Tury

## Пичковский Иван Сергеевич

# Решение оптимизационных задач методом квантового отжига на системе спинов с S=1

1.3.12. Физика магнитных явлений

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном научном учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН) Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук — обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН).

Научный руководитель:

## Зобов Владимир Евгеньевич

д.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

## Фельдман Эдуард Беньяминович,

д.ф.-м.н., профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, заведующий лабораторией.

## Бетеров Илья Игорьевич,

к.ф.-м.н., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, старший научный сотрудник.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение "Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"

Защита состоится 20 декабря 2024 года в 14 часов 30 минут на заседании диссертационного совета 24.1.228.01 в ИФ СО РАН по адресу: г. Красноярск, ул. Академгородок, 50, стр. №38.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН и на сайте по адресу: <a href="http://kirensky.ru/zdoc/2024/pichkovsky.pdf">http://kirensky.ru/zdoc/2024/pichkovsky.pdf</a>

Автореферат разослан «\_\_\_\_» октября 2024 г.

Ученный секретарь диссертационного совета д.ф.-м.н., с.н.с.

Втюрин Александр Николаевич,

Актуальность темы. Ещё в прошлом веке Ричард Фейнман [1] и Юрий Манин [2] предсказали, что развитие вычислительной техники приведет к использованию квантовых систем для реализации вычислений. На современном этапе развития вычислительной техники [3], в результате миниатюризации, элементы электроники достигли атомарных размеров, и в описании их работы существенную роль стала играть квантовая механика. В связи, с чем объектами исследований стали квантовые компьютеры, квантовые вычисления, квантовые нейронные сети и квантовое машинное обучение [1,4,5]. Применительно к системам магнитных моментов (спинов) стала развиваться спинтроника [6] и магноника [7]. В свою очередь метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР) стал применяться к управлению квантовыми системами ядерных спинов [8] с целью изучения закономерностей обработки квантовой информации.

Одним из применений квантовых компьютеров, предложенным еще в 1982 г. Р. Фейнманом, является моделирование одних квантовых систем на других [9-10]. Тем самым получает развитие важное направление в физике магнитных явлений, в которой большую роль играют модели Изинга, Гейзенберга, Китаева и т.д. При построении модели задаются координаты моментов (спинов) взаимодействий И вид (Гамильтониан). Затем вычисляются аналитически или численно необходимые физические величины, основное состояние, фазовые диаграммы и т.п. Такие модели, с одной стороны, позволяют лучше понять результаты магнитных веществах. C экспериментов В разных другой стороны, прогнозировать новые магнитные свойства веществ и новые эксперименты. Поскольку приготовить вещество с заданными свойствами очень сложно, то предлагается [9-10] взять вещество с известным Гамильтонианом и затем получить из него новый эффективный (средний) гамильтониан с помощью электромагнитных полей (радиочастотных сверхвысокочастотных (СВЧ), лазерных). В общем случае [9-10] магнитные гамильтонианы могут быть получены на других квантовых системах: ионах в ловушке, холодных (ридберговских) атомах, сверхпроводниках. Для получения эффективых гамильтонианов используют теории Магнуса, Флоке или Троттер-Сузуки. Поскольку подразумевается моделирование свойств макроскопических систем, то предлагаются методы глобального управления, действующие на все спины системы одновременно. Тогда как для квантовых вычислений требуется индивидуальное управление спинами в квантовой системе [1].

Квантовые вычисления на квантовом компьютере можно осуществлять двумя способами: во-первых, с помощью сети из элементарных логических операторов (вентилей) [1,4,5], во-вторых, посредством медленного (адиабатического) изменения во времени эффективного гамильтониана от начального вида, основное состояние которого легко приготовить, до конечного вида, в основном состоянии которого закодировано решение задачи [11-17]. Согласно теории вычислений, оба способа одинаково эффективны при решении сложных задач, однако второй способ более устойчив к помехам. Этот способ получил название адиабатического квантового вычисления (АКВ) [11] или, если эффективный гамильтониан представлен гамильтонианом Изинга в

поперечном магнитном поле, квантового отжига (КО) [14-16], и уже хорошо себя зарекомендовали при решении комбинаторных оптимизационных задач [11-14,17,18], при поиске основного состояния спинового стекла [15,16].

масса исследований В этой области выполняется Основная двухуровневых квантовых базовых элементах – кубитах (quantum bits) [4-18], например представленных спинами S = 1/2. Однако в последнее время вырос интерес исследователей к квантовым вычислениям на квантовых элементах с большим числом уровней [19]: с тремя – кутриты или в общем случае dуровней – кудиты. Такие вычисления имеют ряд достоинств. Они обладают большей помехоустойчивостью. За счет использования дополнительных уровней можно более эффективно реализовать вентили и алгоритмы на кубитах. Наконец, при использовании п кудитов вместо кубитов произойдет рост гильбертова пространства (вычислительного базиса) в  $(d/2)^n$  раз. К сожалению, наличие большого числа уровней у кудитов усложняет селективное управление ими. Поэтому неким компромиссом является использование кутритов (d = 3), которые могут быть представлены спинами S = 1.

К настоящему времени выполнено несколько экспериментальных реализаций когерентного управления системами из кутритов: ионов в ловушке [20], холодных (ридберговских) атомов [21], квадрупольных ядер азота в кристалле [22], NV-центров в алмазе [23, 24], трансмонов в сверхпроводнике [25]. Все эти системы подчиняются близким по форме эффективным гамильтонианам, что позволяет надеяться, что методики управления системой спинов S = 1, которую мы выбрали базовой, будут полезными для управления другими вышеперечисленными системами. Для управления кутритами к системе прикладывают импульсы электромагнитного поля (РЧ, СВЧ или лазерные) резонансные к той или иной паре уровней кутрита, которые вызывают селективные преобразования этих состояний. Последовательности селективных операторов и способы построения эффективных гамильтонианов для решения некоторых задач на кудитах были рассмотрены в нескольких работах: устранение диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ) [22,26,27], АКВ факторизации на двух кудитах [28], моделирование распространения квантовой информации в системе из пяти трансмонов [25], ХУ-модель на трех спинах S=1 [29], топологическая фаза с сохранением симметрии на 14 спинах S=1[26]. Как хорошо известно, в эффективных Гамильтонианах для систем спинов S = 1 встречаются взаимодействия, которых нет у спинов S = 1/2, такие как квадрупольное взаимодействие с кристаллическим полем (или односпиновая анизотропия), квадруполь-квадрупольное взаимодействие (или биквадратичный обмен) [26, 30]. Поэтому магнитные свойства этих систем сильно различаются, а способы управления системой спинов S = 1/2 не могут быть непосредственно применены к системе спинов S = 1. При этом основную массу работ составляют работы по глобальному управлению системой в целом, которые нужны (и важны) для решения задач по изучению магнитных свойств веществ или получения веществ с новыми свойствами. Тогда как для решения задач наноэлектроники, квантовых вычислений (комбинаторных оптимизационных задач [18], например) требуется теория индивидуального управления спинами в квантовой системе. Поскольку такая теория управления спинами S=1 (кутритами) разработана недостаточно, заявленная тема исследования является актуальной.

**Целью диссертационной работы** является развитие теории управления системой спинов S=1 для решения оптимизационных задач методом квантового отжига. Взята система спинов в магнитном и кристаллическом полях с не эквидистантным энергетическим спектром, который позволяет индивидуально управлять состоянием спинов системы с помощью селективных по переходам импульсов высокочастотных электромагнитных полей. В соответствии с целью исследования были поставлены следующие задачи:

- 1. Для комбинаторных оптимизационных задач разного типа: факторизации (определение двух простых множителей, произведение которых образует известное число) [12,32] и машинного обучения, например, ассоциативной памяти (алгоритм или структура данных, которая позволяет хранить и извлекать информацию на основе ассоциаций между различными элементами) [13] и кластеризации (разделение множества данных в группы по близости свойств) [17] найти целевые гамильтонианы, в основных состояниях которых можно закодировать решения задач.
- 2. Разработать способы создания зависящих от времени эффективных гамильтонианов, управляющих эволюцией системы спинов при выполнении квантового отжига.
- 3. Рассчитать управляющие последовательности импульсов и интервалов свободной эволюции, необходимых для реализации вышеперечисленных целевых гамильтонианов.
- 4. Написать программы и провести численное моделирование на ЭВМ.
- 5. Исследовать зависимость точности решения от физических параметров и определить их значения, оптимальные для реализации.

<u>**Научная новизна**</u> работы заключается в выполнении адиабатических квантовых алгоритмов (АКА) методом КО не на системе спинов S = 1/2 (кубитах), а на системе спинов S = 1 (кутритах).

- 1. Впервые проведена адаптация для троичной симметричной системы счисления двух АКА факторизации, предложенных в работе [32]. На примере задачи факторизации числа 15 было показано создание эффективных взаимодействий посредством селективных операторов поворотов, продемонстрирован оригинальный способ создания трёхспинового взаимодействия для кутритов и выполнено моделирование решения задачи.
- 2. Впервые рассмотрено создание с применением проекционных операторов эффективных гамильтонианов для выполнения на кутритах, представленных спинами с S=1, AKA ассоциативной памяти и кластеризации. Проведено численное моделирование работы AKA ассоциативной памяти на двух и трех кутритах. Проведено численное моделирование работы AKA кластеризации на

кутритах посредством алгоритмов «one-hot encoding» и k-средних для разделения множества данных на два, три и четыре подмножества.

3. Впервые сделаны расчеты управляющих последовательностей операторов поворотов и радиочастотных (РЧ) импульсов, селективных по переходам между соседними уровнями, для реализации АКА кластеризации 6 точек на три группы на 5 спинах S=1. Проведено численное моделирование решения этой задачи на модельном квантовом процессоре из пяти квадрупольных ядер в магнитном и кристаллических полях. Получена зависимость ошибки от физических параметров.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в демонстрации возможности индивидуального управления спином (кутритом) в системе спинов с S = 1 и выполнения комбинаторных оптимизационных AKA Проработаны все теории управления: кутритах. этапы выведены эффективные гамильтонианы, найдены последовательности селективных операторов рассчитаны последовательности РЧ импульсов поворота, интервалов свободной эволюции, выполнено численное моделирование. управляющие последовательности, Полученные а также результаты решения, полученного зависимости точности при моделировании, физических параметров необходимы при переходе к экспериментальной реализации АКА на кутритах, представленных спинами с S = 1. Результаты работы могут быть полезными не только при индивидуальном управлении квадрупольными ядрами, но и другими многоуровневыми системами, в том числе при создании квантовых сопроцессоров и других устройств нано электроники.

#### Методы исследования

Работа была выполнена посредством численного моделирования в рамках теории Троттер-Сузуки. Эта теория позволяет разделить экспоненциальный  $\exp\left|x(\hat{A}+\hat{B})\right|$ на произведение двух некомутирующих вида  $\exp[x\hat{A}]$ операторов экспоненциальных позволяет рассматривать каждый из этих операторов по отдельности. Далее, следуя предшественников [28],получаем последовательность предложениям селективных операторов поворота. Затем каждому оператору поворота соответствие радиочастотный импульс. Затем исследуются ставиться в вероятности получения искомого состояния от физических зависимости параметров.

#### Основные положения, выносимые на защиту:

1. Предложенные эффективные Гамильтонианы позволяют решать методом квантового отжига на системе спинов S=1 разные оптимизационные задачи такие как: факторизация чисел, ассоциативная память и кластеризация данных.

- 2. Найденные последовательности селективных операторов поворотов, разделенных интервалами свободной эволюции, позволяют создать гамильтонианы, необходимые ДЛЯ квантового отжига эффективные содержащие односпиновые, двухспиновые и трехспиновые взаимодействия, как линейные, так и квадратичные по спиновым операторам.
- Система из спинов S=1в магнитных и кристаллических полях, управляемая селективными РЧ импульсами магнитного поля, резонансными к выбранным переходам между соседними энергетическими уровнями, предложена Найденная качестве модельного квантового процессора. последовательность РЧ импульсов, разделенных интервалами свободной позволяет смоделировать кластеризацию методом квантового отжига множества из шести точек на три группы и исследовать зависимость ошибки от физических параметров.

<u>Достоверность</u> полученных результатов подтверждается согласованностью результатов численного моделирования с аналитическими оценками. Применяемые для численного моделирования модели соответствуют природе исследуемых объектов.

Апробация работы. Основные результаты, представленные в диссертации, были доложены на конференции «Современные проблемы радиоэлектроники» (СФУ, Красноярск, 2018), конкурс-конференциях ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов (Красноярск, 2019, 2022, 2023), международных конференциях «МОDERN DEVELOPMENT OF MAGNETIC RESONANCE» (Казань, 2019, 2022), Всероссийском семинаре «Нейроинформатика, ее применение и анализ данных» (ИВМ ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск 2020), конференции «Quantum Informatics» (МГУ, Москва 2021), международных конференциях «Місго-and Nano-Electronics» (Москва — Звенигород 2018, 2021, 2023).

По теме диссертации опубликовано 16 работ: 6 статей в периодических изданиях в списке ВАК [A1-A6], 10 работ в сборниках материалов и тезисов научных конференций [A7-A16].

<u>Личный вклад автора.</u> Постановка задач и интерпретация полученных результатов выполнена совместно с научным руководителем д.ф-м.н. Зобовым В. Е. Все представленные в диссертации оригинальные результаты получены лично автором либо при его непосредственном участии. Создание и отладка компьютерных программ выполнено лично автором.

<u>Структура и объём диссертации.</u> Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и двух приложений, изложенных на 144 страницах, содержит 30 рисунков, 6 таблиц, 147 библиографических ссылок.

### Основное содержание работы

**Во введении** дана общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность, сформулированы основные цели исследования. Обозначена научная новизна и практическая ценность работы, приводятся положения и результаты, выносимые автором на защиту.

**Первая глава** работы имеет обзорный характер. В этой главе определяется понятия кутрита в вычислительном базисе собственных функций операторов проекций спинов  $S^z$  на ось  $Z:|1\rangle,|0\rangle$  и  $|-1\rangle$ . Так же в данной главе представлены АКВ и КО, заключающиеся в том, что система изначально инициируется в основном состоянии гамильтониана  $H_{initial}$ , которое легко приготовить. Затем в ходе адиабатической эволюции длительности T с гамильтонианом:

$$H(t) = \frac{t}{T} H_P + \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_{initial}, \tag{1}$$

или же с гамильтонианом

$$H(t) = H_P + s(t)H_{initial}$$
 (2)

система переходит в основное состояние целевого гамильтониана  $H_{\scriptscriptstyle P}$ , в котором закодировано решение задачи [11,15]. Два этих гамильтониана в теоретическом плане аналогичны друг другу, но гамильтониан (2) проще для

физической реализации КО [15]. В диссертации используем 
$$H_{initial} = -h \sum_{i=1}^{n} S_i^x$$
, а

непрерывную адиабатическую эволюцию разбиваем на короткие участки длительностью  $\Delta t$ , изменением гамильтониана (1) на каждом из которых можно пренебречь. Тогда полная длительность эволюции будет  $T=N\Delta t$ , а текущий момент времени эволюции  $t=l\Delta t$ . Следовательно, оператор эволюции примет вид:

$$U = \prod_{l=0}^{N} \exp\left[-i\Delta t H\left(l\Delta t\right)\right]. \tag{3}$$

Для расчётов управляющих операторов воспользуемся приближением Троттер -Сузуки второго порядка [31]. Кроме того, в данной главе, представлены задачи: факторизации и машинного обучения: ассоциативная память и кластеризация на примере решения которых посредством КО в диссертации будет спиновой системой. Также рассмотрено управление представлены возможные варианты реализации кутритов и их управления: квадрупольные ядра со спином S=1, трансмоны, состоящие из двух сверхпроводящих островков с Джозефсоновским контактом и помещенные в резонатор, NV-центры в алмазе, являющиеся точечными парамагнитными дефектами, ионы в электромагнитной ловушке и ридберговские атомы в условиях лазерного охлаждения.

**Вторая глава** посвящена выводу эффективных гамильтонианов на спинах S=1 (кутритах) для решения задач факторизации, ассоциативной памяти и кластеризации.

Первая рассмотренная задача — факторизация, которая заключается в поиске множителей a и b, образующих число V = ab. В нашей работе в связи с использования кутритов применена троичная симметричная система счисления,

в которой число V имеет длину n, один из сомножителей  $a = \sum_{j=1}^p a_j 3^{p-j}$  имеет

длину p , а другой  $b = \sum_{j=1}^{n-p} b_j 3^{n-p-j}$  - длину n-p , где  $a_j, b_j \in \{-1,0,1\}$  . В этой главе

рассмотрена факторизация числа V = 21. Для решения этой задачи целевой гамильтониан возьмём в простом виде (следуя [12,32]):

$$H_{p} = (V - (2a+1)(2b+1))^{2} = \left[21 - (6S_{1}^{z} + 2S_{2}^{z} + 1)(2S_{3}^{z} + 1)\right]^{2},\tag{4}$$

где  $a_1 \! = \! S_1^z$ ,  $a_2 \! = \! S_2^z$  и  $b_0 \! = \! S_3^z$  являются операторами.

Для данной задачи была исследована динамика энергии основного состояния гамильтониана (1). Основное состояние гамильтониана (4) имеет энергию 0. Расчёт продемонстрировал стремление энергии к 0 при  $t \to T$ . Следовательно, алгоритм справился с решением задачи факторизации.

Таблица 1. Схема алгоритма для поразрядной факторизации числа  $551 = 1\ \overline{1}1\ \overline{1}11\ \overline{1}_3$ , где  $\overline{1} = -1$ .  $z_{ij}$  - вспомогательные переменные, отвечающие за перенос между разрядами.

				1	$a_{\scriptscriptstyle 1}$	$a_2$	-1
				1	$b_1$	$b_2$	1
				1	$a_1$	$a_2$	-1
			$b_2$	$a_1b_2$	$a_2b_2$	$-b_2$	
		$b_{_1}$	$a_1b_1$	$a_2b_1$	$-b_1$		
	1	$a_{_{1}}$	$a_2$	-1			
<i>z</i> <sub>12</sub>	$Z_{23}$	Z <sub>34</sub>	Z <sub>45</sub>	z <sub>56</sub>	Z <sub>67</sub>		
0	1	-1	1	-1	1	1	-1

Главный недостаток гамильтониана (4) — это большое изменение энергии при перевороте отдельных спинов, что не даёт использовать его для факторизации больших чисел, таких как V = 551. Для факторизации данного числа воспользуемся поразрядной схемой [32], переписанной для кутритов и представленной в таблице 1. По примеру кубитов [33], можно сократить число кутритов от 12 до 4, взяв гамильтониан в следующем виде [A7]:

$$H_{P} = (b_{1} + a_{1} + 1)^{2} + (b_{2} + a_{2} - 1)^{2} + (a_{1} - b_{1} - 1)^{2} + (a_{2} - b_{2} - 1)^{2} =$$

$$= 2a_{1}^{2} + 2a_{2}^{2} + 2b_{1}^{2} + 2b_{2}^{2} - 4a_{2} + 4b_{1} + 4,$$
(5)

где  $a_1 = S_1^z$ ,  $a_2 = S_2^z$ ,  $b_1 = S_3^z$  и  $b_2 = S_4^z$  являются операторами. Для данного целевого гамильтониана (5) также произвели исследование эволюции энергии основного состояния к нулевому значению при  $t \to T$ . Следовательно, алгоритм справился с решением задачи факторизации.

Перейдём к рассмотрению задач ассоциативной памяти и кластеризации. Целевые гамильтонианы будем записывать на языке проекционных операторов на собственные состояния спиновых проекций  $S^z$  на ось Z:

$$|m_1, m_2, \dots, m_n\rangle\langle m_1, m_2, \dots, m_n| = |m_1\rangle\langle m_1|_1 |m_2\rangle\langle m_2|_2 \dots |m_n\rangle\langle m_n|_n.$$
 (6)

Начнём с ассоциативной памяти. При ее рассмотрении будем следовать работе [13], но вместо двух кубитов сначала рассмотрим два кутрита. Для этого в память поместим три состояния:  $|\psi_1\rangle=|0,1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle=|1,0\rangle$  и  $|\psi_3\rangle=|-1,-1\rangle$ . Гамильтониан для запоминания в таком случае запишем в виде [A1, A8, A9]:

$$H_{mem} = -|0,1\rangle\langle 0,1| - |1,0\rangle\langle 1,0| - |-1,-1\rangle\langle -1,-1|. \tag{7}$$

Основным состоянием данного гамильтониана является суперпозиционное состояние:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mu=1}^{3} a_{\mu} |\psi_{\mu}\rangle, \tag{8}$$

где  $a_{\mu} = 1/\sqrt{3}$ . Для вызова состояний используется гамильтониан «подсказки»  $H_{prob} = -\left|\psi_{prob}\right>\left<\psi_{prob}\right|$ , который понижает энергию одного состояния  $\left|\psi_{\mu}\right>$ . В таком случае целевой гамильтониан примет вид:

$$H_P = H_{mem} + \Gamma H_{prob}, \tag{9}$$

где  $\Gamma$  - малое число. Результат вычисления эволюции за время T с (3) продемонстрирован на рисунке 1, на котором изображены зависимости вероятностей нахождения системы в запомненных состояниях  $\left|a(m_1,m_2)\right|^2$  от числа  $\Gamma$ . При включении в (9) пробного гамильтониана с ростом  $\Gamma$  вероятность вызываемого состояния быстро растёт, а двух других падает. Кроме того, из рисунка 1 видно, что при  $\Gamma$ =0 получилась суперпозиция (8) с разными  $a_\mu$ . Поэтому было произведено исследование распознания посредством теории возмущения [A1], в результате которого выяснилось, что недиагональных элементов гамильтониана  $H_{initial}$  недостаточно для переброски населённости. Для исправления мы ввели недиагональный вспомогательный гамильтониан:

$$H_{help} = -\begin{cases} |0,1\rangle\langle 1,0| + |1,0\rangle\langle 0,1| + |-1,-1\rangle\langle 1,0| + |-1,-1\rangle\langle 0,1| + \\ +|0,1\rangle\langle -1,-1| + |1,0\rangle\langle -1,-1| \end{cases}, \tag{10}$$

а общий гамильтониан (1) записали в виде

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_{initial} + \frac{t}{T} \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_{help} + \frac{t}{T} H_{P}. \tag{11}$$

Выполненные расчеты [A1] подтвердили, что действительно произошло выравнивание амплитуд трех состояний в суперпозиции и вида их зависимостей от величины Г. При этом сохранилась хорошая чувствительность к подсказке (в отличии от расчета с не выключенным в конце эволюции вспомогательным гамильтонианом).

Затем на двух кутритах были выполнены расчеты с четырьмя и с пятью запомненными состояниями. Ассоциативная память с четырьмя состояниями

работает успешно, а с пятью нет. Это показывает, что емкость памяти на двух кутритах выше, чем на двух кубитах, поскольку на двух кубитах можно запомнить не больше двух состояний [13]. Наконец, нами было выполнено моделирование успешной реализации запоминания пяти состояний на трех кутритах. На этом основании можно делать вывод о ёмкости памяти:  $2^n / 2$  для кубитов и  $3^n / 2$  для кутритов [A1].

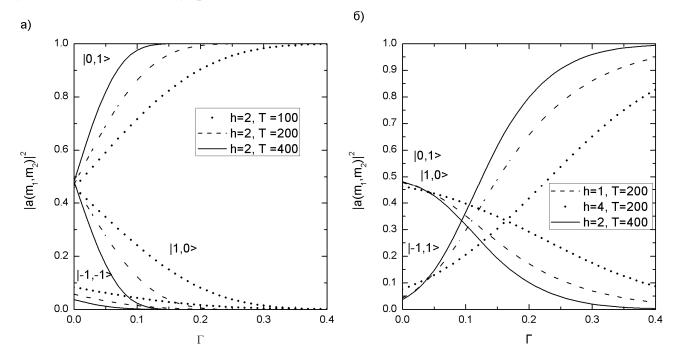


Рисунок 1 - Ассоциативная память на двух спинах S=1 с тремя сохраняемыми состояниями:  $|\psi_1\rangle=|0,1\rangle,\ |\psi_2\rangle=|1,0\rangle$  и  $|\psi_3\rangle=|-1,-1\rangle$ . Зависимости от  $\Gamma$  вероятностей нахождения системы в состояниях, указанных на рисунках с  $\Gamma H_{prob}=-\Gamma \left|0,1\right>\left<0,1\right|$  (а) и с  $\Gamma H_{prob}=-\Gamma \left|-1,-1\right>\left<-1,-1\right|$  (б) при различных значениях поля h и времени  $T=\Delta tN$  ( $\Delta t=0.1$ ,  $N=T/\Delta t$ ).

Следующая рассмотренная задача - задача кластеризации. В качестве множества данных примем точки на эвклидовой плоскости с декартовыми координатами  $(x_i, y_i)$ , полученными посредством генератора случайных чисел. Самый простой способ оценить близость точек - сравнить расстояние между ними  $R_{ij}$ , а решение самой задачи свести к поиску минимума

характеристической функции  $W = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^K \sum_{i,j \in C_\alpha} R_{ij}$  [17], где K - заранее известное

число групп,  $C_{\alpha}$  - обозначение групп. Два рассмотренных в этой работе алгоритма ищут минимум данной функции: «one-hot encoding» ищет глобальный минимум, k-средних - локальный минимум.

В алгоритме «one-hot encoding» одна точка данных присваивается одной из групп, а остальные точки распределяются относительно неё и в оставшиеся K-1 групп. В диссертации был рассмотрен случай разделения на три группы множества из шести точек на плоскости, полученных посредством генератора случайных чисел: (4, -2), (-7, 7), (6, -9), (-6, 8), (-2, -6), (-9, 5). Каждой точке

данных i ставим в соответствие кутрит, представленный спиновым оператором  $S_i^z$ . Спиновой проекцией  $m_i$ , принимающей одно из трех значений: 1, 0, -1, обозначим принадлежность точки i к одному из трех кластеров. Точки с одинаковыми проекциями спинов относятся к одному кластеру. Точке (4, -2) присвоено состояние  $|1\rangle$ . Гамильтониан предлагаем в следующем виде [A2, A10, A11]:

$$H_{P} = \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq 1}^{5} H_{fij} + \sum_{j}^{5} R_{ij} \left( 2 |1\rangle \langle 1|_{j} - 1 \right), \tag{12}$$

$$H_{fij} = R_{ij} \left( 2 \left[ |1,1\rangle\langle 1,1|_{ij} + |0,0\rangle\langle 0,0|_{ij} + |-1,-1\rangle\langle -1,-1|_{ij} \right] - 1 \right). \tag{13}$$

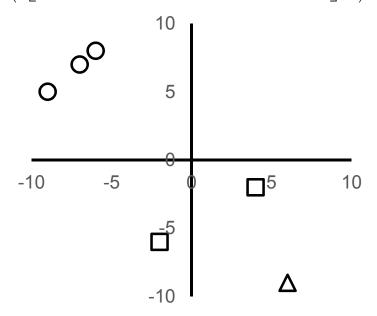


Рисунок 2 - Результат разделения множества из шести точек данных на три кластера с использованием метода «one-hot encoding». Моделирование выполнялось при N = 2000,  $\Delta t = 0.1$  и h = 2. Первый кластер: (-9, 5), (-7, 7) и (-6, 8) показан кружками; второй кластер: (-2, -6) и (4, -2) квадратами; а третий кластер (6, -9) треугольником.

Поясним выбор вида гамильтониана (13). Если спины i и j относятся к одному кластеру и имеют одинаковые значения проекций, то выражение в квадратных скобках в (13) равно 1, а вклад в энергию принимает значение  $R_{ij}$ . Если же спины i и j относятся к разным кластерам и имеют разные значения проекций, то выражение в квадратных скобках в (13) равно 0, а вклад в энергию принимает значение  $-R_{ij}$ . Для получения минимального значения суммарной энергии (12) сумма положительных вкладов должна быть минимальна (близкие спины), а сумма отрицательных вкладов должна быть максимальна (далекие спины).

В ходе адиабатической эволюции (3) с гамильтонианом (12) получено состояние  $|1,-1,0,-1,1,-1\rangle$  с точностью 0,9934, исходя из которого получено распределения точек на группы, представленное на рисунке 2. Видно, что предложенный нами гамильтониан справился с решением данной задачи. Для полноты картины было рассмотрено [A2] разделение этих же точек на две

группы, принадлежность к которым обозначим состояниями  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ . В этом случае гамильтониан (13) запишем в виде:

$$H_{fij} = R_{ij} \left( 2 \left[ |1,1\rangle \langle 1,1|_{ij} + |0,0\rangle \langle 0,0|_{ij} \right] - 1 \right). \tag{14}$$

а для исключения состояния  $|-1\rangle$  добавим в (12) штрафной гамильтониан:  $H_{\mathit{Fij}} = 2R_{\mathit{ij}} \left( \left| -1 \right\rangle \left\langle -1 \right|_{\mathit{i}} + \left| -1 \right\rangle \left\langle -1 \right|_{\mathit{i}} \right).$ 

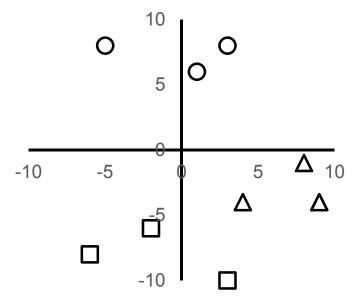


Рисунок 3 - Результат кластеризации набора из девяти точек данных в три кластера с использованием k-средних метода при N = 2000,  $\Delta t = 0.1$  и h = 8. Первый кластер: (-5, 8), (1, 6) и (3, 8) показан кружками; второй кластер: (-6, -8), (-2, -6), (3, -10) – квадратами; и третий кластер: (4, -4), (8, -1) и (9, -4) - треугольниками.

Второй алгоритм кластеризации - алгоритм k-средних. В данном алгоритме из всего набора выбираются K точек - центроидов, где K — число групп. Затем эти точки присваиваются по одной в группы. После чего остальные точки распределяются относительно их в группы [34]. На следующем шаге в этих группах выбираются другие центроиды, и остальные точки распределяются в новые группы относительно новых центроидов. И так до тех пор, пока результат не сойдётся к определенному распределению. Нами был рассмотрен случай разделения множества из 9 точек: (8, -1), (-2, -6), (1, 6), (4, -4), (3, 8), (9, -4), (-5, 8), (-6, -8), (3, -10) на три группы. Для кодировки будем использовать кодировку аналогичную для разделения на три группы методом «one-hot encoding». Для данной задачи целевой гамильтониан возьмём в следующем виде [A2]:

$$H_{P} = \sum_{j=1}^{6} R_{1j} \left( 2 |1\rangle \langle 1|_{j} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{6} R_{2j} \left( 2 |0\rangle \langle 0|_{j} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{6} R_{3j} \left( 2 |-1\rangle \langle -1|_{j} - 1 \right), \tag{15}$$

где  $R_{1j}$ ,  $R_{2j}$  и  $R_{3j}$  - расстояние между точкой j и соответствующим центроидом. Результат данного вычисления представлен на рисунке 3, из которого видно, что алгоритм справился с решением задачи.

Если число групп больше числа состояний одного спина: K>3, то в этом случае каждой точке данных необходимо ставить в соответствие n спинов, из условия  $3^{n-1} < K < 3^n$ . Например, для разделения на четыре группы множества из 7 точек:  $(-9,\ 10),\ (1,\ 9),\ (-8,\ -3),\ (-2,\ -9),\ (4,\ -2),\ (8,\ -8),\ (10,\ -5)$  — будем использовать двухкутритные состояния:  $|\psi_1\rangle=|1,1\rangle,\ |\psi_2\rangle=|1,0\rangle,\ |\psi_3\rangle=|1,-1\rangle$  и  $|\psi_4\rangle=|0,1\rangle$ . Следовательно, целевой гамильтониан примет вид:

$$H_{P} = \sum_{j=1}^{3} R_{1j} \left( 2 |1,1\rangle \langle 1,1|_{j} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{3} R_{2j} \left( 2 |1,0\rangle \langle 1,-1|_{j} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{3} R_{3j} \left( 2 |1,-1\rangle \langle 1,-1|_{j} - 1 \right) + \sum_{j=1}^{3} R_{4j} \left( 2 |0,1\rangle \langle 0,1|_{j} - 1 \right),$$

$$(16)$$

а остальные двухкутритные состояния:  $|\psi_5\rangle = |0,0\rangle$ ,  $|\psi_6\rangle = |0,-1\rangle$ ,  $|\psi_7\rangle = |-1,1\rangle$ ,  $|\psi_8\rangle = |-1,0\rangle$  и  $|\psi_9\rangle = |-1,-1\rangle$  штрафуются следующим гамильтонианом:

$$H_{fine} = \sum_{i}^{6} a_{i} \sum_{q=5}^{9} \left| \psi_{q} \right\rangle \left\langle \psi_{q} \right|_{i}, \tag{17}$$

где  $a_i$  - существенно большая константа. Выполненные расчёты [A2] подтвердили верность решения.

**Третья глава** содержит развитие теории управления посредством селективных операторов поворотов, предложенной в работе [28], на примере получения эффективных гамильтонианов для задачи факторизации числа V=15 с помощью гамильтониана (4) на трёх спинах и задачи кластеризации с помощью гамильтониана (12) и (13) на 5 спинах из гамильтониана дипольдипольного взаимодействия (ДДВ)  $H_d$ :

$$H_d = \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^z S_j^z . \tag{18}$$

Начнём с задачи факторизации, для которой целевой гамильтониан (4) для V=15 после раскрытия скобок примет вид [A3, A4, A12]:

$$H_{p} = 196 + 96S_{1}^{z}S_{2}^{z}\left(S_{3}^{z}\right)^{2} + 96S_{1}^{z}S_{2}^{z}S_{3}^{z} - 56S_{2}^{z} - 56S_{3}^{z} - 312S_{3}^{z}S_{1}^{z} - 104S_{3}^{z}S_{2}^{z} - 104S_{3}^{z}S_{2}^{z} - 104S_{3}^{z}S_{2}^{z} - 104S_{3}^{z}S_{2}^{z} + 144\left(S_{3}^{z}\right)^{2}\left(S_{1}^{z}\right)^{2} + 144\left(S_{1}^{z}\right)^{2}S_{3}^{z} + 48S_{1}^{z}\left(S_{3}^{z}\right)^{2} + 16\left(S_{2}^{z}\right)^{2}\left(S_{3}^{z}\right)^{2} + 16\left(S_{2}^{z}\right)^{2}S_{3}^{z} + 16S_{2}^{z}\left(S_{3}^{z}\right)^{2} + 36\left(S_{1}^{z}\right)^{2} + 24S_{1}^{z}S_{2}^{z} + 4\left(S_{2}^{z}\right)^{2}.$$

$$(19)$$

Подставим гамильтониан (19) в (1), а затем в (3) и разложим его на отдельные множители, которые рассмотрим по очереди. Начнем с того, что в операторе эволюции из трех пар взаимодействий в  $H_d$  (18) оставим одно нужное и уничтожим два ненужных. Это достигается с помощью оператора инверсии  $P_k$  спина k, который может быть реализован с помощью трех селективных поворотов уровней  $1 \leftrightarrow 2$  или  $2 \leftrightarrow 3$  вокруг оси y на угол  $\pm \pi$  [28]:

$$P_{k}^{-1}S_{k}^{z}P_{k} = \left\{-\pi\right\}_{v,k}^{1\leftrightarrow 2} \left\{-\pi\right\}_{v,k}^{2\leftrightarrow 3} \left\{-\pi\right\}_{v,k}^{1\leftrightarrow 2}S_{k}^{z} \left\{\pi\right\}_{v,k}^{1\leftrightarrow 2} \left\{\pi\right\}_{v,k}^{2\leftrightarrow 3} \left\{\pi\right\}_{v,k}^{1\leftrightarrow 2} = -S_{k}^{z}$$
 (20)

Временной интервал в операторе эволюции с  $H_d$  делим пополам и на одной из половинок инвертируем спин, взаимодействие с которым надо исключить. Затем, применив формулы из [28], получим необходимые двухспиновые и односпиновые операторы, приведенные в [А3, А4, А12]. Наконец, для создания трёхспиновых операторов  $\exp\left[-i\Delta t \left(l/N\right) 96S_1^z S_2^z \left(S_3^z\right)^2\right]$  и

 $\exp\left[-i\Delta t \left(l/N\right) 96 S_1^z S_2^z S_3^z\right]$  из ДДВ (18) применим теорию когерентного усреднения [35] и формулу Троттер-Сузуки [31]:

$$\exp\left[ib_{12}b_{13}S_1^yS_2^zS_3^z\right] \approx \exp\left[ib_{12}S_1^xS_2^z\right] \exp\left[ib_{13}S_1^zS_3^z\right] \exp\left[-ib_{12}S_1^xS_2^z\right] \times \exp\left[-ib_{13}S_1^zS_3^z\right]. \tag{21}$$

В формуле (21) сохранены члены второго порядка малости и отброшены члены третьего порядка малости ( $b_{ij} = \Delta t J_{ij} <<1$ ).

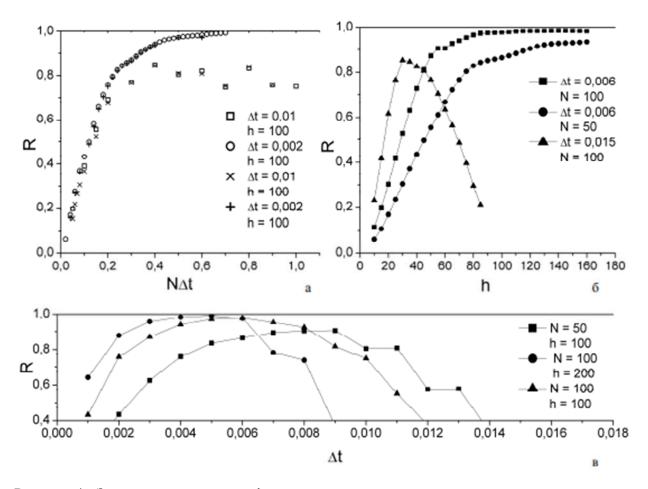


Рисунок 4 - Зависимость точности факторизации от времени выполнения алгоритма  $T = N\Delta t$  (a), от величины магнитного поля (б) и от длительности шага дискретного времени (в) при разных значениях других параметров.

По описанным выше правилам была найдена полная последовательность селективных операторов поворотов и интервалов эволюции с гамильтонианом ДДВ, необходимая для моделирования факторизации числа 15 посредством квантового отжига и провели исследование точности решения. Результат

получается в виде суперпозиции 27 состояний вычислительного базиса. Точным решением нашей задачи является состояние (1,-1,1). Поэтому достигнутую точность нашего вычисления будем характеризовать величиной:  $R = \left| \left\langle \Psi \right| 1, -1, 1 \right\rangle \right|^2$ равной вероятности нахождения точного суперпозиционном. Результаты, полученные при разных значениях параметров, приведены на рисунке 4. На рисунке 4a показана зависимость от  $T = N\Delta t$ . Крестами показаны результаты при замене симметричного представления Троттер – Сузуки [31] на несимметричное [А3–А4]. Изменения верности решения при таком переходе небольшие, поскольку основной вклад в ошибку образуется при получении трёхспинового взаимодействия. На рисунке 46 показана зависимость точности от величины поперечного магнитного поля h, действия которого сводится к повороту спина на угол  $\Delta th$ . Если данный угол возрастает до  $\pi/2$ , то точность падает. На рисунке 4в. показана зависимость точности от длительности дескретного шага  $\Delta t$ . При малых значениях она растёт, что связано с выполнением условия адиабатичности, а при больших падает, поскольку уже нельзя пренебрегать изменением гамильтониана на интервале  $\Delta t$ .

Теперь займемся кластеризацией. Гамильтонианы (12) и (13) после подстановки проекторов через спиновые переменные переписываются следующим образом:

$$H_{fij} = R_{ij} \left( S_i^z S_j^z + 3 \left( S_i^z \right)^2 \left( S_j^z \right)^2 - 2 \left( S_i^z \right)^2 - 2 \left( S_j^z \right)^2 + 1 \right), \tag{22}$$

$$\sum_{j \neq 1} R_{1j} \left( 2 |1\rangle \langle 1|_{j} - 1 \right) = \sum_{j \neq 1} R_{1j} \left( S_{j}^{z} + \left( S_{j}^{z} \right)^{2} - 1 \right). \tag{23}$$

Эти гамильтонианы необходимо получить из гамильтониана ДДВ:

$$H_{dd} = -\frac{\sqrt{425}}{24} \varepsilon S_{1}^{z} S_{2}^{z} - \frac{\sqrt{2}}{24} \varepsilon S_{1}^{z} S_{2}^{z} - \frac{\sqrt{194}}{24} \varepsilon S_{1}^{z} S_{1}^{z} - \frac{\sqrt{8}}{24} \varepsilon S_{1}^{z} S_{5}^{z} - \frac{\sqrt{433}}{24} \varepsilon S_{2}^{z} S_{3}^{z} - \frac{\sqrt{73}}{24} \varepsilon S_{2}^{z} S_{4}^{z} - \frac{\sqrt{421}}{24} \varepsilon S_{2}^{z} S_{5}^{z} - \frac{\sqrt{212}}{24} \varepsilon S_{3}^{z} S_{4}^{z} - \frac{\sqrt{18}}{24} \varepsilon S_{3}^{z} S_{5}^{z} - \frac{\sqrt{170}}{24} \varepsilon S_{4}^{z} S_{5}^{z},$$

$$(24)$$

в котором мы взяли  $J_{ij} = R_{ij} \varepsilon / 24$ . Здесь  $\varepsilon$  - масштабный множитель, который будет варьироваться для изучения управления. По описанным выше правилам мы нашли [A5, A13] последовательности селективных операторов поворотов и интервалов свободной эволюции, необходимые для создания эффективного гамильтониана кластеризации 6 точек на 3 группы. Полученные результаты применены в четвертой главе.

В <u>четвертой главе</u> рассмотрено управление модельным квантовым процессором на пяти кутритах, представленных спинами S=1 в магнитном и кристаллическом полях, который подчиняется следующему гамильтониану [A6,A14—A16]:

$$H_{5} = -\sum_{j=1}^{5} \omega_{j} S_{j}^{z} + \sum_{j=1}^{5} Q_{j} \left[ 3 \left( S_{j}^{z} \right)^{2} - 2 \right] + H_{dd},$$
 (25)

где  $\omega_1$  = 3000 ,  $\omega_2$  = 2500 ,  $\omega_3$  = 2800 ,  $\omega_4$  = 3200 ,  $\omega_5$  = 3800 - ларморовские частоты,  $Q_1$  = 15000 ,  $Q_2$  = 10000 ,  $Q_3$  = 12000 ,  $Q_4$  = 18000 ,  $Q_5$  = 30000 - квадрупольные константы. На данном модельном процессоре было смоделировано решение методом КО задачи кластеризации шести точек на три группы, показанной на рисунке 2. Для этого в полученной в третьей главе последовательности селективных операторов поворотов каждому повороту ставится в соответствие селективный импульс радиочастотного магнитного (РЧ) поля с частотой  $\omega_j^{1\leftrightarrow 2} = E_j^1 - E_j^2 = -3Q_j + \omega_j$  или  $\omega_j^{2\leftrightarrow 3} = E_j^2 - E_j^3 = 3Q_j + \omega_j$ , который изменяет населенности уровней кутрита  $1\leftrightarrow 2$  или  $2\leftrightarrow 3$  соответственно. Данные импульсы подчиняются следующему гамильтониану во вращающейся с частотой  $\omega_{rf}$  системе координат:

$$H_{pulse} = -\sum_{j=1}^{5} (\omega_j - \omega_{rf}) S_j^z + \sum_{j=1}^{5} Q_j \left[ 3(S_j^z)^2 - 2 \right] + H_{dd} + H_{field},$$
 (26)

где  $H_{\it field} = h_{\it pulse} \sum_{j=1}^5 \left( S_j^x \cos \varphi - S_j^y \sin \varphi \right)$  - гамильтониан взаимодействия с РЧ полем,  $\varphi$  - фаза приложенного импульса,  $h_{\it pulse}$  - амплитуда импульса. Угол селективного поворота определяется соотношением  $\theta = \sqrt{2} t_{\it pulse} h_{\it pulse}$ . Для уменьшения ошибки на амплитуду импульса наложим условие  $\left| J_{\it ij} \right| \ll h_{\it puls} \ll \left| \omega_i^{k\leftrightarrow n} - \omega_j^{p\leftrightarrow q} \right|$ , а на длительность импульса и длительность свободной эволюции наложим условия кратности периодам  $2\pi / \omega_j$  и  $2\pi / Q_j$ .

Для реализации гамильтониана  $H_{initial}$  используются неселективные импульсы, действующие одновременно на два перехода кутрита [26]. Для этого к системе одновременно прикладываются два РЧ импульса с одинаковой длительностью и амплитудой с частотами  $\omega_j^{1\leftrightarrow 2} = \omega_{lrf}$  и  $\omega_j^{2\leftrightarrow 3} = \omega_{2rf}$ , подчиняющиеся следующему гамильтониану в обобщенной вращающейся системе координат [A6,36]:

$$H_{pulse} = -\sum_{j=1}^{5} \begin{pmatrix} \omega_{j} - \omega_{1rf} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\omega_{j} + \omega_{2rf} \end{pmatrix}_{j} + \sum_{j=1}^{5} Q_{j} \left[ 3 \left( S_{j}^{z} \right)^{2} - 2 \right] + h_{pulse} \sum_{j=1}^{5} S_{j}^{x} + H_{dd} . \tag{27}$$

По выведенным выше правилам была найдена последовательность РЧ импульсов и интервалов свободной эволюции для реализации методом КО алгоритма кластеризации (22) и (23). Последовательность содержит 2369N импульсов и 320N операторов свободной эволюции. Была написана программа для численного моделирования решения задачи и выполнены расчеты при разных значениях параметров N, h, и  $\Delta t$ .

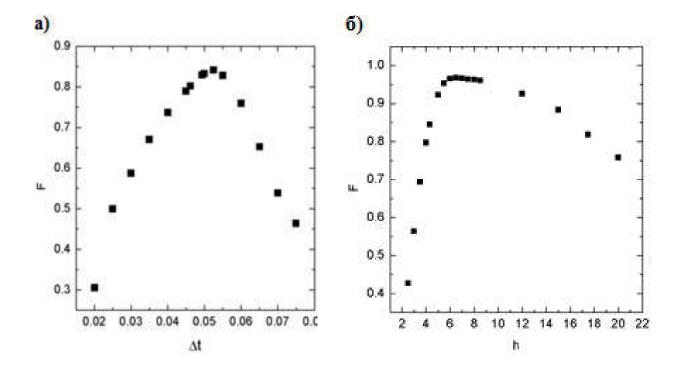


Рисунок 5 - Зависимости верности решения задачи кластеризации от длительности шага дискретного времени  $\Delta t$  (при h=4,3, N=200,  $\varepsilon$ =10<sup>-6</sup>) (а) и от величины поля отжига h (при N=200,  $\Delta t$ =0,05252,  $\varepsilon$ =10<sup>-6</sup>) (б).

Рассчитанный результат эволюции состояния системы 5 спинов  $\Psi(T)$  получен в виде суперпозиции  $3^5=243$  состояний вычислительного базиса. В качестве верности (точности) решения возьмём вероятность нахождения системы в состоянии  $|1,-1,0,-1,1,-1\rangle$ , показанном на рисунке 2, [A6]:  $F=\left|\left\langle \Psi(T)\middle|1,-1,0,-1,1,-1\right\rangle\right|^2$ . Было проведено исследование зависимости точности решения от физических параметров. Первый из них - время дискретизации  $\Delta t$ . Зависимость представлена на рисунке 5а. Как и на рисунке 4а маленькая точность при малых  $\Delta t$  вызвана нарушением условия адиабатичности, а при больших  $\Delta t$  - уже вызвана ошибкой дискретизации.

Второй параметр — это величина поперечного поля h, зависимость верности решения от которого представлена на рисунке 5б. Здесь опять повторяется та же ситуация, что и на рисунке 4б. Малая точность при малых h связана с недостаточностью угла поворота  $t_{pulse}h_{pulse}=\left(1-\left(l/N\right)\right)\Delta th$  (где  $t_{pulse}$  - длительность импульса), а при больших значениях h - с избыточностью этого угла.

Следующий параметр управления системой - длительность эволюции  $T = N\Delta t$ . Так как у нас используется дискретное время, то будем задавать длительность числом N интервалов  $\Delta t$ , как представлено на рисунке 6. На нём представлены результаты при значениях  $\varepsilon = 10^{-6}$  и  $\varepsilon = 10^{-5}$ . Незначительное изменение верности при десятикратном увеличении ДДВ говорит о том, что малость ДДВ, заданная в (24) масштабным множителем  $\varepsilon = 10^{-6}$ , взята с

большим запасом и что ДДВ такой величины дает незначительный вклад в ошибку. Из рисунка 6 видно, что с ростом N точность монотонно возрастает, что говорит о выполнении условия адиабатичности. Затем рост точности останавливается, что связано с другими вкладами в ошибку.

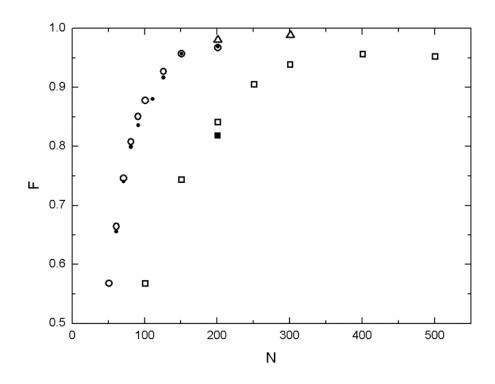


Рисунок 6 - Верность кластеризации в зависимости от количества шагов N отжига для  $\Delta t=0.05252$  и с параметрами селективных РЧ-импульсов, определенными по изложенным в тексте правилам. Результаты, полученные для поля отжига h=4.3, показаны квадратами, а для поля h=6.5 – кружками (треугольники при  $\Delta t=0.0442$ ). Пустые фигуры показывают результаты расчета, выполненного при  $\varepsilon=10^{-6}$ . Закрашенные фигуры показывают значения точности, полученные с теми же параметрами, но с  $\varepsilon=10^{-5}$ .

В заключении сформулированы основные результаты исследования и выводы.

Развита теория управления системой спинов с S=1, необходимая для реализации АКА на кутритах методом КО. Для управления используются селективные импульсы электромагнитных полей, резонансные к выбранным переходам между энергетическими уровнями. Теория применена к решению оптимизационных задач трех разных типов: факторизации чисел, ассоциативной памяти и кластеризации данных по близости свойств. Получены следующие результаты:

1. При построении эффективных гамильтонианов для задач ассоциативной памяти и кластеризации данных предложено использовать проекторы на спиновые состояния, а не операторы спиновых проекций. При построении эффективных гамильтонианов для задачи факторизации в представлении искомых чисел через спиновые проекции двоичная система счисления, используемая для кубитов, в случае кутритов заменена на симметричную троичную систему счисления.

- 2. Написаны программы и выполнено численное моделирование в приближении дискретного времени ассоциативной памяти на двух и трех кутритах. Предложен способ выравнивания амплитуд запомненных состояний с помощью вспомогательного гамильтониана без привлечения дополнительных кутритов. Продемонстрирована успешная работа АКВ на кутритах и существенное увеличение емкости памяти нейронной сети Хопфилда при переходе от кубитов к кутритам.
- Рассмотрена кластеризация точек на плоскости. Построены эффективные гамильтонианы для двух известных методов кластеризации: one-hot encoding и k-средних. Первым методом выполнено разбиение множества из 6 точек на 3 или 2 группы. Вторым – 9 точек на 3 группы и 7 на 4. Выполненное моделирование показало, что задача кластеризации может эффективно решаться на кутритах, представленных спинами S=1. Выявлены преимущества кластеризации на кутритах по сравнению с кубитами. Так для представления Nточек данных потребуется в  $\log_2 N / \log_3 N$  раз меньше кутритов, чем кубитов. При разделении данных на большее чем 3 число групп (K) нами предложено кластеры состояний, соответствующих В номерах многоспиновых подсистем, вместо использования номеров отдельных спинов. Тем самым дополнительно уменьшается число кутритов ( $N\log_3 K$  вместо NK), необходимых для реализации алгоритма.
- 4. Рассчитаны последовательности селективных операторов поворотов для создания из исходного гамильтониана зависящих от времени эффективных гамильтонианов, необходимых для решения посредством КО перечисленных выше задач. В том числе рассмотрено создание односпиновых и двухспиновых взаимодействий, как линейных, так и квадратичных по спиновым операторам. Также рассмотрен способ выделения взаимодействия двух спинов из суммы взаимодействий всех спинов. Для факторизации числа 15 на трех кутритах предложен оригинальный способ создания трехспинового взаимодействия. Выполнено численное моделирование и исследована зависимость точности от шага дискретного времени, полного времени и величины поперечного магнитного поля.
- Рассмотрен модельный квантовый процессор на ПЯТИ представленных квадрупольными ядрами со спинами S=1, который управляется РЧ импульсами, селективными по переходам между соседними уровнями. обеспечивается взаимодействием Возможность адресации спинов кристаллическими полями. Выполнено магнитными численное АКА кластеризации на моделирование реализации примере разбиения множества из шести точек на три группы. Найдены амплитуды и длительности прямоугольных РЧ импульсов, а также длительности интервалов свободной управляющей последовательности импульсов, позволившей получить зависящий от времени эффективный гамильтониан в приближении времени. Исследована зависимость точности реализации от дискретного точность физических Достигнута 0.9887. параметров. принципиальная возможность реализации АКВ на данном процессоре и

преимущества кутритов над кубитами, поскольку для решения той же задачи потребовалась бы система из 15 кубитов.

## Список публикаций по теме диссертации

- [A1] Pichkovskiy I. V. Associative memory on qutrits by means of quantum annealing/ V. Zobov, I. Pichkovskiy //Quantum Inf. Process. 2020. T. 19. C. 1-12.
- [A2] Zobov V. E. Clustering by quantum annealing on the three-level quantum elements qutrits/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy //Quantum Inf. Process. 2022. T. 21. №. 4. C. 144.
- [А3] Зобов В. Е. Последовательности селективных операторов поворотов для создания взаимодействий для квантового отжига на трех кутритах/ В. Е. Зобов, И. С. Пичковский //Сибирский физический журнал. 2019. Т. 14. N0. 1. С. 5-16.
- [A4] Zobov V. E. Sequences of selective rotation operators to engineer interactions for quantum annealing on three qutrits/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy //International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2018. SPIE, 2019. T. 11022. C. 778-786.
- [A5] Zobov V. E. Sequences of selective rotation operators for three group clustering on qutrits by means of quantum annealing/V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy//International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2021. SPIE, 2022. T. 12157. C. 540-548.
- [A6] Pichkovskiy I. S.Clustering into three groups on a quantum processor of five spins S= 1, controlled by pulses of resonant RF fields/ I. S. Pichkovskiy, V. E. Zobov //Appl. Magn. Reson. − 2023. − T. 54. − №. 7. − C. 661-677.
- [A7] Pichkovskiy I. S. Modeling of quantum annealing in the ternary system: the factorization of the number 551/ I. S. Pichkovskiy //Сборник тезисов конференции Современные проблемы радиоэлектроники. г. Красноярск 3-4 мая 2018. С. 496-499.
- [A8] Зобов В. Е. Ассоциативная память на кутритах посредством квантового отжига / В. Е. Зобов, И. С. Пичковский //Сборник тезисов конкурсаконференции ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых ученых, аспирантов и студентов. Г. Красноярск 4 апреля 2019 г. Секция "Физика". С. 9.
- [A9] Zobov V. E. Associative memory on qutrits by means quantum annealing/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy // Book of abstract the International Conference "MODERN DEVELOPMENT OF MAGNETIC RESONANCE", г. Казань 23-27 сентября 2019 г. С. 63
- [A10] Пичковский И. С. Кластеризация посредством квантового отжига на квантовых трёхуровневых элементах-кутритах / И. С. Пичковский, В. Е. Зобов //Нейроинформатика, ее применение и анализ данных: Материалы XXVIII Всероссийского семинара, г. Красноярск ИВМ СО РАН 25-27 сентября 2020. С. 103-110.
- [A11] Zobov V. E. Clustering by quantum annealing on three level quantum elements qutrits/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy// Materials of conference "Quantum Informatics 2021" МГУ, Москва 30 марта—4 апреля 2021 г.

- [A12] Zobov V. E. Sequences of selective rotation operators to engineer interactions for quantum annealing on three qutrits/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy // Book of abstract the International Conference "Micro- and nanoelectronics 2018", Moscow-Zvenigorod October 1-5 2018 C. 117 (P1-45).
- [A13] Zobov V. E. Sequences of selective rotation operators for three group clustering on qutrits by means quantum annealing/ V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy // Book of abstract of the International Conference on Micro-and Nano-Electronics Moscow-Zvenigorod October 4-8 2021 C.81 (q2-10).
- [А14] Пичковский И. С. Реализация с помощью радиочастотных импульсов селективных операторов поворотов для квантового процессора на кутритах // Сборник тезисов Конкурса-конференции ФИЦ КНЦ СО РАН для молодых учёных, аспирантов и студентов. Секция «Физика» г. Красноярск 31 марта 2022 г. С. 17.
- [A15] Pichkovskiy I. S. Clustering into three groups on a quantum processor of five spins S = 1, controlled by pulses of resonant RF fields/ I. S. Pichkovskiy, V. E. Zobov // Abstracts of the International Conference "modern development of magnetic resonance", Kazan October 3-7 2022 C. 51
- [A16] Pichkovskiy I. S. Implementation of adiabatic clustering quantum algorithm on system of five spins S = 1/ I. S. Pichkovskiy, V. E. Zobov // Books of abstract of the International Conference "Micro- and nanoelectronics 2023" Moscow-Zvenigorod October 2-6 2023 C. 106 (P1-19).

## Список цитируемой литературы

- [1] Валиев К. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность/ К. А. Валиев, А. А. Кокин Ижевск: РХД, 2001.
- [2] Манин Ю. И. Вычислимое и невычислимое, Кибернетика/ Ю. И. Манин//, Сов. Радио, М. 1980 С. 128.
- [3] Theis T. N. The end of moore's law: A new beginning for information technology/ T. N. Theis //Computing in science & engineering. − 2017. − T. 19. − №. 2. − C. 41-50.
- [4] Biamonte J. et al. Quantum machine learning/J. Biamonte T. N. Theis; H.-S. P. Wong //Nature. − 2017. − T. 549. − №. 7671. − C. 195-202.
- [5] Preskill J. Quantum computing 40 years later/ J. Preskill //Feynman Lectures on Computation. CRC Press, 2023. C. 193-244.
- [6] Žutić I. Spintronics: Fundamentals and applications/ I. Žutić, J. Fabian S. D. Sarma//Rev. Mod. Phys. − 2004. − T. 76. − №. 2. − C. 323.
- [7] Yuan H. Y. Quantum magnonics: When magnon spintronics meets quantum information science/ H.Y. Yuan, Y. Cao, A. Kamra, R. A. Duine, P. Yan //Physics Reports. 2022. T. 965. C. 1-74.
- [8] Jones J. A. Controlling NMR spin systems for quantum computation/ J. A. Jones //Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. 2024.
- [9] Georgescu I. M. Quantum simulation/ I. M. Georgescu, S. Ashhab, Franco Nori //Rev. Mod. Phys. 2014. T. 86. №. 1. C. 153.

- [10] Bhowmick R. et al. Towards Quantum Dynamics Simulation of Physical Systems: A Survey/ R. Bhowmick, N. K. Mohan, D. Kumar, R. Chaurasiya, N. Patel //arXiv preprint arXiv:2310.11801. 2023.
- [11] Albash T. Adiabatic quantum computation/ T. Albash, D. A. Lidar //Rev. Mod. Phys. −2018. − T. 90. − №. 1. − C. 015002.
- [12] Peng X. Quantum adiabatic algorithm for factorization and its experimental implementation/ X. Peng, Z. Liao, N. Xu, G. Qin, X. Zhou, D. Suter, J. Du //Phys. Rev. Lett. − 2008. − T. 101. − №. 22. − C. 220405.
- [13] Neigovzen R. Quantum pattern recognition with liquid-state nuclear magnetic resonance/ R. Neigovzen, J. L. Neves, R. Sollacher, S. J. Glaser //Phys. Rev. A. 2009. T. 79. № 4. C. 042321.
- [14] Rajak A. Quantum annealing: An overview/ A. Rajak, S. Suzuki, A. Dutta, B. K. Chakrabarti //Phil. Trans. R. Soc. A. − 2023. − T. 381. − №. 2241. − C. 20210417.
- [15] Brooke J. Quantum annealing of a disordered magnet/ J. Brooke, D. Bitko, T. F. Rosenbaum, G. Aeppli //Science. 1999. T. 284. №. 5415. C. 779-781.
- [16] King A.D. Quantum critical dynamics in a 5,000-qubit programmable spin glass/A. D. King, J. Raymond, T. Lanting, R. Harris, A. Zucca, F. Altomare, A. J. Berkley, K. Boothby, S. Ejtemaee, C. Enderud, E. Hoskinson, S. Huang, E. Ladizinsky, A. J. R. MacDonald, G. Marsden, R. Molavi, T. Oh, G. Poulin-Lamarre, M. Reis, C. Rich, Y. Sato, N. Tsai, M. Volkmann, J. D. Whittaker, J. Yao, A. W. Sandvik, M. H. Amin //Nature. − 2023. − T. 617. − №. 7959. − C. 61-66.
- [17] Kumar V. Quantum annealing for combinatorial clustering/ V. Kumar, G. Bass, C. Tomlin, J. Dulny III //Quantum Inf. Process. 2018. T. 17. C. 1-14.
- [18] Mohseni N. Ising machines as hardware solvers of combinatorial optimization problems/ N. Mohseni, P. L. McMahon, T. Byrnes //Nat. Rev. Phys. − 2022. − T. 4. − № 6. − C. 363-379.
- [19] Wang Y. Qudits and high-dimensional quantum computing/ Y. Wang, Z. Hu, B. C. Sanders, S. Kais //Front. Phys. 2020. T. 8. C. 589504.
- [20] Senko C. Realization of a quantum integer-spin chain with controllable interactions/ C. Senko, P. Richerme, J. Smith, A. Lee, I. Cohen, A. Retzker, C. Monroe //Phys. Rev. X. 2015. T. 5. № 2. C. 021026.
- [21] Jin Z. Dissipative preparation of qutrit entanglement via periodically modulated Rydberg double antiblockade/ Z. Jin, W.-J. Gong, A.-D. Zhu, S Zhang, Y. Qi, S.-L. Su //Opt. Express. − 2021. − T. 29. − № 7. − C. 10117-10133.
- [22] Осокин Д. Я. Переходные сигналы в эффективном поле многоимпульсной последовательности/ Д. Я. Осокин // ЖЭТФ. 1999. Т. 115. № 5. С. 1580–1592.
- [23] Neumann P. Quantum register based on coupled electron spins in a room-temperature solid/ P. Neumann, R. Kolesov, B. Naydenov, J. Beck, F. Rempp, M. Steiner, V. Jacques, G. Balasubramanian, M. L. Markham, D. J. Twitchen, S. Pezzagna, J. Meijer, J. Twamley, F. Jelezko, J. Wrachtrup //Nature Phys. − 2010. − T. 6. − № 4. − C. 249-253.
- [24] Choi J. Depolarization dynamics in a strongly interacting solid-state spin ensemble/ J. Choi, S. Choi, G. Kucsko, P. C. Maurer, B. J. Shields, H. Sumiya, S.

- Onoda, J. Isoya, E. Demler, F. Jelezko, N. Y. Yao, M. D. Lukin //Phys. Rev. Let. 2017. T. 118. №. 9. C. 093601.
- [25] Blok M. S. Quantum information scrambling on a superconducting qutrit processor/ M. S. Blok, V. V. Ramasesh, T. Schuster, K. O'Brien, J. M. Kreikebaum, D. Dahlen, A. Morvan, B. Yoshida, N. Y. Yao, I. Siddiqi//Phys. Rev. X. − 2021. − T. 11. − № 2. − C. 021010.
- [26] Choi S. Dynamical engineering of interactions in qudit ensembles/ S. Choi, N. Y. Yao, M. D. Lukin //Phys. Rev. Lett. 2017. T. 119. №. 18. C. 183603.
- [27] O'Keeffe M. F. Hamiltonian engineering with constrained optimization for quantum sensing and control/ M. F O'Keeffe, L. Horesh, J. F Barry, D. A Braje, I. L Chuang //New J. Phys. 2019. T. 21. №. 2. C. 023015.
- [28] Зобов В. Е. О выполнении квантового адиабатического алгоритма факторизации на двух кудитах/ В. Е. Зобов, А. С. Ермилов //ЖЭТФ. 2012. Т. 141. № 6. С. 1060-1070.
- [29] Ogunkoya O. Qutrit circuits and algebraic relations: A pathway to efficient spin-1 Hamiltonian simulation/ O. Ogunkoya, J. Kim, B. Peng, A. B. Özgüler, Y. Alexeev //Phys. Rev. A. − 2024. − T. 109. − № 1. − C. 012426.
- [30] Camacho G. Dynamically generated quadrupole polarization using Floquet adiabatic evolution/ G. Camacho, C. Karrasch, R. Rausch //Phys. Rev. Res. 2023. T. 5. № 2. C. 023015.
- [31] Suzuki M. General theory of fractal path integrals with applications to many-body theories and statistical physics/ M. Suzuki //J. Math. Phys. − 1991. − T. 32. − №. 2. − C. 400-407.
- [32] Schaller G. The role of symmetries in adiabatic quantum algorithms/ G. Schaller, R. Schützhold//Quantum Information and Computation. − 2010. − T. 10. − №. 1. − C. 0109-0140.
- [33] Pal S. Hybrid scheme for factorisation: Factoring 551 using a 3-qubit NMR quantum adiabatic processor/ S. Pal, S. Moitra, V S Anjusha, A. Kumar, T. S. Mahesh //Pramana J. Phys. 2019. T. 92. C. 1-8.
- [34] Хант Э. Искусственный интеллект/ Э. Хант, под ред. В. Л. Стефанюк Москва: Мир, 1978. 558 с.
- [35] Haeberlen U. Coherent averaging effects in magnetic resonance/ U. Haeberlen, J. S. Waugh //Physical Review. 1968. T. 175. №. 2. C. 453.
- [36] Leuenberger M. N. Grover algorithm for large nuclear spins in semiconductors/ M. N. Leunderger, D. Loss //Physical Review B. − 2003. − T. 68. − №. 16. − C. 165317.

Отпечатано в типографии Института физики им Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наукобособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Тираж 60 экз. Заказ №10. Объём 1.4 усл. печ. л. Формат 60х84/16 660036, Красноярский край, г. Красноярск, Академгородок, д. 50 стр. 38