

2. ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ

УДК 538.91+94

Краткое сообщение

Метод имитации отжига в вариационных квантовых алгоритмах

Д.А. Алешин, Д.О. Голов, Ю.В. Чемарина, А.Н. Цирулев

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер. 35

tsirulev.an@tversu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.240

Аннотация: Вариационные квантовые алгоритмы являются единственными квантовыми алгоритмами, которые в настоящее время применяются на гибридных квантово-классических устройствах для решения практических, а не модельных задач физики конденсированного состояния, квантовой химии и машинного обучения. В работе детально изучен, реализован в кодах и протестирован новый вариационный квантовый алгоритм, отличительной чертой которого является использование алгоритма имитации отжига для минимизации целевой функции (энергии), а также новый тип унитарного анзаца с многокубитным взаимодействием. Квантовая часть алгоритма эмулирована на классическом компьютере, а оценка эффективности алгоритма проводится по числу итераций. Для тестирования алгоритма выбрана задача поиска основного состояния электронной структуры молекулы водорода при равновесном расстоянии между протонами. Гамильтониан в приближении Борна-Оппенгеймера моделируется гамильтонианом системы 4-х кубитов в базе Паули. Универсальный анзац для задачи построен с учетом симметрии гамильтониана в виде композиции экспонент от операторов Паули и зависит от 4-х параметров, а соответствующая энергия имеет двенадцать локальных минимумов. Алгоритм, реализованный в виде модульной программы в Python как в варианте прямой имитации отжига, так и с использованием функции dual-annealing библиотеки Sci-ru, показал высокую эффективность в сравнении с алгоритмом на основе стандартного анзаца и метода градиентного спуска.

Ключевые слова: вариационный квантовый алгоритм, алгоритм имитации отжига, оптимизация, унитарный анзац, базис Паули, гамильтониан, основное состояние.

Алешин Дмитрий Алексеевич – магистрант 2 года обучения кафедры общей математики и математической физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Голов Дмитрий Олегович – аспирант кафедры общей математики и математической физики, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», второй курс

Чемарина Юлия Владимировна – к.ф.-м.н., декан математического факультета, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Цирулев Александр Николаевич – д.ф.-м.н., профессор кафедры общей математики и математической физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Short Communication

Simulated annealing method in variational quantum algorithms

D.A. Aleshin, D.O. Golov, Ju.V. Tchamarina, A.N. Tsirulev

Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.240

Abstract: Variational quantum algorithms are the only quantum algorithms that are currently used in hybrid quantum-classical devices to solve rather practical than modelling problems in condensed matter physics, quantum chemistry, and machine learning. In this paper, a new variational quantum algorithm is analysed in detail, implemented in codes and tested. Its distinctive feature is the use of the simulated annealing algorithm to minimize the objective function (energy) as well as a new type of unitary ansatz with multi-qubit interaction. The quantum part of the algorithm is emulated on a classical computer, and the efficiency of the algorithm is estimated by the number of iterations. To test the algorithm, we choose the problem of finding the ground state of the electronic structure of the

hydrogen molecule at the equilibrium distance between protons. The Hamiltonian in the Born-Oppenheimer approximation is modeled by the Hamiltonian of a 4-qubit system in the Pauli basis. The universal ansatz for the problem is constructed taking into account the symmetry of the Hamiltonian as a composition of the exponentials of Pauli operators. It depends on 4 parameters, and the corresponding energy has twelve local minima. The algorithm, implemented as a modular program in Python using both the direct annealing method and the dual_annealing function of the Sci-py library, showed high efficiency in comparison with the algorithm based on the standard ansatz and the gradient descent method.

Keywords: variational quantum algorithm, simulated annealing algorithm, optimization, unitary ansatz, Pauli basis, Hamiltonian, ground state.

Dmitry A. Aleshin – 2nd year graduate student, General Mathematics and Mathematical Physics Department, Tver State University

Dmitriy O. Golov – 2nd year postgraduate student, General Mathematics and Mathematical Physics Department, Tver State University, ORCID: 0009-0003-8066-5618

Julia V. Tchegarina – Ph. D., Dean of Faculty of Mathematics, Tver State University, ORCID: 0000-0002-9002-887X

Alexander N. Tsirulev – Dr. Sc., Professor, Department of General Mathematics and Mathematical Physics, Tver State University, ORCID: 0000-0003-4168-3613

Поступила в редакцию/received: 01.07.2025; после рецензирования/reviced: 30.08.2025; принята/accepted 02.09.2025.

1. Введение

Вариационными квантовыми алгоритмами называют семейство гибридных квантово-классических алгоритмов для решения квантовых задач оптимизации [1-3] посредством квантовых вычислений. Важной задачей, определившей их развитие, является поиск основного состояния гамильтониана, что эквивалентно задаче минимизации средней энергии в пространстве состояний. Ключевым шагом в вариационных квантовых алгоритмах является моделирование реальной квантовой системы посредством искусственной системы кубитов [4-6] и подходящего гамильтониана, простых с технической точки зрения. Но даже для таких моделей сложность алгоритмов прямого вычисления собственных значений растет экспоненциально с ростом числа кубитов, поэтому для больших систем используют вариационные методы оптимизации.

Математическая постановка квантовой вариационной задачи включает [2] гильбертово пространство \mathcal{H}_n квантовой системы, состоящей из n кубитов, подмножество $S \subset \mathcal{H}_n$ нормированных векторов состояния, алгебру операторов $L(\mathcal{H}_n)$, гамильтониан системы $\hat{H} \in L(\mathcal{H}_n)$, целевую функцию (энергию) $E = \langle u | \hat{H} | u \rangle$, а также собственно задачу оптимизации:

$$E(|u\rangle) \xrightarrow{|u\rangle \in S} \min. \quad (1)$$

Другими словами, в задаче (1) требуется найти вектор состояния, на котором энергия принимает минимальное значение. Вариационный тип задачи заключается в приготовлении состояния $|u\rangle$ некоторым унитарным преобразованием – анзацем, который зависит от набора параметров.

Приготовление состояния и вычисление энергии относятся к квантовой части задачи (в работе этот этап эмулируется на компьютере), а варьирование параметров – к классической оптимизации. Градиентные методы оптимизации, применяемые в вариационных квантовых алгоритмах в качестве стандарта, плохо подходят для целевых функций, имеющих большое число локальных минимумов. На практике решение такой задачи требует эффективных классических методов оптимизации, устойчивых к наличию большого числа локальных минимумов и не требующих вычисления производных целевой функции. Среди таких методов особое место занимает метод имитации отжига [7-9], который широко используется в задачах глобальной оптимизации и хорошо адаптируется к вариационным квантовым схемам.

В данной работе предлагается сочетание анзаца нового типа для подготовки состояния и метода имитации отжига для оптимизации энергии. Общая схема применения метода Монте-Карло в варианте случайного выбора однокубитных операторов Паули, с равномерным распределением по мере Хаара на группе $SU(2)$, подробно рассмотрена в работе [10]. Такая схема соответствует универсальному анзацу, однако, как показывают численные эксперименты, оказывается малоэффективной для гамильтонианов с высокой симметрией. Во втором разделе подробно описывается вариационный квантовый алгоритм с оптимизацией методом имитации отжига. В третьем разделе рассмотрен модельный гамильтониан молекулы водорода и результаты тестирования алгоритма. В заключении обсуждаются перспективы обобщения алгоритма.

Для определенности в работе применяется атомная система единиц Хартри, в которой постоянная Планка, заряд электрона и его масса равны единице: $\hbar = e = m_e = 1$. Тогда все величины, включая коэффициенты гамильтониана, безразмерны.

2. Вариационные квантовые алгоритмы и имитация отжига

Вариационный квантовый алгоритм реализуется квантовой схемой, показанной на рис.1. Параметрически управляемое квантовое устройство, обычно представленное квантовой цепью, содержащей квантовые вентили со свободными параметрами, реализует унитарное преобразование (анзац) стандартного начального состояния или, в другом варианте, предыдущего полученного состояния. На каждом шаге регулирующие параметры подбираются так, чтобы минимизировать целевую функцию, которую будем называть энергией состояния. В квантовом варианте следующее действие выполняется путём измерения энергии полученного состояния. Результаты последовательных измерений определяются соответствующим постулатом квантовой механики, но сам процесс измерения включает

классический прибор, математически представленный гамильтонианом системы; таким образом, эта часть является смешанной, т.е. квантово-классической. Наконец, последняя составляющая вариационной схемы изменяет параметры анзаца для минимизации энергии (1) и полностью реализуется на классическом вычислительном устройстве.

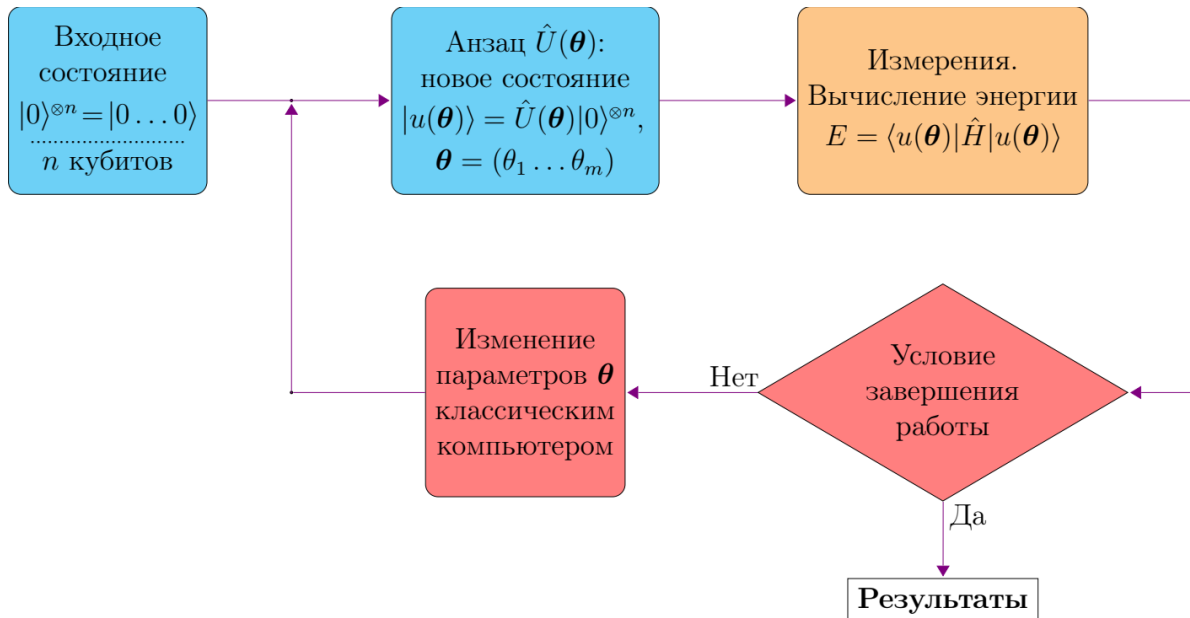


Рис. 1. Общая схема вариационных квантовых алгоритмов. На схеме два первых блока сверху (выделены синим цветом) представляют чисто квантовую часть алгоритма. Третий блок сверху – смешанная, т.е. квантово-классическая составляющая (выделена желтым цветом), тогда как два (малиновых) блока снизу относятся к действиям, выполняемым на классическом компьютере.

Практическое значение эмуляции квантовой части алгоритма на классическом компьютере заключается в возможности подобрать анзац и наиболее подходящий алгоритм оптимизации для конкретного класса задач, поскольку при этом отпадает необходимость достаточно трудоемкой аппаратной реализации анзацев различных типов в виде квантовых цепей. Обе части вариационного алгоритма независимы друг от друга, поэтому проверку эффективности и выбранного анзаца, и алгоритма оптимизации можно проводить независимо по числу необходимых итераций для каждой части алгоритма при фиксированной второй. Разумеется, такой подход возможен, в основном, для тестовых задач, в которых квантовое ускорение не играет определяющей роли, т.е. классических ресурсов достаточно для эмуляции трех верхних блоков на рис. 1.

Метод имитации отжига, изучаемый в данной работе в контексте вариационных квантовых алгоритмов, в самом общем случае включает следующие данные: (1) конфигурационное пространство C ; (2) энергия (целевая функция) $E: C \rightarrow \mathbb{R}$; (3) семейство $Rnd = \{R_s\}$ отображений

$R_s: C \rightarrow C$; начальная температура T , минимальная температура T_{min} , а также закон ее понижения $T_k \rightarrow T_{k+1} = F(T_k, k)$, где k – номер шага процесса отжига. В системе n кубитов мы имеем дело с множеством нормированных векторов состояния, которые возникают в квантовой части вариационного алгоритма в результате применения параметризованного анзаца к начальному состоянию, т.е. $|u(\theta)\rangle = \hat{U}(\theta)|0\dots 0\rangle$, где $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m) \in C = [0, 2\pi]^m$, а энергия определяется как в задаче (1): $E(\theta) = \langle u(\theta) | \hat{H} | u(\theta) \rangle$. Таким образом, в нашем случае конфигурационное пространство C – это пространство параметров (m -мерный куб).

Формулировка предлагаемого алгоритма (в простейшем варианте с равномерным понижением температуры) на уровне псевдокода выглядит следующим образом.

1. Вводим начальный вектор $\theta \in C$, минимальную температуру T_{min} , текущую температуру $T > T_{min}$ и значение $\tau \in (0.5, 1)$ для понижения T .

2. Генерируем состояние $|u(\theta)\rangle$ и вычисляем энергию $E(\theta)$.

3. Генерируем случайные векторы $\delta\theta \in C$, $\theta_1 = \theta + \delta\theta \pmod{2\pi}$ и новое состояние $|u(\theta_1)\rangle$. Вычисляем энергию $E(\theta_1)$.

4. Если $E(\theta_1) \leq E(\theta)$, то полагаем $\theta = \theta_1$. Иначе выбираем значение $\varepsilon \in (0, 1)$ равномерно распределенной случайной величины (с помощью генератора псевдослучайных чисел), и если $\varepsilon < \exp\{[E(\theta) - E(\theta_1)]/T\}$, то полагаем $\theta = \theta_1$.

5. Понижаем температуру: $T \rightarrow T \cdot \tau$. Если $T > T_{min}$, то переходим к шагу 2. В противном случае выходим из цикла с результатом $|u(\theta)\rangle$, $E(\theta)$.

Отметим, что шаг 4, основанный на распределении Больцмана, позволят избежать попадания в локальный минимум. Алгоритм имитации отжига является полностью эвристическим, причем экспериментально проверено, что при отказе от случайности в выборе $\delta\theta$ и ε алгоритм становится неэффективным. В нашей реализации алгоритма выбор $\delta\theta$ происходит по простейшей схеме: выбирается m значений $\varepsilon_i \in [0, 1]$, случайной величины, распределенной равномерно на данном отрезке, а затем формируется случайный вектор:

$$\delta\theta = (\delta\theta_1, \dots, \delta\theta_m) \in C, \quad \delta\theta_i = 2\pi\varepsilon_i. \quad (2)$$

Простейшим и универсальным условием завершения работы является отсутствие понижения энергии в течение заданного числа циклов.

3. Молекула водорода

Задача об уровнях энергии молекулы водорода является тестовой практически для всех методов расчета спектров в квантовой химии по

двум причинам. Во-первых, с точки зрения прямого численного решения уравнения Шредингера эта задача уже не является тривиальной как в отношении сложности алгоритмов, так и в отношении необходимых вычислительных ресурсов. Во-вторых, точность расчетов всегда можно непосредственно оценить по данным высокоточных спектроскопических измерений. Для применения квантовых вариационных алгоритмов к задачам такого рода необходим подготовительный этап, который состоит в применении формализма вторичного квантования к гамильтониану задачи в приближении Борна-Оппенгеймера. Тогда взаимодействие электронов друг с другом и протонами выражается посредством операторов рождения и уничтожения в гамильтониане вида:

$$\hat{H} = \sum_{i,j} g_{ij} a_i^+ a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} h_{ijkl} a_i^+ a_j^+ a_k a_l, \quad (3)$$

где коэффициенты g_{ij} и h_{ijkl} – одно- и двухэлектронные интегралы [11], т.е. суммы средних значений одно- и двухэлектронных частей исходного гамильтониана на $1s$ спин-орбиталях. Затем применение преобразования Йордана-Вигнера к операторам a_k^+ и a_k переводит гамильтониан (3) в гамильтониан системы n кубитов, где n – число спин-орбиталей. Для молекулы водорода с равновесным расстоянием между протонами ($\approx 0,7 \text{ \AA}$) такой гамильтониан получен, например, в работах [12,13] и имеет вид:

$$\hat{H} = -0,042\hat{\sigma}_{0000} + 0,178(\hat{\sigma}_{3000} + \hat{\sigma}_{0300}) - 0,243(\hat{\sigma}_{0030} + \hat{\sigma}_{0003}) + 0,171\hat{\sigma}_{3300} + 0,176\hat{\sigma}_{0033} + \quad (4)$$

$$+ 0,123(\hat{\sigma}_{3030} + \hat{\sigma}_{0303}) + 0,168(\hat{\sigma}_{3003} + \hat{\sigma}_{0330}) + 0,045(\hat{\sigma}_{2112} - \hat{\sigma}_{2211} - \hat{\sigma}_{1122} + \hat{\sigma}_{1221}).$$

Гамильтониан выражен через 4-х-кубитные операторы Паули [14, 15], а коэффициенты выражены в единицах Хартри: $1 \text{ Ha} \approx 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг}$.

Стандартный анзац состоит из композиции однокубитных вращений и запутывающих двухкубитных операторов [16,17]. При этом число слоев квантовой цепи оказывается достаточно большим, что снижает точность вычислений. Мы изучаем анзац, построенный из композиции экспонент от n -кубитных операторов Паули, в которых $k \leq n$ операторов отличны от $\hat{\sigma}_0$. Предполагается, что такие вентили будут разработаны в ближайшем будущем; для $k = 2, 3$ они доступны в настоящее время. Гамильтониан (4) инвариантен при перестановках кубитов $abcd \rightarrow badc$ и $abcd \rightarrow cdab$, а кроме того, операторы $\hat{\sigma}_2$ входят в 4-кубитные операторы Паули только парами, поэтому коэффициенты в разложении собственного вектора основного состояния по стандартному базису вещественны и он имеет вид

$$|u_{min}\rangle = p|0011\rangle + q|0110\rangle + r|1001\rangle + s|1100\rangle. \quad (5)$$

Учитывая сказанное, можно построить универсальный 4-параметрический анзац для поиска основного состояния молекулы водорода в виде:

$$\hat{U}(\theta) = \exp(i\theta_4 \hat{\sigma}_{1211}) \exp(i\theta_3 \hat{\sigma}_{1112}) \exp(i\theta_2 \hat{\sigma}_{1200}) \exp(i\theta_1 \hat{\sigma}_{0021}). \quad (6)$$

В показателе экспонент оператор $\hat{\sigma}_2$ входит один раз, что и обеспечивает вещественность коэффициентов в разложении (5). Учитывая равенства $\hat{\sigma}_2 |0\rangle = i|1\rangle$, $\hat{\sigma}_2 |1\rangle = -i|0\rangle$ и используя метод вычислений операторных экспонент из [17], находим, например, что $\exp(i\theta_3 \hat{\sigma}_{1112}) = \cos \theta_3 \hat{\sigma}_{0000} + i \sin \theta_3 \hat{\sigma}_{1112}$ и $\exp(i\theta_3 \hat{\sigma}_{1112}) |0011\rangle = \cos \theta_3 |0011\rangle + \sin \theta_3 |1100\rangle$. Произвольный выбор знаков для p, q, r, s в разложении (5) можно обеспечить только выбором знаков у $\cos \theta_k$ и $\sin \theta_k$, $k=1, 2, 3, 4$, поэтому нет необходимости использовать оператор $\hat{\sigma}_3$.

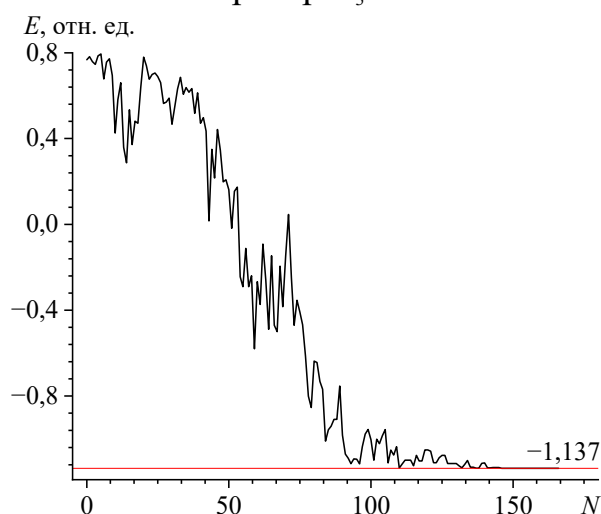


Рис. 2. Значения энергии в алгоритме отжига из раздела 2. N – номер итерации.

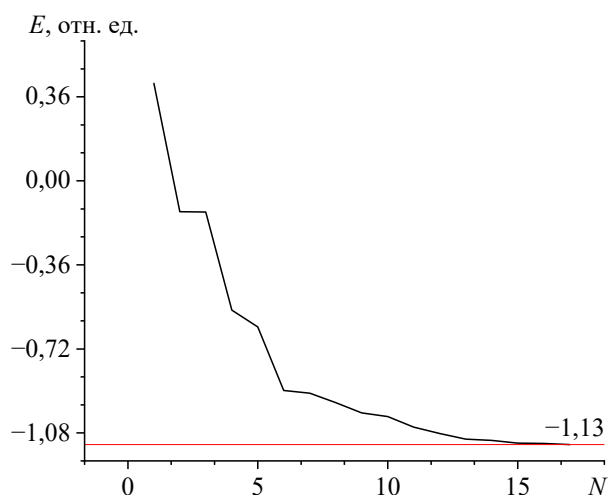


Рис. 3. Отжиг с адаптивным понижением температуры из библиотеки Sci-Py.

Алгоритм раздела 2 реализован как набор модулей в Python [18,19]. Тестирование алгоритма для гамильтониана (4) и анзаца (6) показывает, что задача поиска основного состояния, $\hat{H} |u_{min}\rangle = E_{min} \hat{H} |u_{min}\rangle$, для молекулы водорода уверенно решается с химической точностью в среднем за сто сорок итераций при случайном выборе начальных значений параметров и с

эмуляцией квантового шума. Процесс и результат вычислений:

$$E_{min} = -1.136, \quad |u_{min}\rangle = 0.995|0011\rangle - 0.105|1100\rangle,$$

показан на рис. 2 и соответствует экспериментальным данным. Явные вычисления в системе Maple энергии $E(\theta) = \langle 0000 | \hat{U}^+(\theta) \hat{H} \hat{U}(\theta) | 0000 \rangle$ и ее экстремумов показывает, что $E(\theta)$ имеет двенадцать локальных минимумов, т.е. результат оптимизации методом градиентного спуска зависит от выбора начальных значений параметров; в сочетании с методом случайного поиска градиентные методы требуют для гамильтониана (4) (но с другим анзацем) не менее двухсот итераций [12, 13].

Поиск минимума $E(\theta)$ с применением функции `dual_annealing` из библиотеки Sci-ru показан на рис. 3. Функция реализует метод имитации отжига с адаптивным понижением температуры, но в процессе вычислений возвращает только значения энергии, полученные посредством нескольких итераций и не превышающие предыдущих значений. На рис. 3 $N = 17$, но грубая оценка полного числа итераций дает по меньшей мере пятикратно большее значение. Кроме того, в функции `dual_annealing` каждая итерация требует существенно больше вычислительных действий, поэтому эффективность этой функции по времени вычислений сравнима с прямой реализацией метода имитации отжига.

5. Заключение

В работе предложен и протестирован вариационный квантовый алгоритм, отличающийся применением метода имитации отжига для оптимизации целевой функции и специальным выбором анзаца, который требует меньшей глубины квантовой цепи по сравнению со стандартным анзацем и, следовательно, обладает меньшей вероятностью возникновения ошибки и большим временем когерентности состояния. Использование алгоритма для поиска основного состояния молекулы H_2 показывает его высокую эффективность для задач с большим числом локальных минимумов целевой функции. Для ряда конкретных задач прямой метод имитации отжига, используемый в работе, может быть модифицирован в процессе численных экспериментов как применением адаптивного выбора вариации параметров (2), так и законом понижения температуры.

Библиографический список:

1. **Peruzzo, A.** A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor / A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt et al // Nature Communications. – 2014. – V. 5. – Art. № 4213. – 10 p. DOI: 10.1038/ncomms5213.
2. **Tilly, J.** The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices / J. Tilly, H. Chen, S. Cao et al // Physics Reports. – 2022. – V. 986. – P. 1-128. DOI: 10.1016/j.physrep.2022.08.003
3. **Ryabinkin, I.G.** Qubit coupled cluster method: a systematic approach to quantum chemistry on a quantum computer / I.G. Ryabinkin, R.A. Lang, S.N. Genin et al // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2018. – V. 14. – I. 12. – P. 6317-6326. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00932.

4. **McClean, J.R.** The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms / J.R. McClean, J. Romero, R. Babbush, A. Aspuru-Guzik // *New Journal of Physics*. – 2016. – V. 18. – Art. № 023023. – 23 p. DOI: 10.1088/1367-2630/18/2/023023.
5. **Китаев, А.** Классические и квантовые вычисления / А. Китаев, А. Шень, Ю. Вялый. – М: МЦМНО, 1999. – 193 с.
6. **Chitambar E.** Quantum resource theories / E. Chitambar, G. Gour // *Review Modern Physics*. – 2019. – V. 91. – I. 2. – Art. № 025001. – 48 p. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.
7. **Ingberg, L.** Simulated annealing: practice versus theory / L. Ingberg // *Mathematical and Computer Modelling*. – 1993. – V. 18. – № 11. – P. 29-57.
8. **Salamon, P.** Facts, conjectures, and improvements for simulated annealing / P. Salamon, P. Sibani, R. Frost // *SIAM Monographs on Mathematical Modeling and Computation*. Series № 7. – Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002. – 165 p.
9. **Лопатин, А.А.** Метод отжига / А.А. Лопатин. – Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный университет, 2005. – 57 с. Режим доступа: www.url:https://math.spbu.ru/user/gran/sb1/lopatin.pdf. – 01.07.2025.
10. **Голов, Д.О.** Вариационный квантовый алгоритм для малоразмерных систем в базисе Паули / Д.О. Голов, Н.А. Петров, А.Н. Цирулев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2024. – Вып. 16. – С. 343-350. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.343.
11. **Szabo, A.** Modern quantum chemistry: Introduction to advanced electronic structure theory / A. Szabo, N.S. Ostlund. – New York: Dover Publication, 1996. – 481 p.
12. **Du, Y.** Quantum circuit architecture search for variational quantum algorithms / Y. Du, T. Huang, S. You et al. // *npj Quantum Information*. – 2022. – V. 8. – Art. № 62. – 8 p. DOI: 10.1038/s41534-022-00570-y.
13. **Du, Y.** Supplementary information for: «Quantum circuit architecture search for variational quantum algorithms» / Y. Du, T. Huang, S. You et al. // *npj Quantum Information*. – 2022. – V. 8. – Art. № 62. – 14 p. – Режим доступа: www.url:https://static-content.springer.com/esm/art%3A10.1038%2Fs41534-022-00570-y/MediaObjects/41534_2022_570_MOESM1_ESM.pdf. – 01.07.2025.
14. **Tsirulev, A.N.** A geometric view on quantum tensor networks / A.N. Tsirulev // *European Physical Journal*. – 2020. – V. 226. – I. 4. – Art. № 02022. – 5 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.
15. **Nikonov, V.V.** Pauli basis formalism in quantum computations / V.V. Nikonov, A.N. Tsirulev // *Mathematical Modelling and Geometry*. – 2020. – V. 8. – № 3. – P. 1-14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.
16. **Taube, A.G.** New perspectives on unitary coupled-cluster theory / A.G. Taube, R.J. Bartlett // *International Journal of Quantum Chemistry*. – 2006. – Vol. 106. – I. 15. – P. 3393-3401. DOI: 10.1002/qua.21198.
17. **Андре, Э.** Моделирование запутанных состояний в кластерах кубитов / Э. Андре, А.Н. Цирулев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2022. – Вып. 14. – С. 342-351. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342.
18. **Annealing Method Python.** – Режим доступа: www.url:https://github.com/KoTuK2306/masters_thesis/tree/master/AnnealingMethodPython. – 01.07.2025.
19. **R3DDG / Variational Quantum Eigensolver - with - Annealing - optimization.** – Режим доступа: www.url:https://github.com/R3DDG/VariationalQuantumEigensolver-with-Annealing-optimization. – 01.07.2025.

References:

1. Peruzzo A., McClean J., Shadbolt P. et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature Communications*, 2014, vol. 5, art. no. 4213, 10 p. DOI: 10.1038/ncomms5213.
2. Tilly J., Chen H, Cao S. et al. The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices, *Physics Reports*, 2022, vol. 986, pp. 1-128. DOI: 10.1016/j.physrep.2022.08.003.
3. Ryabinkin I.G., Lang R.A., Genin S.N. et al. Qubit coupled cluster method: a systematic approach to quantum chemistry on a quantum computer, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2018, vol. 14, issue 12, pp. 6317-6326. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00932.
4. McClean J.R., Romero J., Babbush R., Aspuru-Guzik A. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New Journal of Physics*, 2016, vol. 18, art. no 023023, 23 p. DOI: 10.1088/1367-2630/18/2/023023.
5. Kitaev A.Y., Shen A.H., M. Vyalii M.N. *Classical and quantum computation*, Graduate studies in mathematics, vol. 47, trans. L.J. Senechal. Rhode Island, American Mathematical Society, 2002, 257 p.
6. Chitambar E., Gour G. Quantum resource theories, *Review of Modern Physics*, 2019, vol. 91, issue 2, art. no 025001, 48 p. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.
7. Ingberg L. Simulated Annealing: Practice versus Theory, *Mathematical and Computer Modelling*, 1993, vol. 18, no 11, pp. 29-57.
8. Salamon P., Sibani P., Frost R. Facts, Conjectures, and Improvements for Simulated Annealing, *SIAM*

Monographs on Mathematical Modeling and Computation, Series no. 7. Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002, 165 p.

9. Lopatin A.A. *Metod otzhiga* [The annealing method]. Saint Petersburg, Saint Petersburg State University Publ., 2005, 57 p. (In Russian). Available at: [www.url: https://math.spbu.ru/user/gran/sb1/lopatin.pdf](http://www.url:https://math.spbu.ru/user/gran/sb1/lopatin.pdf) (accessed 01.07.2025).

10. Golov D.O., Petrov N.A., Tsirulev A.N. Variatsionnyj kvantovyy algoritm dlya malorazmernykh sistem v bazise Pauli [Variational quantum algorithm for low-dimensional systems in the Pauli basis], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2024, issue 16, pp. 343-350. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.343 (In Russian).

11. Szabo A., Ostlund N.S. *Modern quantum chemistry: Introduction to advanced electronic structure theory*. New York, Dover Publication, 481 p.

12. Du Y., Huang T., You S. et al. Quantum circuit architecture search for variational quantum algorithms, *npj Quantum Information*, 2022, vol. 8, art. no 62, 8 p. DOI: 10.1038/s41534-022-00570-y.

13. Du Y., Huang T., You S. et al. Supplementary information for: «Quantum circuit architecture search for variational quantum algorithms», *npj Quantum Information*, 2022, vol. 8, art. no 62, 14 p. Available at: [www.url: https://static-content.springer.com/esm/art%3A10.1038%2Fs41534-022-00570-y/MediaObjects/41534_2022_570_MOESM1_ESM.pdf](http://www.url:https://static-content.springer.com/esm/art%3A10.1038%2Fs41534-022-00570-y/MediaObjects/41534_2022_570_MOESM1_ESM.pdf) (accessed 01.07.2025).

14. Tsirulev A.N. A geometric view on quantum tensor networks, *European Physical Journal*, 2020, vol. 226, issue 4, art. no. 02022, 5 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.

15. Nikonov V.V., Tsirulev A.N. Pauli basis formalism in quantum computations, *Mathematical Modelling and Geometry*, 2020, vol. 8, no 3, pp. 1–14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.

16. Taube A.G, Bartlett R.J. New perspectives on unitary coupled-cluster theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2006, vol. 106, issue 15, pp. 3393-3401. DOI: 10.1002/qua.21198.

17. Andre E., Tsirulev A.N. Modelirovanie zaputannykh sostoyanij v klasterakh kubitov [Modeling of entangled states in qubit clusters], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2022, issue 14, pp. 143-146. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342. (In Russian).

18. Annealing Method Python. Available at: [www.url: https://github.com/KoTuK2306/masters_thesis/tree/master/AnnealingMethodPython](http://www.url:https://github.com/KoTuK2306/masters_thesis/tree/master/AnnealingMethodPython) (accessed 01.07.2025).

19. R3DDG / Variational Quantum Eigensolver - with - Annealing - optimization. Available at: [www.url: https://github.com/R3DDG/VariationalQuantumEigensolver-with-Annealing-optimization](http://www.url:https://github.com/R3DDG/VariationalQuantumEigensolver-with-Annealing-optimization) (accessed 01.07.2025).