

Решение уравнения Шредингера на квантовом компьютере методом Залки–Визнера с учетом квантовых шумов

Ю. И. Богданов¹⁾, Н. А. Богданова, Д. В. Фастовец, В. Ф. Лукичев

Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 августа 2021 г.

После переработки 12 августа 2021 г.

Принята к публикации 12 августа 2021 г.

Рассмотрено моделирование квантовых систем на квантовом компьютере с использованием метода Залки–Визнера с учетом квантовых шумов. Эффективность разработанных методов и алгоритмов продемонстрирована на примере решения нестационарного уравнения Шредингера для частицы в потенциале Пешль–Теллера. Выполнено сравнение развитой аналитической теории влияния квантовых шумов на точность моделирования с результатами численных расчетов методом Монте-Карло. Осуществлен прогноз точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы в зависимости от числа электронов и для различных уровней шума.

DOI: 10.31857/S1234567821180099

1. Введение. Квантовые компьютеры позволяют достичь экспоненциального ускорения при решении определенных практически значимых задач. Одной из важнейших таких задач является задача моделирования квантовых систем. Необходимость в проведении высокоточного моделирования эволюции квантовых систем различной природы возникает в таких научных областях, как физика [1], квантовая химия [2] и компьютерные технологии [3]. Наиболее прямой способ решения задач в случае квантово-механических систем – это поиск решения нестационарного уравнения Шредингера. Это уравнение, конечно, можно пытаться решать численно с использованием классического компьютера. Однако, в этом случае, для проведения высокоточного моделирования реальных практически важных задач, понадобится экспоненциально большое количество ресурсов (по памяти и времени выполнения). С другой стороны, для моделирования эволюции квантовой системы можно использовать квантовый компьютер. Показано, что квантовый компьютер способен эффективно решать нестационарное уравнение Шредингера при использовании алгоритма Залки–Визнера [4, 5], который является одним из основных методов анализа квантовых систем с использованием квантовых вычислений.

Рассматриваемый алгоритм позволяет использовать ресурсы квантовых вычислений для моделирования эволюции квантовой системы, описываемой произвольным гамильтонианом. Алгоритм Залки–

Визнера активно исследуется различными научными группами. Эффективность данного алгоритма на небольшом числе кубитов была доказана и продемонстрирована численно [6], а также была проведена апробация с использованием облачного квантового процессора IBM [7]. Универсальность данного алгоритма позволяет применять его к самым различным квантовым системам, включая системы многих тел с кулоновским взаимодействием [8] и системы квантовых гармонических осцилляторов [9].

Отметим, что было разработано несколько модификаций данного алгоритма. Например, описана адаптация алгоритма Залки–Визнера к моделированию химических реакций [10]. Особое внимание авторы этой работы уделяют приготовлению необходимого квантового состояния, что является важной проблемой при реализации ряда квантовых алгоритмов. В работе проводится апробация при моделировании небольшого числа атомов (4–5), а также приводятся методы расчета химически значимых наблюдаемых. Другое исследование [11] посвящено модификации алгоритма Залки–Визнера, которая превосходит явную разностную схему по точности, однако требует экспоненциальных затрат по памяти. Разработанный алгоритм позволяет проводить моделирование динамики в реальном времени, что было подтверждено в численных экспериментах.

Основное препятствие на пути развития квантовых компьютеров и квантовых симуляторов связано с влиянием декогерентизации и квантовых шумов на динамику многокубитных квантовых систем [12]. Учет влияния декогерентизации и квантовых

¹⁾e-mail: bogdanov_yurii@inbox.ru

шумов на эффективность работы алгоритма Залки–Визнера представляет собой актуальную и еще не исследованную задачу. Подобные исследования, на наш взгляд, критически важны для практической реализации рассматриваемого квантового алгоритма. Получаемые при этом результаты могут быть использованы для улучшения качества работы алгоритма как на программном, так и на аппаратном уровнях. Данному исследованию алгоритма и посвящена настоящая работа. В разделе 2 дается описание общей идеи метода Залки–Визнера. Важно отметить, что каждый шаг эволюции квантового состояния регистра кубитов связан с применением прямого и обратного преобразования Фурье и, таким образом, точность преобразования Фурье в квантовом регистре лимитирует итоговую точность решения нестационарного уравнения Шредингера. Оценка влияния квантовых шумов на квантовое преобразование Фурье с использованием подхода на основе теории квантовых операций рассмотрена в разделе 3. В разделе 4 представлена апробация разработанных методов и алгоритмов на примере рассмотрения динамики квантовой частицы в потенциале Пешль–Теллера. В разделе 5 представлены выводы по работе.

2. Общая идея метода Залки–Визнера. Рассмотрим для простоты одномерную динамику квантовой частицы. Формальное обобщение на случай многомерной многочастичной системы производится непосредственно. Полное время эволюции t разбивается на достаточное число интервалов n_t . Моделирование осуществляется на отдельном, малом интервале $\Delta t = t/n_t$ и повторяется n_t раз.

Работа алгоритма Залки–Визнера начинается с учета влияния оператора потенциальной энергии в координатном представлении, а затем, посредством преобразования Фурье, производится переход в импульсное представление, в котором обеспечивается учет оператора кинетической энергии, после чего происходит возврат в исходное координатное представление посредством обратного преобразования Фурье. Таким образом, оператор унитарной эволюции в координатном пространстве на малом интервале времени Δt есть:

$$U_{\Delta t} = \text{IQFT} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t\right) \text{QFT} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t\right). \quad (1)$$

Здесь $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t\right)$ – оператор эволюции в координатном пространстве, определяемый потенциалом $V(x)$; QFT (*Quantum Fourier Transform*) – квантовое преобразование Фурье, обеспечивающее переход от координатного представления в импульсное;

$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t\right)$ – оператор эволюции в импульсном пространстве, определяемый оператором кинетической энергии $\frac{p^2}{2m}$; IQFT (*Inverse Quantum Fourier Transform*) – обратное квантовое преобразование Фурье, обеспечивающее переход от импульсного представления снова в координатное.

Прямое квантовое преобразование Фурье (QFT) волновой функции, обеспечивающее переход от координатного представления к импульсному, есть:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) \psi(x) dx.$$

Обратное квантовое преобразование Фурье (IQFT), обеспечивающее переход от импульсного представления к координатному, есть:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \tilde{\psi}(p) dp.$$

Наличие квантового регистра из n кубитов обеспечивает $N = 2^n$ точек дискретизации и отвечает эволюции соответствующей дискретизированной квантовой системы в гильбертовом пространстве размерности N .

Представление эволюции в виде (1) является хорошим приближением при достаточно больших n_t в силу формулы Троттера:

$$\lim_{n_t \rightarrow \infty} [\exp(-iAt/n_t) \exp(-iBt/n_t)]^{n_t} = \exp[-i(A+B)t]. \quad (2)$$

Известно, что если операторы A и B не коммутируют, то

$$\exp[-i(A+B)t] \neq \exp(-iAt) \exp(-iBt)$$

при конечных временах t . Однако, в силу формулы Троттера (2), такого рода соотношение выполняется для малых времен Δt . В нашем случае в роли A и B выступают операторы кинетической и потенциальной энергии соответственно. В данной работе были использованы две формы формулы Троттера [12], отличающиеся порядком точности:

$$\begin{aligned} \exp[-i(A+B)\Delta t] &= \\ &= \exp[-iA\Delta t] \exp[-iB\Delta t] + O((\Delta t)^2), \\ \exp[-i(A+B)\Delta t] &= \\ &= \exp[-iA\Delta t/2] \exp[-iB\Delta t] \exp[-iA\Delta t/2] + O((\Delta t)^3). \end{aligned}$$

Первую из этих формул будем называть стандартной, а вторую (более точную) – модифицированной.

3. Влияние квантовых шумов на квантовое преобразование Фурье: подход на основе теории квантовых операций. Идеальная квантовая схема представляет собой последовательный набор унитарных квантовых преобразований $\{U_i\}$. Операции U_i обычно действуют на один, два или, что реже, на три кубита. Для реальных физических систем реализация каждого преобразования U_i подразумевает наличие соответствующего гамильтониана H_i , осуществляющего операцию U_i за время t_i : $U_i = e^{-iH_i t_i/\hbar}$, однако для дальнейшего рассмотрения достаточно ограничиться заданием операторов U_i . Задача моделирования работы квантовой схемы состоит в нахождении итогового состояния системы $U_s \cdot U_{s-1} \cdot \dots \cdot U_2 \cdot U_1 |\psi_0\rangle$ по начальному состоянию $|\psi_0\rangle$.

Для описания открытых квантовых систем, подверженных влиянию квантовых шумов, необходимо использовать формализм матриц плотности. При этом преобразования квантовых состояний расширяются от унитарных до так называемых квантовых операций [13, 14]. Действие произвольной квантовой операции на квантовое состояние в виде матрицы плотности ρ может быть представлено в виде операторной суммы:

$$\varepsilon(\rho) = \sum_i E_i \rho E_i^\dagger,$$

где операторы E_i удовлетворяют условию нормировки $\sum_i E_i^\dagger E_i = I$ (сохранение нормы) и называются операторами Крауса.

В терминах векторов-состояний шум может быть введен при помощи метода Монте-Карло. Например, произвольный однокубитовый вентиль U_{ideal} может быть заменен на зашумленный аналог следующим образом:

$$U = U_{\text{ideal}} \cdot V_{\text{noise}}, \quad (3)$$

$$V_{\text{noise}} = \begin{pmatrix} \cos(e\xi) & \sin(e\xi) \\ -\sin(e\xi) & \cos(e\xi) \end{pmatrix},$$

где ξ – случайная величина с нормальным распределением $N(0, 1)$, а e – уровень ошибки. Такое представление зашумленного преобразования оказывается очень полезным и будет использоваться нами далее. Аналогичным образом может быть представлен зашумленный оператор контролируемого поворота фазы, используемый в квантовом преобразовании Фурье:

$$U_\theta = U_\theta^{\text{ideal}} \cdot V_\theta^{\text{noise}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i(\theta+e\xi)} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где U_θ^{ideal} – идеальный оператор поворота фазы, а V_θ^{noise} – соответствующий ему оператор шума. Для простоты изложения мы характеризуем уровень шума в формулах (3) и (4) одним и тем же параметром e .

Можно показать [15], что зашумляющее преобразование V_{noise} для однокубитовых операторов (3) статистически эквивалентно следующему набору операторов Крауса

$$E_1 = \sqrt{\lambda_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_2 = \sqrt{\lambda_2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}(1 + \exp(-2e^2)), \quad \lambda_2 = \frac{1}{2}(1 - \exp(-2e^2)). \quad (5)$$

Аналогично, для зашумленного оператора контролируемого сдвига фазы V_θ^{noise} из (4) имеем

$$E_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{P} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$E_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{1-P} \end{pmatrix},$$

где $P = \exp(-e^2)$.

Пусть начальное состояние системы, поступающей на вход моделируемой схемы, чистое. Тогда соответствующая матрица плотности имеет единичный ранг. Каждый оператор Крауса задает один из альтернативных путей эволюции квантовой системы, в связи с чем каждая квантовая операция увеличивает ранг матрицы плотности в геометрической прогрессии вплоть до максимально возможного ранга $r = 2^n$, где n – число кубитов в системе. Для сокращения числа необходимых вычислительных ресурсов будем на каждом шаге аппроксимировать полученную матрицу плотности матрицей плотности меньшего ранга (сохраняя лишь фиксированное число максимальных собственных значений и обнуляя остальные). Такая аппроксимация сохраняет положительную определенность матрицы плотности; однако ее след при

этом уменьшается, что соответствует уменьшению доли представителей, эволюционирующих по “правильному” пути.

Прямое применение аппроксимации единичным рангом к квантовому преобразованию Фурье ведет к следующей оценке, задающей точность преобразования для случайного состояния [15]:

$$F_{\text{QFT}} = P_H^n P_R^{n(n-1)/8}, \quad (7)$$

где $P_H = \frac{1}{2}(1 + \exp(-2e^2))$, $P_R = \exp(-e^2)$ – вероятности правильной работы преобразований Адамара и условного сдвига фазы соответственно.

Представленная формула использует тот факт, что преобразование Фурье содержит n преобразований Адамара и $n(n-1)/2$ двухкубитовых фазовых преобразований. При этом, для случайного состояния на входе, равномерно распределенного по мере Хаара, двухкубитовое фазовое преобразование на каждом шаге действует только на четвертую часть от общего числа амплитуд случайного состояния, поэтому двухкубитовый шум порождает показатель степени $n(n-1)/8$. Данная формула задает довольно грубую оценку для вероятности совпадения.

Рассматриваемая оценка может быть существенно улучшена приведением к главным осям операторов Крауса для вентиля условного сдвига фазы (6). Хорошо известно, что операторы Крауса определены с точностью до широкого унитарного произвола. Путем подбора подходящего унитарного преобразования диагонали матриц становятся ортогональными друг по отношению к другу. Операторы Крауса в новом представлении имеют вид [15]:

$$\tilde{E}_1 = \frac{1}{\sqrt{1+f^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{P} + f\sqrt{1-P} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\tilde{E}_2 = \frac{1}{\sqrt{1+f^2}} \begin{pmatrix} -f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -f\sqrt{P} + \sqrt{1-P} \end{pmatrix},$$

где $P = \exp(-e^2)$, $f = \frac{\sqrt{1+3P-P-1}}{\sqrt{P(1-P)}}$.

Операторы Крауса (6) и (8) унитарно эквивалентны, а следовательно, определяют одну и ту же квантовую операцию. Тогда улучшенная оценка для точности преобразования Фурье случайного состояния есть:

$$F_{\text{QFT}} = P_H^n \tilde{P}_R^{n(n-1)/8}, \quad (9)$$

где $\tilde{P}_R = \frac{(\sqrt{P} + f\sqrt{1-P})^2}{(1+f^2)^4}$.

Развитый приближенный подход позволяет прогнозировать влияние квантовых шумов на точность многокубитовых квантовых схем, которые пока еще не реализованы “в железе” и которые не могут быть промоделированы ни на каких современных или перспективных классических компьютерах.

4. Апробация на основе потенциала Пешль–Теллера. В настоящем разделе представлены результаты численных экспериментов, направленных на демонстрацию корректности приведенных выше формул и методов. Для этого было осуществлено моделирование динамики квантовой частицы, находящейся в потенциале Пешль–Теллера. Данный потенциал задается следующей формулой [16, 17]:

$$V(x) = -\frac{V_0}{\text{ch}^2(x/a)} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\lambda(\lambda-1)}{\text{ch}^2(x/a)}. \quad (10)$$

Здесь безразмерный параметр λ характеризует глубину потенциальной ямы. Параметры V_0 и a есть величины, характеризующие глубину потенциальной ямы и ее пространственный масштаб.

Рассматриваемая задача допускает точное квантовомеханическое решение [16, 17]. Ограничимся рассмотрением состояний дискретного спектра (т.е. связанных состояний, отвечающих отрицательной или нулевой энергии). Соответствующие энергетические уровни есть:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} (\lambda - 1 - n)^2, \quad (11)$$

где $n = 0, 1, \dots, n_{\text{max}}$. Заметим, что связанным состояниям отвечает условие: $n_{\text{max}} \leq \lambda - 1$.

Волновые (ненормированные) функции стационарных состояний, выраженные через гипергеометрическую функцию, есть:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\text{ch}^{\lambda-1-n}(x/a)} \times \\ \times F \left[-n, 2\lambda - 1 - n, \lambda - n, \frac{1}{2}(1 - \text{th}(x/a)) \right], \quad (12)$$

где $-\infty < x < \infty$.

Другая форма записи (через полиномы Гегенбауэра, являющиеся частной формой полиномов Якоби) имеет вид:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\text{ch}^{\lambda-1-n}(x/a)} C_n^{\lambda-n-\frac{1}{2}}(\text{th}(x/a)). \quad (13)$$

В примерах, представленных ниже, проводится сравнение результатов численных расчетов методом Залки–Визнера с учетом квантовых шумов с

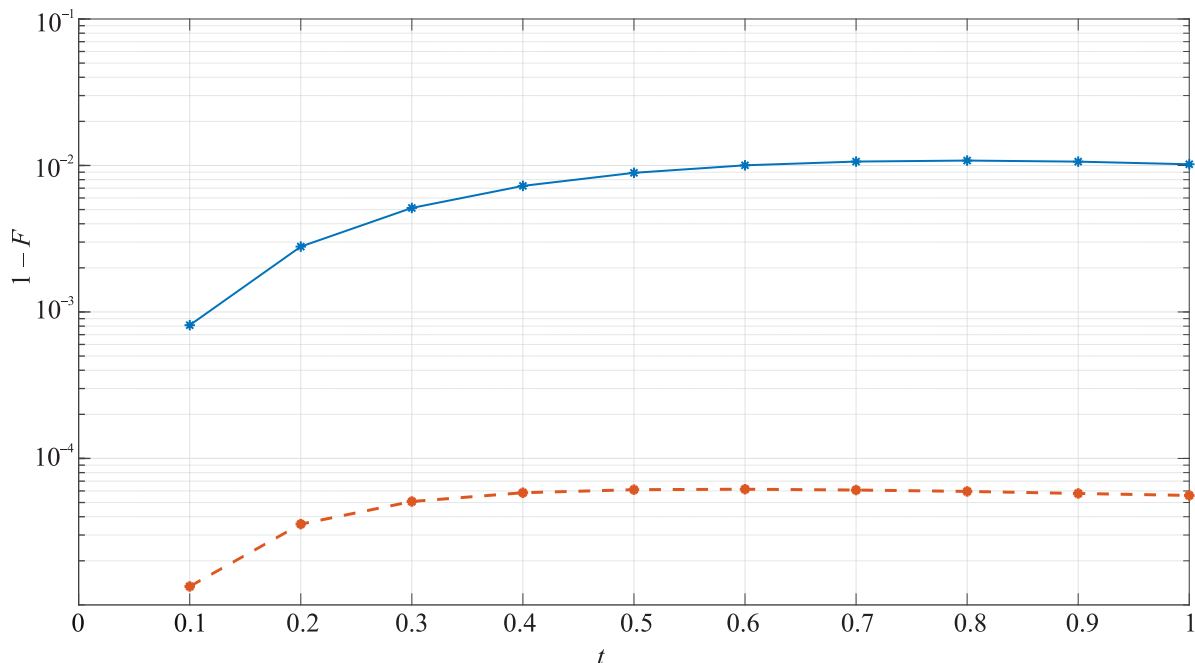


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость потерь точности от времени эволюции квантового состояния для стандартной (верхняя сплошная кривая) и модифицированной формул Троттера (нижняя штриховая кривая)

точным аналитическим решением нестационарного уравнения Шредингера.

Рассматривалось следующее состояние, представляющее собой суперпозицию нулевой и первой моды (глубина потенциальной ямы и пространственный масштаб были выбраны соответственно равными $\lambda = 4$ и $a = 1$):

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \quad (14)$$

$$\times \left[\exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right) \psi_0(x) + i \exp\left(-i\frac{E_1 t}{\hbar}\right) \psi_1(x) \right].$$

В качестве показателя точности рассматривалась вероятность совпадения F (Fidelity), которая задается формулой $F = |\langle \psi_{\text{noise}} | \psi_{\text{theor}} \rangle|^2$ и характеризует степень соответствия между зашумленной волновой функцией ψ_{noise} , полученной методом Залки–Визнера, и точным (но дискретизованным) решением ψ_{theor} .

На рисунке 1 представлено сравнение стандартной и модифицированной формул Троттера для системы из 7 кубитов при $\Delta t = 0.1$. Видно, что модифицированная формула Троттера в рассматриваемом примере обеспечивает ошибку, которая более чем на 2 порядка ниже, чем ошибка стандартной формулы Троттера.

Рисунок 2 дает наглядное представление об уровне влияния квантовых шумов на точность получения решения уравнения Шредингера на

квантовом вычислителе. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистра из 9 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$.

Сравнение развитой теории влияния квантовых шумов на точность моделирования с результатами численных расчётов представлено на рис. 3 и 4.

Из рисунка 3 видно, что улучшенная оценка на основе формулы (9) имеет много лучшую точность по сравнению с оценкой на основе (7) и визуально совпадает с численными экспериментами. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистра из 7 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$, было выполнено 30 экспериментов.

На рисунке 4 видно, что улучшенная оценка дает адекватный прогноз точности для различного числа кубитов в регистре. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистров из 7, 8 и 9 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$, для каждого регистра было выполнено по 30 экспериментов.

В представленных на рис. 3 и 4 случаях ошибка дискретизации, обусловленная конечным числом кубитов в регистре, оказалась пренебрежимо малой по сравнению с ошибками, вызванными шумами в квантовом преобразовании Фурье. По этой причине уровень точности F оказался более низким для большего числа кубитов в регистре.

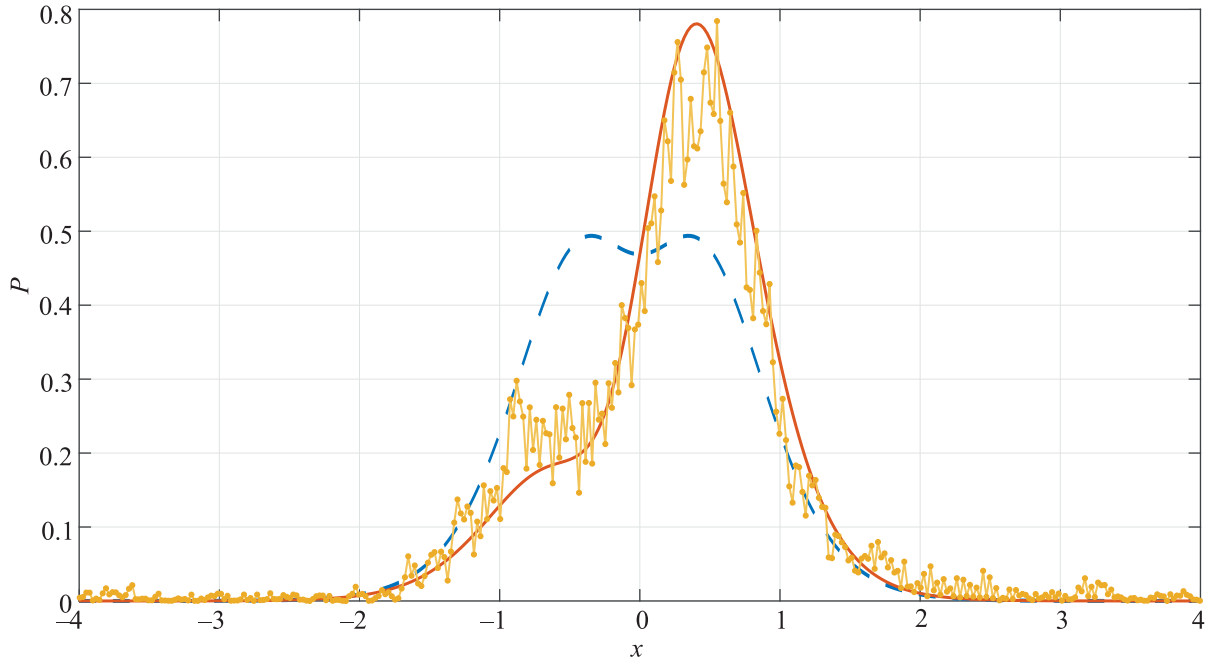


Рис. 2. (Цветной онлайн) Иллюстрация эволюции плотности распределения в координатном представлении. Начальное состояние – штриховая кривая, конечное состояние в момент времени $t = 1$ – сплошная кривая, зашумленное решение Залки–Визнера представлено набором точек

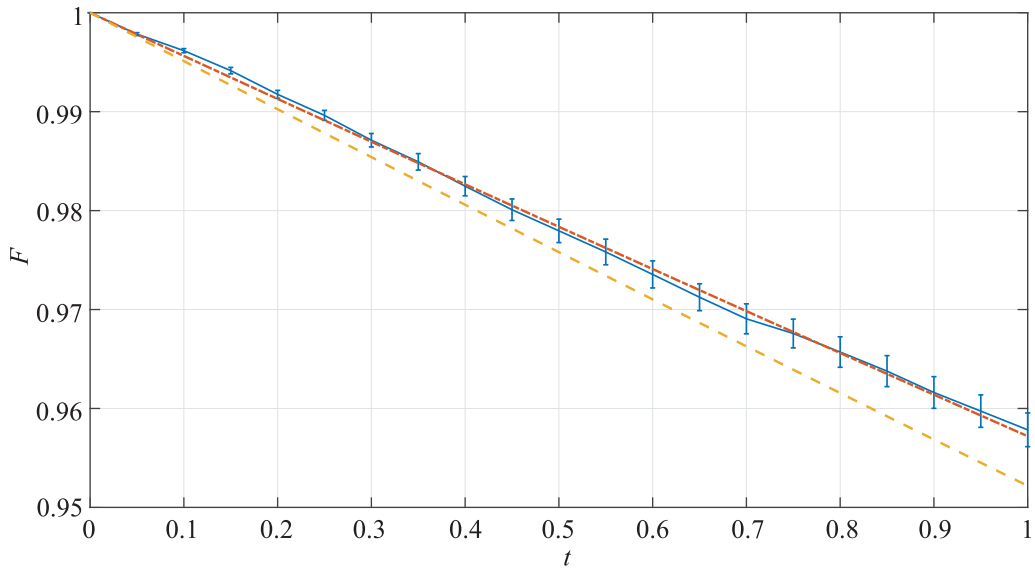


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость точности алгоритма Залки–Визнера моделирования движения частицы в потенциале Пешль–Теллера от времени эволюции состояния. Исходная теоретическая оценка – штриховая линия, улучшенная оценка – штрих-пунктирная линия, зашумленное численное решение Залки–Визнера – сплошная линия с отмеченными среднеквадратичными ошибками

Теоретические кривые на рисунках 3 и 4 построены по следующей формуле, основанной на формуле (9):

$$F = (F_{\text{QFT}})^{2t/\Delta t}. \quad (15)$$

В формуле (15) величина $t/\Delta t$ представляет собой число шагов по времени, коэффициент 2 в показате-

ле степени связан с тем, что на каждом шаге преобразование Фурье совершается дважды (прямое и обратное преобразования).

На рисунке 5 представлен прогноз точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем с различным числом электронов и с уче-

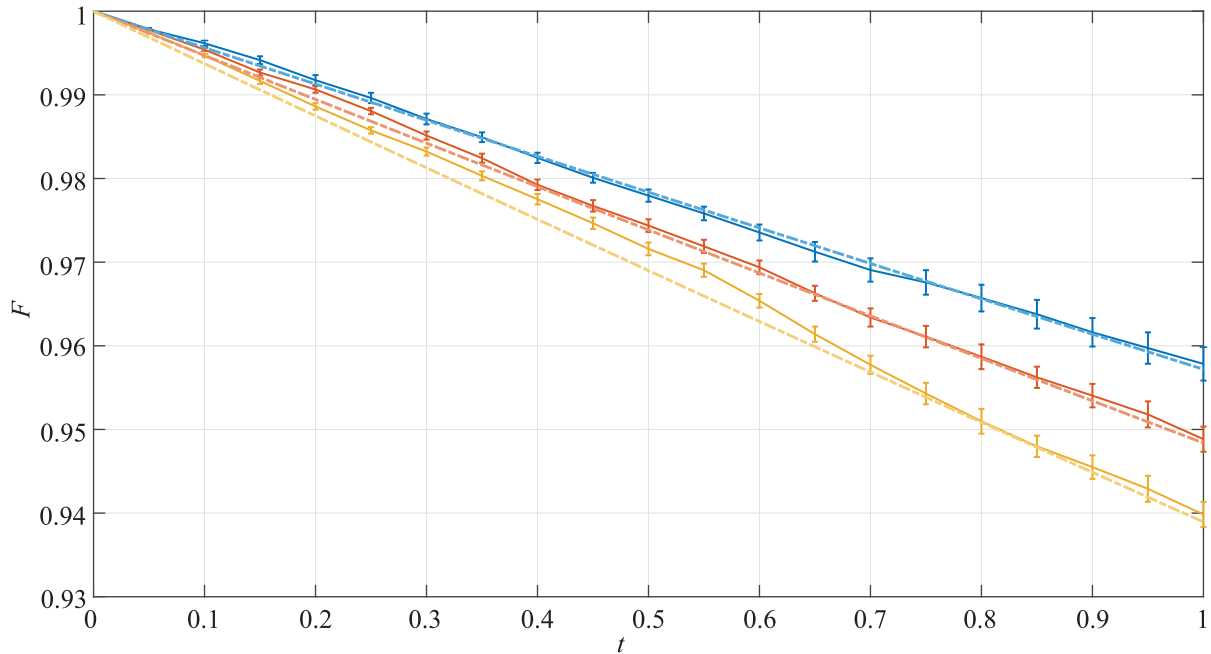


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость точности алгоритма Залки–Визнера моделирования движения частицы в потенциале Пешль–Теллера от времени эволюции состояния при использовании различного числа кубитов в квантовом регистре. Зашумленное численное решение Залки–Визнера – сплошные линии с отмеченными среднеквадратичными ошибками, улучшенные теоретические оценки – штриховые линии, кривые сверху вниз отвечают соответственно 7-ми, 8-ми и 9-ти кубитам

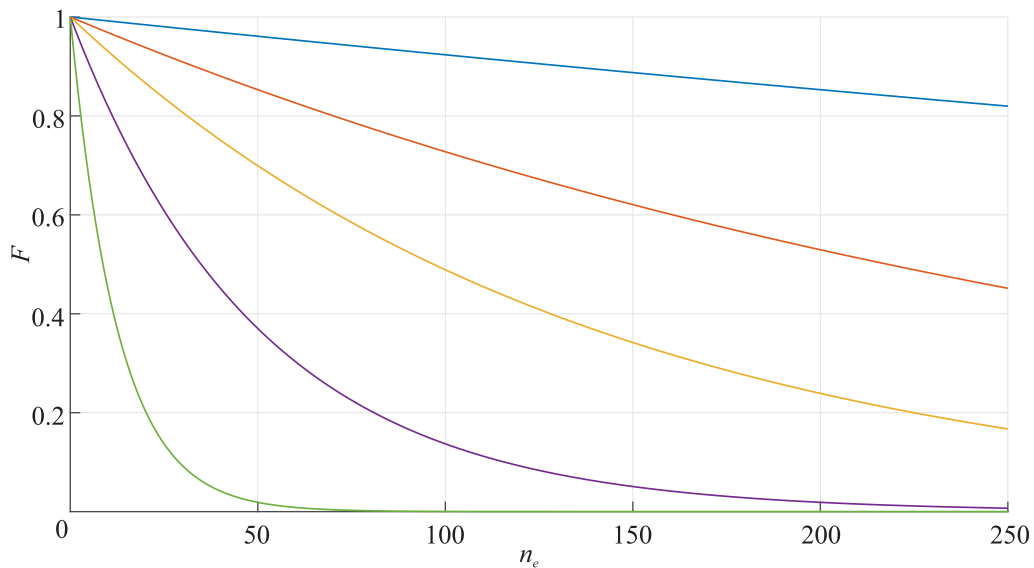


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость точности моделирования алгоритма Залки–Визнера многоэлектронных систем от числа электронов для различных уровней шума. Кривые сверху вниз отвечают увеличивающимся значениям уровня шума, соответственно, $e = 0.001, 0.002, 0.003, 0.005, 0.01$

том различного уровня шумов. Прогноз получен по формуле (15) при $t = 1$, $\Delta t = 0.1$, считалось что система из n_e электронов задана в $3n_e$ конфигурационном пространстве, при этом на каждую координа-

ту было выделено $n_0 = 8$ кубитов, соответствующее преобразование Фурье каждой координаты содержит в себе n_0 преобразований Адамара и $n_0(n_0 - 1)/2$ преобразований контролируемого фазового сдвига.

Из рисунка 5 видно, что для адекватного моделирования квантовых систем из десятков электронов требуется иметь уровень ошибки порядка $\epsilon = 0.01$ и ниже, а для моделирования систем из сотен электронов нужно обеспечить уровень $\epsilon = 0.001$ и ниже. При этом вероятность ошибки отдельного вентиля должна достигать уровня ϵ^2 , т.е. порядка 10^{-4} – 10^{-6} .

Заметим, что моделирование может оказаться успешным и при относительно невысоких уровнях точности, когда F порядка 0.01 и даже ниже. В этом случае искомый результат моделирования должен достигаться за счет большого объема статистики, получаемого в квантовых измерениях. Процесс отладки экспериментальных и технологических процедур требует широкого использования методов квантовой томографии [18].

Заметим также, что задача моделирования квантовой системы может быть совмещена с проведением квантовых измерений во взаимно-дополнительных координатном и импульсном пространствах в рамках томографического метода Монте-Карло, предложенного в [19].

Реализация алгоритма Залки–Визнера может быть осуществлена на различных платформах, включая ионы в ловушках [20], атомы в ловушках [21, 22] и сверхпроводниковые кубиты [23]. Представленные в настоящем исследовании результаты могут быть использованы для различных экспериментальных реализаций алгоритма на большом числе кубитов в качестве базовой модели оценки итоговой точности квантового алгоритма. Многокубитная реализация рассматриваемого алгоритма позволит находить решения уравнения Шредингера для весьма сложных квантовых систем, радикально расширяя возможности современных аналитических и численных методов решения данного уравнения [24, 25].

В настоящем исследовании мы сосредоточились на анализе влияния шумов в квантовом преобразовании Фурье на точность решения уравнения Шредингера, отвлекаясь от ряда существенных факторов, таких как конечная точность дискретизации, ошибки в фазовых преобразованиях, релятивистские поправки, фермионный характер многоэлектронных систем и др. Анализ влияния этих факторов на точность решения уравнения Шредингера может стать предметом отдельных исследований.

5. Выводы. Разработан подход к моделированию квантовых систем на квантовом компьютере с использованием метода Залки–Визнера с учетом квантовых шумов.

Получены аналитические оценки для точности алгоритма Залки–Визнера, обусловленные ошибками при реализации квантового преобразования Фурье.

Разработанные методы и алгоритмы апробированы на примере решения нестационарного уравнения Шредингера для частицы в потенциале Пешль–Теллера. Продемонстрировано хорошее согласие результатов численного моделирования методом Монте-Карло с аналитическими оценками.

Представлен метод прогнозирования точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронных квантовых систем.

Авторы надеются, что результаты выполненного исследования имеют существенное значение для разработки методов моделирования квантовых систем с использованием квантовых компьютеров и симуляторов, что критически важно для решения практически значимых задач в самых различных научных областях.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К. А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме # 0066-2019-0005 при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант # 20-1-1-34-1).

1. R. Somma, G. Ortiz, E. Knill, and J. Gubernatis, *Int. J. of Quant. Inf.* **1**, 189 (2003).
2. I. Kassal, J.D. Whitfield, A. Perdomo-Ortiz, M.-H. Yung, and A. Aspuru-Guzik, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **62**, 185 (2011).
3. J. Diaz, K. Jansen, J.D.P. Rolim, and U. Zwick, *Approximation, Randomization, and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques. 9th International Workshop on Approximation for Combinatorial Optimization Problems (APPROX 2006) and 10th International Workshop on Randomization and Computation (RANDOM 2006), Proceedings*, Barcelona, Spain (2006).
4. C. Zalka, *Fortschr. Phys.* **46**, 877 (1998); arXiv:quant-ph/9603026.
5. S. Wiesner, arXiv:quant-ph/9603028 (1996).
6. G. Benenti and G. Strini, *Am. J. Phys.* **76**, 657 (2008).
7. J. Abhijith, A. Adedoyin, J. Ambrosiano et al. (Collaboration), arXiv:1804.03719 (2020).
8. Y. Fan, *Int. J. of Quant. Inf.* **10**(05), 1250049 (2012).
9. R. D. Somma, *Quantum Info. Comput.* **16**, 1125 (2016).
10. I. Kassal, S.P. Jordan, P.J. Love, M. Mohseni, and A. Aspuru-Guzik, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **105**, 18681 (2008).
11. Ю. И. Ожигов, *Матем. моделирование* **24**(2), 109 (2012).

12. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, М. (2006), 824 с.
13. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦМНО, М. (2014), 311 с.
14. Yu. I. Bogdanov, A. Yu. Chernyavskiy, A. S. Holevo, V. F. Lukichev, and A. A. Orlikovsky, Proc. of SPIE **8700**, 87001A (2013); arXiv: 1207.3313 [quant-ph].
15. Yu. I. Bogdanov, A. Yu. Chernyavskiy, B. I. Bantysh, V. F. Lukichev, A. A. Orlikovsky, I. A. Semenihih, D. V. Fastovets, and A. S. Holevo, Proc. of SPIE **9440**, 94401H (2014); arXiv:1412.2293 [quant-ph].
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М. (1974), 752 с.
17. З. Флюге, *Задачи по квантовой механике*, пер. с англ. Б. А. Лысова, под ред. А. А. Соколова, Мир, М. (1974), т. 1, 341 с.
18. Б. И. Бантыш, А. Ю. Чернявский, Ю. И. Богданов, Письма в ЖЭТФ **111**(9), 615 (2020).
19. Ю. И. Богданов, *Квантовая электроника* **37**(12), 1091 (2007).
20. И. В. Заливако, И. А. Семериков, А. С. Борисенко, М. Д. Аксенов, К. Ю. Хабарова, Н. Н. Колачевский, Письма в ЖЭТФ **114**(2), 53 (2021).
21. V. M. Porozova, L. V. Gerasimov, I. B. Bobrov, S. S. Straupe, S. P. Kulik, and D. V. Kupriyanov, Phys. Rev. A **99**, 043406 (2019).
22. L. V. Gerasimov, R. R. Yusupov, I. B. Bobrov, D. Shchepanovich, E. V. Kovlakov, S. S. Straupe, S. P. Kulik, and D. V. Kupriyanov, Phys. Rev. A **103**, 062426 (2021).
23. И. Н. Москаленко, И. С. Беседин, И. А. Цицилин, Г. С. Мажорин, Н. Н. Абрамов, А. Григорьев, И. А. Родионов, А. А. Доброносорова, Д. О. Москалев, А. А. Пищимова, А. В. Устинов, Письма в ЖЭТФ **110**(8), 569 (2019).
24. А. М. Дюгаев, П. Д. Григорьев, Письма в ЖЭТФ **112**(2), 107 (2020).
25. А. Г. Кудрявцев, Письма в ЖЭТФ **111**(2), 112 (2020).