

ВОЗМОЖНОСТИ КВАНТОВЫХ СИМУЛЯТОРОВ С КЛАССИЧЕСКОЙ АРХИТЕКТУРОЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Иванцова О.В., Рябов Н.В.

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980 г. Дубна, Московская область, Россия

Квантовые компьютеры обладают потенциалом решать проблемы, которые оказываются вычислительно сложными для некоторых классических алгоритмов. Однако создание физических квантовых устройств с большим количеством кубитов и высокой стабильностью остается на текущий момент времени сложной задачей.

Использование классических компьютеров для моделирования квантовых вычислений с помощью квантовых программных симуляторов позволяет осуществлять как проверку гипотез перед запуском на квантовых устройствах, так и решать реальные задачи.

Исследования и разработка квантовых алгоритмов для молекулярного моделирования, фундаментально связанного с пониманием квантовых свойств материи, являются одними из самых сложных и перспективных в квантовых вычислениях.

В ЛИТ ОИЯИ на суперкомпьютере (СК) «Говорун» проведена серия вычислительных экспериментов с использованием квантовых симуляторов QuEST, Qiskit, CuQuantum, библиотеки программного обеспечения для квантовых вычислений PennyLane, генератора квантовых схем Cirq, способных работать на различных вычислительных архитектурах.

Рассмотрены преимущества и ограничения симуляторов с классической архитектурой по сравнению с физическими квантовыми устройствами, различные инструменты для создания и отладки квантовых алгоритмов на классических компьютерах.

Показаны ключевые аспекты использования квантовых симуляторов для построения многочастичных волновых функций молекул и вычисления ожидаемых значений молекулярных гамильтонианов, особое внимание уделяется реализации алгоритма квантовой оценки фазы (QPEA) и вариационным квантовым методам, таким как вариационный квантовый собственный решатель (VQE).

В заключении обсуждаются текущие проблемы и перспективы дальнейшего развития классических симуляторов для более точного моделирования квантовых процессов, предоставляющих ценную предварительную информацию для следующего поколения квантовых компьютеров.