE может быть представлен в виде единого законченного устройства либо в форме двух отдельных независимых блоков, объединённых общим программно-аппаратным интерфейсом со встроенным алгоритмом VQE. Так, например, с квантовым компьютером IBM можно работать удалённо [55, 56].

Протестировать пошаговый процесс VQE на простейших примерах можно с помощью симулятора на сайте [57].

Вариационные вычислители собственных значений «Quantum

Annealer Eigensolver – QAE» объединяют метод квантового отжига с классическим бинарным компьютером.

Принципиальная возможность реализации вариационного метода с помощью адиабатических квантовых вычислений обоснована в статье [58], в которой предложена теоретическая схема создания алгоритма вариационного метода в приложениях адиабатических квантовых вычислений. Основная трудность, сдерживающая практическую реализацию подобного рода вычислений, связана с крайне сложными алгоритмами, необходимыми для моделирования процессов квантовой химии.

Рассмотренные в предыдущем разделе квантовые вычислители с отжигом успешно справляются с задачами типа чистого «Изинга» и с задачами, сводимыми к графам. Поэтому для того, чтобы использовать квантовые вычисления в моделях электронных структур атомов, необходимо каким-то образом адаптировать алгоритмы решения задач квантовой химии к «изингоподобным» алгоритмам.

В работе [59] показано, что, в принципе, существует точное соответствие между гамильтонианом электронной структуры атомов и гамильтонианом «Изинга». Это теоретическое рассуждение было подтверждено результатами квантового моделирования преобразованного гамильтониана «Изинга» для молекул H_2 , He_2 , NeH^+ и LiH , совпадающими с точными численными расчётами. Таким образом, было продемонстрировано, что можно преобразовать молекулярный гамильтониан в гамильтониан типа «Изинга», который достаточно просто можно реализовать на доступных в настоящее время квантовых процессорах с отжигом.

Другое направление использования квантовых вычислителей с отжигом для моделирования атомов и молекул связано с новыми функциями QPU D-Wave, позволяющими проводить обратный отжиг, а также останавливать процесс отжига в промежуточной точке адиабатической эволюции.

Кроме того, новые квантовые процессоры D-Wave могут быть задействованы для приблизительных оценок энергий больших молекул по методу Хартри–Фока. Поскольку при этом поведение самих электронов заменяется взаимодействием с неким усреднённым полем, то гамильтониан упрощённой системы существенно упрощается. В результате

появляется реальная возможность его оценок на квантовых вычислителях с отжигом [60].

Хотя преобразование гамильтониана электронных структур атомов в форму типа «Изинга» в принципе возможно, оно вызывает экспоненциальный рост как самого конечного гамильтониана, так и времени вычислений. Это, в свою очередь, приводит к потере когерентности квантовой системы и невозможности проводить расчёты с приемлемыми уровнями ошибок. Один из способов решения этой проблемы, предложенный в работе [61], заключается в использовании нового смешанного дискретно-непрерывного оптимизационного алгоритма для вычислителей с квантовым отжигом. Основная идея этого нового алгоритма состоит в том, что этапы задачи сводятся к определению наименьшего собственного состояния кластера связанных кубитов (qubit coupled cluster – QCC). Использование этого нового алгоритма и процессора с отжигом D-Wave 2000Q позволило рассчитать основные состояния QCC для молекул LiH , H_2O и C_6H_6 .

Благодаря платформе D-Wave, позволяющей удалённо работать с вычислителями на базе квантового отжига, в последние годы стало появляться всё больше работ, в которых описываются результаты экспериментов вариационных квантовых вычислений с использованием процессоров этой фирмы. На сайте фирмы в свободном доступе есть программное обеспечение с открытым исходным кодом D-Wave, которое работает совместно с Ocean и SDK Python [62].

Для того чтобы отличать метод VQE, реализуемый с помощью цифровых вентильных квантовых компьютеров, от схемы вариационной модели на базе квантового вычислителя с отжигом, в пионерской работе [63] авторы ввели новый термин «Вычислитель собственных значений с квантовым отжигом – Quantum Annealer Eigensolver (QAE)».

В алгоритме этой схемы задействован метод кодирования состояния кубитов, в котором используется степень числа два в качестве одного классически оптимизированного параметра. Вместо классической модели «Изинга» используется квадратичная неограниченная двоичная оптимизация (Unconstrained Binary Optimization – QUBO). При этом спины заменены двоичными переменными.

Структурная схема вычислителя собственных значений с квантовым отжигом (Quantum Annealer Eigensolver QAE) показана на рис. 15 [63].

Как было показано выше, топология современных вычислителей с квантовым отжигом предполагает размещение небольшого количества полностью связанных кубитов внутри сетки большего количества слабо связанных физических кубитов (рис. 10, 11, 12). Чтобы эффективно работать с такого рода топологиями, в методе QAE используется дополнительная утилита из программного обеспечения QUBO, получившая название «qbsolv30». Эта утилита делит большую общую задачу QUBO на более мелкие фрагменты (subQUBO) и минимизирует их по отдельности. В процессе QAE фрагменты SubQUBO обрабатываются каждый по своему заданному алгоритму с помощью процессора квантового отжига D-Wave.

Весь процесс QAE можно разбить на два этапа. На первом этапе, показанном в верхней части рис. 15, строится электронная матрица гамильтониана с использованием классических кодов квантовой химии и одноэлектронных

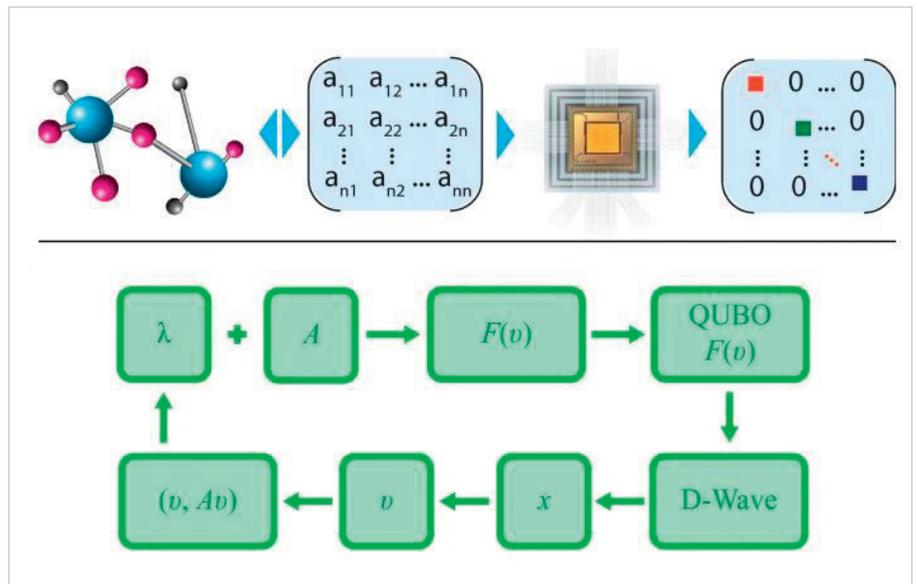


Рис. 15. Структурная схема вычислителя собственных значений с квантовым отжигом (Quantum Annealer Eigensolver – QAE) [63]

самосогласованных молекулярных орбиталей Хартри–Фока. Матрица полного взаимодействия конфигурации (Full Configuration Interaction – FCI) и матрица полного активного пространства самосогласованного поля (Complete Active Space Self-Consistent Field – CASSCF) созданы с использова-

нием внутреннего модифицированного кода P_{sl4}. Такой подход позволил преобразовать код верхнего уровня в модуль Python и использовать его в сложных вычислительных процессах [64].

На втором этапе (нижняя часть рис. 15) входная матрица A, определяющая целевую функцию F(v), преоб-

ИНВЕРТОРЫ «ММП-ИРБИС»

ИНК2500-1С-1U ТУ6589-077-40059437-06

Выходная мощность 2500 Вт/3200 ВА

Инверторы ИНК2500-1С дополняют сеть оперативного постоянного тока (СОПТ) на электрических подстанциях сетью переменного тока.

Позволяют обеспечить бесперебойным питанием нагрузку до 15 кВт на фазу



Все характеристики серии



ММП-ИРБИС

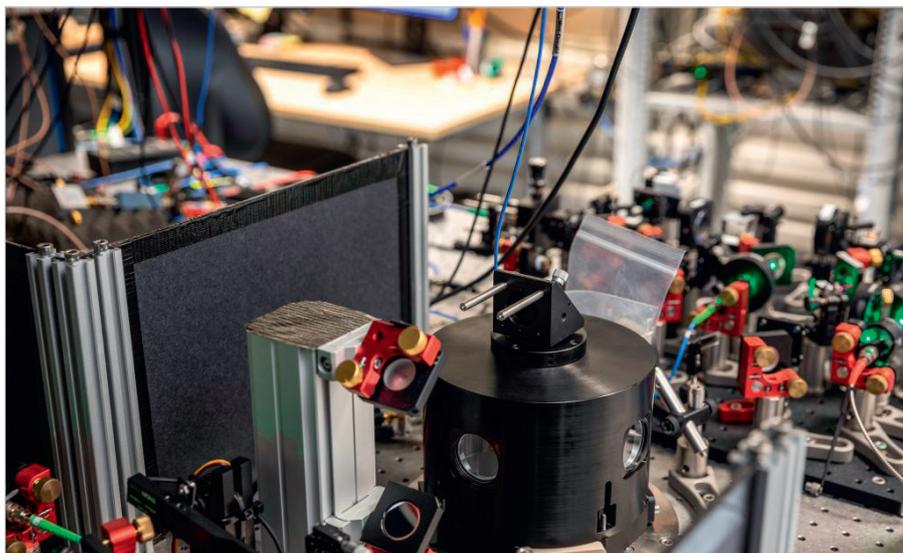


Рис. 16. В эксперименте по квантовой телепортации между тремя несмежными узлами детекторы на основе замещённых атомов работают при температуре минус 270°С [70]

разуется в выражения QUBO, которые затем минимизируются в процессе квантового отжига. Процесс QAE используется для обработки матрицы и нахождения нескольких собственных значений гамильтониана и собственных векторов, характеризующих волновые функции.

При этом QAE автоматически сопоставляет частные этапы задачи поиска собственных значений с соответствующими блоками QUBO.

Процесс минимизации задаётся как последовательная пошаговая коррекция матрицы A и целевой функции $F(v)$. Если задано N шагов, то для вычисления N собственных пар QAE выполняет N последовательных запусков, каждый раз с соответствующим образом модифицированной матрицей A .

Более подробно этот процесс описан в статье [65]. Отмеченные в этой статье эксперименты по использованию QAE для моделирования атомов являются лишь небольшим репрезентативным подмножеством тех методов, которые можно использовать для создания входных матриц QAE. Поскольку QAE является открытым многоцелевым методом, то он, в принципе, может быть использован для работы со многими известными приложениями, характеризующимися широким спектром операторов и прикладных программ.

Заключение

Базовые законы современной физики микромира в основном были сформулированы в течение XX века. Этот этап, который принято называть периодом «первой квантовой революции», принёс

миру новые устройства и технологии: лазеры, транзисторы, компьютеры, беспроводные системы связи, спутниковая навигация, смартфоны, томографы и т.д.

В настоящее время мы наблюдаем вторую квантовую революцию, которая уже позволила учёным манипулировать отдельными квантовыми частицами, открывать новые ядерные частицы и многое другое.

По мнению ведущей межправительственной организации Quantum Flagship, курирующей разработки квантовых технологий в Европейском союзе, мир сейчас находится на поворотном этапе, когда наука готова передать промышленности знания и технологии, необходимые для предоставления инновационных услуг и продуктов, таких как безопасная квантовая связь, чрезвычайно точные микродатчики и первые квантовые компьютеры.

Сегодня ведущие страны мира включились в гонку по созданию и завоеванию рынка этих ключевых технологий будущего. Так, США планирует вложить более 1,2 миллиарда долларов в квантовые технологии за период с 2019 по 2028 год. Китай строит свою «Национальную лабораторию квантовых информационных наук» стоимостью 10 миллиардов долларов США.

Евросоюз в лице Quantum Flagship объявил о выделении около миллиарда евро на поддержку следующих квантовых технологий [66]:

- квантовые вычисления;
- квантовое моделирование;
- квантовая связь;
- квантовая метрология и зондирование.

О значимости исследований в области квантовой механики говорит Нобелевская премия по физике, которая в 2022 году была присуждена французскому учёному Алену Аспекту (Alain Aspect), физику из США Джону Клаузеру (John F. Clauser) и австрийскому физику Антону Цайлингеру (Anton Zeilinger) за экспериментальные доказательства наличия квантовой запутанности фотонов в случае невыполнения неравенства Белла, а также совокупный фундаментальный вклад в раздел квантовой информационной физики [67].

Поскольку свойство квантовой запутанности кубитов, рассмотренное в первой части этой статьи, является одним из краеугольных камней теории квантовых вычислений, уместно сказать несколько слов об этой Нобелевской премии.

Прежде всего, нужно обратить внимание на то, что Нобелевскую премию эти учёные получили за работы, которые были выполнены задолго до того, как их идеи были претворены в жизнь, в частности, в виде современных квантовых процессоров. В статье, опубликованной в 1964 г., Джон Стюарт Белл предложил способ проверки существования квантовой запутанности частиц. Только в 1972 г. уровень развития техники измерений позволил Джону Клаузеру экспериментально доказать, что неравенства Белла не выполняются, а значит, существует квантовая когерентность и запутанность. Однако нашлось много критиков, которые утверждали, что эксперимент Клаузера недостаточно корректен из-за возможности «утечки» фотонов. Почти через десять лет в 1981 г. Ален Аспект усовершенствовал установку Клаузера и смог исключить влияние испускаемых фотонов на результаты измерений. Этот эксперимент подтвердил справедливость квантовой теории и наличие эффекта запутанности. Тем не менее оставались всё ещё некоторые теоретические аргументы (fair-sampling), подвергающие сомнению квантовую запутанность.

Исследовательская группа Антона Цайлингера в 1997 году впервые продемонстрировала «квантовую телепортацию», с помощью которой один фотон передавал на расстоянии свою поляризацию другому фотону. Тем самым ещё раз была подтверждена справедливость квантовой теории в отношении запутанности частиц [68].

В 2013 году коллектив авторов во главе с Антоном Цайлингером опубликовал большую статью с описанием подробных экспериментальных

доказательств существования запутанности фотонов. Эта статья окончательно закрыла все возможные теоретические лазейки, так называемые «loopholes», опровергающие явление квантовой запутанности [69].

С развитием технического уровня экспериментальной физики появились всё новые и более тонкие эксперименты по проверке «квантовой телепортации». В мае 2022 года была опубликована статья, описывающая результаты уникального эксперимента учёных из объединённой группы Технологического университета Делфта (Delft University of Technology). Голландским физикам впервые удалось реализовать на практике квантовую телепортацию между тремя несмежными узлами (рис. 16) [70]. Сам термин «teleporting quantum information» означает способ обмена информацией о своём квантовом состоянии между двумя когерентными частицами. Идея квантовой телепортации заключается в том, что запутанные фотоны мгновенно обмениваются информацией о своём состоянии даже на больших расстояниях. То есть не надо пересылать саму частицу света по волноводу, а достаточ-

но иметь запутанные фотоны. Этот эксперимент является ещё одним шагом на пути создания квантового Интернета, безопасного обмена конфиденциальной информацией, а также соединения нескольких квантовых компьютеров вместе для увеличения их вычислительных возможностей [70].

Ещё одна всемирно известная премия «Breakthrough Prize in Fundamental Physics» была присуждена в октябре 2022 года Чарльзу Беннетту (Charles Bennett) из IBM, Жилу Брассару (Gilles Brassard) из Монреальского университета, Питеру Шору (Peter Shor) из Массачусетского технологического института и Дэвиду Дойчу (David Deutsch) из Оксфордского университета за фундаментальные разработки в области квантовых вычислений. Мы уже упоминали в этой статье имена этих учёных. Математик Питер Шор в 1994 году разработал уникальный полиномиальный алгоритм факторизации для квантового компьютера. Физик Дэвид Дойч в 1985 году сформулировал основные принципы квантовых вычислений.

В 1984 году Чарльз Беннетт и Жиль Брассар (фр. Gilles Brassard) предложили новый квантовый протокол рас-

пределения сеансового ключа для симметричной криптографии [71].

Можно упомянуть ещё множество других публикаций о том, как со временем чисто научные разработки по квантовым технологиям из лабораторий проникают в реальную жизнь. Мы ограничимся только несколькими наиболее яркими примерами разработок, анонсированных в 2022 году. В начале октября 2022 года корпорация NEC и её дочернее предприятие NEC Fielding Ltd., ведущий поставщик услуг по техническому обслуживанию и ремонту компьютерных сетей, представили систему планирования поставок запасных частей с использованием технологии квантовых вычислений для 23 районов Токио [72].

Весной 2022 года фирма IonQ (NYSE: IONQ) объявила о том, что её новейший квантовый компьютер Aria достиг рекордной производительности, позволяющей успешно выполнять квантовые вычисления с прикладными алгоритмами, содержащими более 550 вентилей. Как полагают руководители фирмы, IonQ значительно превосходит конкурентов в практическом использовании квантовых алгоритмов и явля-



IF/RF & Microwave Design

www.advantex.ru

РАЗРАБОТАНО
И ПРОИЗВЕДЕНО
В РОССИИ



ШИРОКОПОЛОСНЫЕ СИНТЕЗАТОРЫ ЧАСТОТ

с непрерывным шагом до 21 ГГц
и контрольно-измерительные приборы

**ЭЛЕКТРОННЫЙ
КАТАЛОГ**



+7(495) 721-4774 • info@advantex.ru
Москва, ул. Красноказарменная, д.13, стр. 1

ется несомненным мировым лидером с этой точки зрения [73].

Летом 2022 года корпорация Google представила свой новый виртуальный эмулятор квантового компьютера «Quantum Virtual Machine – QVM», который даёт возможность большому количеству людей присоединиться к разработкам фирмы в поисках квантовых алгоритмов и приложений. Кроме того, этот эмулятор предоставляет бесплатный доступ к инструментам разработки прототипов квантовых алгоритмов, адаптированных для ближайших квантовых компьютеров, и позволяет начинающим разработчикам сосредоточиться на конкретной стоящей перед ними задаче.

Квантовая виртуальная машина (Google – QVM) эмулирует работу одного из квантовых компьютеров фирмы, предоставляя такие необходимые инструменты, как эволюция кубитов, расфазировка, ошибки затвора и считывания и другие. В QVM результаты расчётов объединяются для имитации выходных данных, подобных квантовому процессору, с использованием моделей исследовательской группы по физике [74].

Примерно в это же время другой ведущий разработчик универсальных цифровых квантовых компьютеров с вентильной обработкой – корпорация IBM объявила о своей новой стратегической линии развития, основанной на создании гибридных модульных устройств, объединяющих квантовые процессоры с классической компьютерной инфраструктурой, управляемой Qiskit Runtime. Подобные гибридные платформы позволят пользователям легко встраивать квантовые вычисления в свои рабочие процессы и, таким образом, решать актуальные научные проблемы. Анонсированная дорожная карта IBM подразумевает создание до 2025 года квантовых компьютеров, содержащих 1121, 1386 и 4158 кубитов [75].

Китайская компания Baidu на конференции «Quantum Create 2022», проходившей в августе этого года в Пекине, представила свой новый квантовый компьютер под названием «Qian Shi», который сочетает в себе аппаратное обеспечение, программный стек Baidu-Liang Xi и ряд практических квантовых приложений. Как утверждается, «Qian Shi» является первым в мире всеплатформенным квантовым программно-аппаратным решением, доступным для использования

широкой публикой. Существующие в настоящее время приложения включают квантовые алгоритмы для разработки новых литиевых батарей, моделирования свёртывания белков, искусственного интеллекта, вычислительной биологии, финансовых технологий [76].

Как сообщает Nikkei Asia, японские исследовательские институты Fujitsu и Riken планируют совместно производить и продавать квантовые компьютеры уже в апреле 2023 года. Первый квантовый компьютер, который Fujitsu намерена выпустить на рынок, имеет 64 кубита и предназначен для исследовательских компаний, работающих в области фармакологии, новых материалов, автомобилестроения и финансового прогнозирования [77].

Кроме того, появилось много сообщений о новых чисто технических новинках, предназначенных для аппаратной части квантовых вычислителей. Новая перспективная разработка квантовой памяти описана в работе [78]. Такая память предназначена для того, чтобы считывать информацию с фотонного кубита, сохранять её и по требованию записывать в соответствующий кубит.

В этой разработке в качестве базовой структуры квантовой памяти использовался кристалл, легированный празеодимом (praseodymium), внутри которого лазером был выгравирован волновод. Этот микрометровый канал внутри кристалла удерживает и направляет фотон в заданном направлении. Два оптоволоконных световода обеспечивают прямой интерфейс между источниками фотонов, несущими квантовую информацию, и квантовой памятью.

Учёные из университета Оксфорда разработали переключатель поляризации для сверхбыстрого квантового компьютера с фотонными кубитами. Идея таких переключателей заключается в использовании гибридных нанопроводов, способных выборочно переключать устройства в зависимости от поляризации. Используемые в этой работе материалы, переходящие из одной фазы в другую при освещении светом с разной поляризацией, могут стать платформой для сверхбыстрых фотонных вычислений и хранения информации [79].

Из новинок 2022 года, предназначенных для общего пользования, мож-

но отметить исследовательскую группу из Токийского технологического института, которая разработала квантовый датчик для контроля заряда в автомобильных аккумуляторах. Датчик, изготовленный на базе алмазных кубитов с замещёнными атомами, значительно точнее и меньше по размерам и весу [80].

Особое значение имеют квантовые вычисления для приложений искусственного интеллекта и машинного обучения. Подробный обзор работ по использованию вычислителей квантового отжига D-Wave для таких приложений машинного обучения, как распознавание изображений, дистанционное зондирование изображений, вычислительная биология и физика элементарных частиц, продемонстрировал реальные преимущества квантовых вычислений по сравнению с классическими компьютерами с двоичной логикой. При этом наилучшие результаты в производительности достигаются при использовании гибридных схем Quantum Annealer Eigensolver – QAE [81].

В этой работе также подчёркивается, что усложнение модели исследуемого процесса вызывает необходимость увеличения вычислительных кубитов в квантовых процессорах.

В этой связи заслуживает внимания инновационный метод перемножения матриц, предложенный в октябре 2022 года британской фирмой DeepMind Technologies [82].

Эта новая версия AlphaZero под названием AlphaTensor предлагает более быстрый способ выполнения операции матричного умножения, которая является одной из фундаментальных в вычислениях с использованием машинного обучения. Если будет найден способ интеграции GPU в гибридные системы QAE, то квантовые вычисления могут быть более эффективными, экономичными и точными.

Можно ожидать, что будущие технологические усовершенствования квантовых вычислителей позволят увеличивать количество кубитов и уменьшать шум. Одновременное совершенствование алгоритмов квантовых вычислений, в частности VQE и QAE, откроет пути к более глубоким и тонким исследованиям в квантовой физике и химии, которые, в свою очередь, приведут к новым технологиям и материалам с уникальными качествами.

Литература

1. URL: http://openqemist.1qbit.com/docs/vqe_microsoft_qsharp.html.
2. URL: <http://www.riiia.org.ru/iznachalno-slozhnyie-i-nedeterminirovannyie-polinomialnyie-zadachi-2.html>.
3. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Adiabatic_theorem.
4. URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.1057726>.
5. URL: <https://quantum-computing.ibm.com/>.
6. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.60.15398>.
7. URL: <https://oxfordre.com/physics/view/10.1093/acrefore/9780190871994.001.0001/acrefore-9780190871994-e-32>.
8. URL: https://www.researchgate.net/publication/30484091_Superconducting_persistent-current_qubit.
9. URL: https://www.researchgate.net/figure/3-junction-persistent-current-flux-qubit-PCQ-inner-loop-surrounded-by-a-2-junction_fig1_1845612.
10. URL: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0302057>
11. URL: <https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.94.5.1634>.
12. URL: <https://rajsain.files.wordpress.com/2013/11/randomized-algorithms-motwani-and-rahgavan.pdf>.
13. URL: https://www.researchgate.net/figure/Adiabatic-quantum-computation-The-energy-landscape-is-first-a-simple-one-with-one-global_fig2_315416652.
14. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model.
15. URL: <https://arxiv.org/pdf/1807.07112.pdf>.
16. URL: https://www.scipost.org/SciPostPhys.12.4.118?acad_field_slug=physics.
17. URL: https://medium.com/@quantum_wa/quantum-annealing-cdb129e96601.
18. URL: <https://stanford.edu/~jeffjar/statmech/intro4.html>.
19. URL: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/28409975/>.
20. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2058-9565/abd59a/pdf>.
21. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.99.070502>.
22. URL: <https://docs.dwavesys.com/docs/latest/index.html>.
23. URL: https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_gs_2.html#getting-started-qa.
24. URL: <https://serviparticules.ub.edu/en/materials/articles/quantum-annealing?page=1>.
25. URL: https://www.researchgate.net/publication/44260599_An_Architectural_Framework_For_Quantum_Algorithms_Processing_Unit_QAPU.
26. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.123.120501>.
27. URL: <https://journals.aps.org/prapplied/abstract/10.1103/PhysRevApplied.18.044036>.
28. URL: <https://arxiv.org/pdf/1004.1628.pdf>.
29. URL: https://www.researchgate.net/publication/362434317_Magnetic_imaging_of_superconducting_qubit_devices_with_scanning_SQUID-on-tip.
30. URL: <https://arxiv.org/pdf/1004.1628.pdf>.
31. URL: <https://arxiv.org/abs/1304.4595>.
32. URL: <https://www.nature.com/articles/ncomms4243>.
33. URL: <https://arxiv.org/pdf/2205.12936.pdf>.
34. URL: <https://arxiv.org/pdf/1401.5504.pdf>.
35. URL: <https://www.nist.gov/programs-projects/flux-quantum-electronics>.
36. URL: <https://arxiv.org/pdf/1401.5504.pdf>.
37. URL: https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_gs_4.html#chimeraqubits3x3.
38. URL: <https://support.dwavesys.com/hc/en-us/articles/360054564874-What-Is-the-Pegasus-Topology->.
39. URL: https://www.dwavesys.com/media/2uznec4s/14-1056a-a_zephyr_topology_of_d-wave_quantum_processors.pdf.
40. URL: <https://www.dwavesys.com/solutions-and-products/cloud-platform/>.
41. URL: <https://aws.amazon.com/ru/blogs/quantum-computing/>.
42. URL: <https://www.qilimanjaro.tech/>.
43. URL: <https://cordis.europa.eu/project/id/899561/results>.
44. URL: <https://www.fujitsu.com/global/services/business-services/digital-annealer/>.
45. URL: <https://qiskit.org/textbook/ch-algorithms/quantum-phase-estimation.html>.
46. URL: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fchem.2020.587143/full>.
47. URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-14082-3_10.
48. URL: <https://arxiv.org/pdf/2111.05176.pdf>.
49. URL: <https://github.com/ericardomuten/qml-vqa-library>.
50. URL: <https://qiskit.org/textbook/ch-applications/vqe-molecules.html#Introduction>.
51. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/adts.201800182>.
52. URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.abb9811>.
53. URL: <https://www.nature.com/articles/ncomms5213>.
54. URL: <https://arxiv.org/pdf/2209.12454.pdf>.
55. URL: <https://developer.ibm.com/blogs/quantum-computing-qubit-vqe-variational-quantum-eigensolver/>.
56. URL: <https://quantum-computing.ibm.com/lab/files/qiskit-textbook/content/ch-applications/vqe-molecules.ipynb>.
57. URL: https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_vqe.html.
58. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/18/2/023023/pdf>.
59. URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.7b10371>.
60. URL: <https://arxiv.org/pdf/1811.05256.pdf>.
61. URL: <https://arxiv.org/abs/1901.04715>.
62. URL: <https://www.dwavesys.com/media/qvbjrzgg/guide-2.pdf>.
63. URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-020-77315-4>.
64. URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-020-77315-4>.
65. URL: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jctc.9b00402>.
66. URL: <https://qt.eu/about-quantum-flagship/projects/>.
67. URL: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2022/press-release/>.
68. URL: <https://www.nature.com/articles/37539>.
69. URL: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1212/1212.0533.pdf>.
70. URL: <https://qutech.nl/2022/05/25/teleport-quantum-information-across-network/>.
71. URL: <https://headtopics.com/us/quantum-physics-titans-win-breakthrough-prize-30104976>.
72. URL: https://www.nec.com/en/press/202202/global_20220216_01.html.
73. URL: <https://www.hpcwire.com/off-the-wire/ion-qs-aria-quantum-computer-achieves-20-algorithmic-qubits/>.
74. URL: <https://quantumai.google/quantum-virtual-machine>.
75. URL: <https://newsroom.ibm.com/2022-05-10-IBM-Unveils-New-Roadmap-to-Practical-Quantum-Computing-Era-Plans-to-Deliver-4,000-Qubit-System>.
76. URL: https://www.theregister.com/2022/08/25/china_baidu_quantum_computing/.
77. URL: <https://asia.nikkei.com/Business/Technology/Fujitsu-Riken-to-offer-first-Japan-made-quantum-computer>.
78. URL: <https://qt.eu/about-quantum-flagship/newsroom/a-boost-in-performances-in-fibre-integrated-quantum-memories/>.
79. URL: <https://physicsworld.com/a/polarization-switch-makes-ultrafast-photon-computer/>.
80. URL: <https://physicsworld.com/a/quantum-sensor-could-reduce-electric-vehicle-battery-weight-by-10/?notification=onesignal>.
81. URL: <https://arxiv.org/pdf/2106.02964.pdf>.
82. URL: <https://www.deepmind.com/blog/discovering-novel-algorithms-with-alphatensor>.

