

CÁC THUẬT TOÁN LƯỢNG TỬ NGHIÊN CỨU KHOA HỌC VẬT LIỆU

Dụng Văn Lữ^{1*}, Đặng Đức Long², Nguyễn Trọng Bắc³, Nguyễn Quang San⁴

¹ Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Đà Nẵng

² Viện Nghiên cứu và Đào tạo Việt-Anh, Đại học Đà Nẵng

³ Viện Nghiên cứu Khoa học cơ bản & Ứng dụng, Đại học Duy Tân

⁴ Khoa Kỹ thuật và Công nghệ, Đại học Huế

*Email: dvlu@ued.udn.vn

Ngày nhận bài: 5/10/2024; ngày hoàn thành phản biện: 22/10/2024; ngày duyệt đăng: 01/11/2024

TÓM TẮT

Với khả năng tính toán đầy “uy quyền” so với máy tính cổ điển, tính toán lượng tử áp dụng tính chất cơ học lượng tử được nghiên cứu và ứng dụng rộng rãi để giải quyết các vấn đề phức tạp, trong đó có khoa học vật liệu và hoá học. Bài viết này cung cấp cái nhìn tổng quan về tính toán lượng tử và các thuật toán được áp dụng trong mô phỏng phân tử, khoa học vật liệu và hoá học. Các thuật toán bộ giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE), tối ưu hóa gần đúng lượng tử (QAOA) và ước tính pha lượng tử (QPE) được thảo luận chi tiết. Ngoài ra, chúng tôi đề cập những triển vọng trong tương lai của thuật toán lượng tử cũng như những thách thức và định hướng nghiên cứu.

Từ khóa: Bộ giải trị riêng lượng tử biến phân, thuật toán tối ưu hóa gần đúng lượng tử, thuật toán lượng tử, tính toán lượng tử, ước tính pha lượng tử.

1. MỞ ĐẦU

Trong bài phát biểu năm 1981 [1], Feynman đặt câu hỏi mở “Chúng ta sẽ sử dụng loại máy tính nào để mô phỏng vật lý?”,... “Liệu vật lý có thể được mô phỏng bằng một máy tính vạn năng không?”. Từ đó ông lập luận rằng thế giới vật lý là cơ học lượng tử, và do đó, vấn đề thích hợp là mô phỏng vật lý lượng tử và máy tính sẽ hoạt động theo cơ chế này [1]. Cũng vào những khoảng thời gian đó, Benioff đề xuất xây dựng một mô hình cơ học lượng tử vi mô của máy tính tương tự Turing có sử dụng trạng thái dừng mà thoả mãn phương trình Schrodinger [2]. Nhà toán học Manin cho rằng không gian trạng thái lượng tử có dung lượng rất lớn so với không gian cổ điển vì nó có thể tổ hợp từ các trạng thái cơ sở, nên mô hình toán học của nó đòi hỏi phải sử dụng các nguyên lý chồng chất lượng tử [3]. Trên những cảm hứng đó, tính toán lượng tử (*quantum*

computing) dần hình thành và phát triển nhanh chóng cả về lý thuyết và thực tiễn chế tạo máy tính lượng tử (MTLT). MTLT sử dụng tính chất cơ học lượng tử, nổi bật như chồng chất (*superposition*) và vướng víu (*entanglement*) lượng tử, để xử lý thông tin. Có nhiều loại cơ chế mà MTLT hoạt động, trong đó phải kể đến tính toán lượng tử tương tự (*analog*) [4,5], kỹ thuật số (*digital*) [4,6] hay đoạn nhiệt (*adiabatic*) [4,7]. Trong đó, tính toán lượng tử kỹ thuật số hoạt động trên các mạch lượng tử với các thuật toán lượng tử là phổ biến [4].

Những thuật toán lượng tử đầu tiên có thể kể đến là thuật toán (lượng tử) Deutsch-Jozsa [8], Bernstein Vazirani [9], Simon [10],... những thuật toán này chưa giải quyết bài toán thực tiễn nhưng là bước đầu chứng minh khả năng tính toán “uy quyền” của thuật toán lượng tử so với thuật toán cổ điển và cũng là nguồn cảm hứng cho các thuật toán có tính ứng dụng thực tiễn sau này. Trong đó đặc biệt là thuật toán (lượng tử) Shor [11] có khả năng phân tích hợp số lẻ thành các thừa số nguyên tố trong thời gian đa thức mà người ta có thể áp dụng để phá mã khóa RSA [12]. Thuật toán (lượng tử) Grover có khả năng tìm kiếm dữ liệu phi cấu trúc của N phần tử với độ phức tạp truy vấn $O(\sqrt{N})$ [13]. Tính toán lượng tử mang đầy tiềm năng và hứa hẹn cách mạng hóa các phương pháp tính toán trên nhiều lĩnh vực khác nhau như thiết kế thuốc, khoa học dữ liệu, năng lượng sạch, tài chính, phát triển hóa chất công nghiệp, truyền thông an toàn,... với các hệ dữ liệu lớn và phức tạp với tốc độ và hiệu quả chưa từng có. Đặc biệt trong lĩnh vực khoa học vật liệu và hóa học liên quan đến các nhiệm vụ tính toán chuyên sâu đòi hỏi nguồn lực và thời gian đáng kể mà máy tính cổ điển phải vật lộn với sự phức tạp của mô phỏng phân tử và thiết kế vật liệu.

Tiếp nối ý tưởng của Feynmann, một trong những người đầu tiên đề cập đến mô phỏng lượng tử là Lloyd, ông chỉ ra rằng nhiều hệ lượng tử có thể được "lập trình" để mô phỏng hành vi của bất kì hệ lượng tử nào có động lực được xác định bởi các tương tác cục bộ [14]. Kể từ đó, các chương trình mô phỏng lượng tử cùng với việc chế tạo máy tính lượng tử phát triển mạnh mẽ.

Gần đây, các chương trình mô phỏng lượng tử về khoa học vật liệu và hóa học có những bước tiến đáng kể. Trong công trình [4], Bauer và các cộng sự đã đánh giá các vấn đề liên quan đến hóa học và vật liệu hiện nay; những hạn chế của các phương pháp cổ điển đối với các vấn đề này; phân tích điểm mạnh, điểm yếu và điểm nghẽn của các ý tưởng hiện có về thuật toán lượng tử. Trong công bố gần nhất của Clinton và các cộng sự vào năm 2024 [15], họ đã phát triển một thuật toán lượng tử giúp giảm chi phí ước tính cho các mô phỏng vật liệu (nghiên cứu với SrVO_3) và chứng tỏ rằng mô phỏng thực tế các tính chất cụ thể có thể khả thi mà không nhất thiết phải yêu cầu MTLT có khả năng mở rộng hoàn toàn và chịu lỗi, cung cấp thiết kế thuật toán lượng tử kết hợp hiểu biết sâu hơn về vật liệu và các ứng dụng.

Trong bài viết này, chúng tôi đề xuất các thuật toán lượng tử được thiết kế riêng cho các ứng dụng khoa học vật liệu và hóa học. Chúng tôi bắt đầu với thông tin tổng quan ngắn gọn về các nguyên tắc cơ bản của tính toán lượng tử, bao gồm bit lượng tử (*qubit*), cổng lượng tử và phép đo lượng tử. Sau đó, chúng tôi khám phá các thuật toán lượng tử quan trọng mà có thể ứng dụng của chúng trong mô phỏng phân tử, khoa học vật liệu và hoá học, chẳng hạn như bộ giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE) [16], thuật toán tối ưu hóa gần đúng lượng tử (QAOA) [17] và ước tính pha lượng tử (QPE) [18]. Trong đó, QPE được thảo luận sâu hơn về các nguyên tắc và phân tích tính chất cơ học lượng tử. Hiểu những nguyên tắc cơ bản này là rất quan trọng để nắm bắt cách các thuật toán lượng tử hoạt động. Thông qua cuộc khám phá này, chúng tôi mong muốn làm nổi bật tiềm năng của thuật toán lượng tử trong việc áp dụng nghiên cứu vật liệu.

2. TÍNH TOÁN LƯỢNG TỬ

2.1. Bit lượng tử (*Quantum bit*)

Đơn vị thông tin trong tính toán lượng tử là bit lượng tử (*quantum bit*, viết tắt là *qubit*) được biểu diễn bằng các trạng thái lượng tử của hệ hai mức, như nguyên tử hydrogen có thể ở trạng thái cơ bản ứng với $|0\rangle$, trạng thái kích thích ứng với $|1\rangle$, hoặc trạng thái phân cực photon, hoặc trạng thái spin điện tử. Qubit của nguyên tử được điều khiển bằng cách sử dụng xung laser có cùng lượng năng lượng với độ lệch mức năng lượng giữa hai trạng thái [19]. Qubit là trạng thái lượng tử nên nó có thể tồn tại ở trạng thái chồng chất và vướng víu lượng tử mà bit cổ điển không có được.

Trong khi bit cổ điển chỉ có 2 trạng thái 0 hoặc 1. Còn trạng thái của một qubit được biểu diễn nhờ tính chồng chất lượng tử: $\psi = a|1\rangle + b|0\rangle$, trong đó các biên độ lượng tử a và b là các số phức tùy ý thỏa mãn điều kiện chuẩn hóa $|a|^2 + |b|^2 = 1$, đồng thời $|a|^2$ và $|b|^2$ cho ta xác suất để ψ ở trạng thái tương ứng $|1\rangle$ và $|0\rangle$. Nếu MTLT có n qubit thì trạng thái chung là chồng chất của 2^n trạng thái (tăng theo cấp số nhân) và được xác định bởi một hàm sóng với 2^n biên độ lượng tử. Điều này cho ta thấy, với một lượng qubit hạn chế, MTLT có thể lưu trữ và xử lý với thông tin đáng kể.

Tính vướng víu chỉ xảy ra đối với hệ lượng tử từ hai qubit trở lên. Khi một trạng thái lượng tử không thể tách rời thành các trạng thái độc lập thì gọi là vướng víu, khi đó, các qubit trở nên tương quan với nhau theo cách mà trạng thái của qubit này “phụ thuộc” vào trạng thái của qubit khác ngay cả khi chúng bị tách biệt về mặt vật lý. Tức là, một trạng thái $|\psi\rangle$ vướng víu sẽ không thể biểu diễn ở dạng: $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$, với $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ là qubit hai hệ con; và \otimes là tích tensor hai trạng thái. Ví dụ trạng thái vướng víu của hệ 3 qubit có thể là $|\text{GHZ}\rangle = (|000\rangle + |111\rangle)/\sqrt{2}$, hay $|\text{W}\rangle = (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{3}$.

Với các tính chất cơ học lượng tử này cho phép MTLT thực hiện các phép tính song song (lượng tử), đồng thời, dẫn đến khả năng xử lý tăng tốc theo cấp số nhân trong

một số trường hợp nhất định và có nhiều ứng dụng triển vọng trong mô phỏng và công nghệ lượng tử [4,14,15].

2.2. Cổng lượng tử (Quantum gate)

MTLT điều khiển qubit bằng cổng lượng tử, tương tự như cổng logic cổ điển nhưng hoạt động ở trạng thái lượng tử. Ví dụ về cổng lượng tử bao gồm cổng Pauli-X (tương đương với cổng NOT cổ điển), cổng Hadamard (tạo ra sự chồng chất đều) và cổng CNOT (tạo ra sự vướng víu), các cổng biến đổi pha. Ở đây, cổng Hadamard và cổng CNOT thể hiện tính chất lượng tử chỉ có trong thuật toán lượng tử mà không có sự tương tự cổng logic cổ điển. Bằng cách kết hợp các cổng lượng tử với nhau bằng các dây lượng tử tạo thành mạch lượng tử (*quantum circuit*) thể hiện quy trình làm việc của thuật toán. Cấu trúc thực tế của một mạch lượng tử, số lượng và loại cổng, cũng như sơ đồ kết nối được quyết định bởi phép biến đổi đơn nguyên. Phép biến đổi này cho ta tính thuận nghịch để tái sử dụng tài nguyên, mà trong cổ điển không có được.

2.3. Phép đo lượng tử (Quantum measurement)

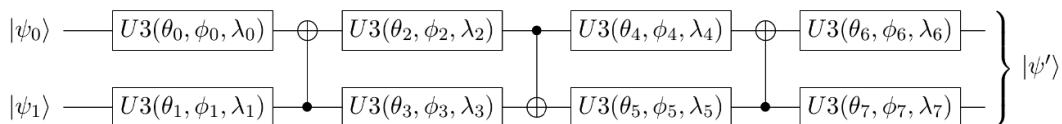
Phép đo làm trạng thái chồng chất sụp đổ (*collapse*) thành trạng thái thành phần và kết quả nhận được là xác suất (chứ không phải một giá trị các định). Ví dụ nếu ta dùng trạng thái $|1\rangle$ để thực hiện phép đo trạng thái $|\psi\rangle = \sqrt{3}/2 |0\rangle + 1/2 |1\rangle$ thì ta thu được kết quả: $|\langle 1|\psi\rangle|^2 = 0,25$, nghĩa là hàm $|\psi\rangle$ sẽ sụp đổ thành trạng thái $|1\rangle$ với xác suất phép đo là 25%. Tương tự như vậy, xác suất đo $|\psi\rangle$ ở trạng thái $|0\rangle$ là 75%.

3. CÁC THUẬT TOÁN MÔ PHỎNG KHOA HỌC VẬT LIỆU VÀ HOÁ HỌC

Phần này phân tích ba thuật toán phổ biến dùng trong mô phỏng khoa học vật liệu và hoá học, trong đó, QPE được phân tích kĩ hơn để làm nổi bật tính lượng tử.

3.1. Bộ giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE)

Bộ giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE) được đề xuất lần đầu bởi Peruzzo và các cộng sự [16], sau đó được mở rộng bởi McClean và các cộng sự [20], nó biểu diễn hàm sóng phân tử dưới dạng mạch lượng tử được tham số hóa, VQE có thể ước tính một cách hiệu quả năng lượng trạng thái cơ bản của phân tử. Khả năng này là vô cùng hữu ích đối với các nhiệm vụ như mô phỏng động lực phân tử và dự đoán các tính chất phân tử, bao gồm năng lượng liên kết và tốc độ phản ứng [4,15].



Hình 1. Một đoạn mạch lượng tử VQE tìm năng lượng cực tiểu.

Hình 1 minh họa các bước cấp cao trong thuật toán VQE. Mạch $U_3(\theta, \phi, \lambda)$ chứa các tham số biến phân để điều khiển tập hợp con các trạng thái có thể được tạo ra, trong đó số lượng tham số được chọn để thuật toán đủ mạnh nhằm tính toán trạng thái cơ bản của hệ, nhưng không quá lớn để làm tăng chi phí tính toán của bước tối ưu hóa. Bằng cách chạy mạch nhiều lần và liên tục cập nhật các tham số để tìm giá trị cực tiểu toàn cục của giá trị kỳ vọng mong muốn.

3.2. Thuật toán tối ưu hóa gần đúng lượng tử (QAOA)

Thuật toán tối ưu hóa gần đúng lượng tử (QAOA) [17] tạo ra các giải pháp gần đúng cho các bài toán tối ưu hóa tổ hợp, được dùng phổ biến trong khoa học vật liệu cho các bài toán như phân tích cấu trúc phân tử và dự đoán đặc tính vật liệu [4,15]. QAOA hoạt động bằng cách mã hóa vấn đề tối ưu hóa thành Hamiltonian, sau đó được triển khai dưới dạng mạch lượng tử. Mạch lượng tử QAOA được thể hiện trên hình 2 và được tiến trình theo các bước sau:

Bước 1: Xác định hàm Hamiltonian chi phí H_C sao cho trạng thái cơ bản của nó mã hóa giải pháp cho bài toán tối ưu hóa.

Bước 2: Xác định một Hamiltonian trộn H_M

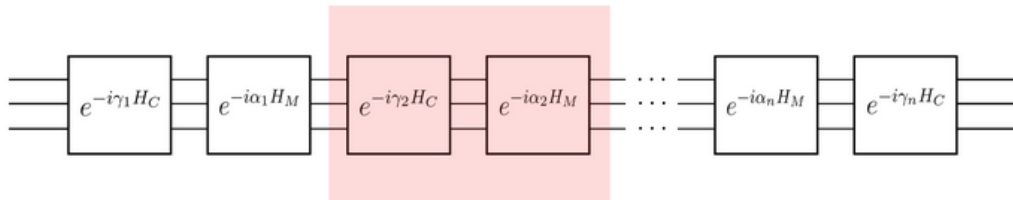
Bước 3: Xác định hộp đen (oracle) $U_C(\gamma) = \exp(-i\gamma H_C)$ và $U_M(\alpha) = \exp(-i\alpha H_M)$ với các tham số γ và α .

Bước 4: Áp dụng lặp lại các oracle U_C và U_M , theo thứ tự:

$$U(\gamma, \alpha) = \prod_{i=1}^N U_C(\gamma_i) U_M(\alpha_i)$$

Bước 5: Chuẩn bị một trạng thái ban đầu, tức là sự chồng chập của tất cả các trạng thái có thể và áp dụng $U(\gamma, \alpha)$ cho trạng thái đó.

Bước 6: Sử dụng các phương pháp cổ điển để tối ưu hóa các tham số γ, α và đo trạng thái đầu ra của mạch được tối ưu hóa để có được giải pháp tối ưu gần đúng cho Hamiltonian chi phí. Giải pháp tối ưu sẽ là giải pháp tối đa hóa giá trị kỳ vọng của Hamiltonian chi phí H_C .

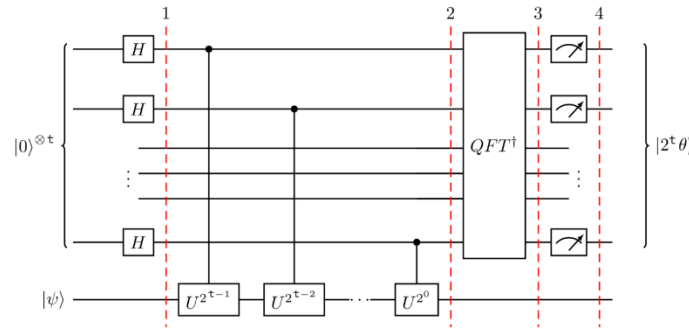


Hình 2. Mạch lượng tử QAOA

Bằng cách áp dụng lặp lại mạch QAOA và điều chỉnh các tham số của nó, thuật toán sẽ hội tụ hướng tới giải pháp tối ưu và tìm nghiệm cực tiểu ở trạng thái cơ bản.

3.3. Ước tính pha lượng tử (QPE)

Ước tính pha lượng tử (QPE) được Alexei Kitaev giới thiệu vào năm 1995 [18], là một thuật toán lượng tử cơ bản được sử dụng để ước tính giá trị riêng của một toán tử đơn nguyên. Trong khoa học vật liệu và hóa học, QPE có thể được áp dụng để tính toán các tính chất phân tử bắt nguồn từ giá trị riêng của Hamiltonian phân tử, chẳng hạn như thế ion hóa và ái lực điện tử. Bằng cách tận dụng QPE, ta có thể hiểu rõ hơn về cấu trúc điện tử của phân tử và vật liệu, dẫn đến những tiến bộ trong các lĩnh vực như xúc tác và thiết kế vật liệu [4,15].



Hình 3. Mạch lượng tử ước tính pha lượng tử (QPE).

Hình 3 mô tả mạch lượng tử QPE với toán tử đơn nguyên U . Nó ước tính pha θ trong $U|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle$; trong đó, $|\psi\rangle$ là vector riêng, $e^{2\pi i\theta}$ là trị riêng tương ứng. Mạch gồm $(t+1)$ thanh ghi và hoạt động theo các bước sau:

Bước 1: Thiết lập trạng thái đầu vào: thanh ghi đầu tiên được thiết lập từ trạng thái qubit $|0\rangle$, trạng thái mà năng lượng thấp nhất của hệ. Đây là điểm đặc biệt đối với tất cả các mạch lượng tử. Thanh ghi thứ hai $|\psi\rangle$, còn gọi là thanh ghi phụ (hỗ trợ quá trình tính toán). Như vậy, trạng thái thiết lập đầu vào là:

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes t}|\psi\rangle$$

Bước 2: Tạo các trạng thái chồng chất đều: Áp dụng t cổng Hadamard, mỗi cổng tác dụng lên một qubit đơn và tạo ra trạng thái chồng chất đều. Sau bước này, trạng thái mới của hệ:

$$|\psi_1\rangle = H^{\otimes t}|\psi_0\rangle = \frac{1}{2^{t/2}}(|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes t}|\psi\rangle = \frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} |k\rangle|\psi\rangle$$

trong đó, k là biểu diễn số nguyên của chuỗi số nhị phân t -qubit.

Bước 3: Toán tử đơn nguyên bị điều khiển: toán tử đơn nguyên $U = e^{2\pi i\theta}$ có tác dụng làm quay góc (đổi pha) θ :

$$U|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle; U^{2^t}|\psi\rangle = U^{2^t-1}U|\psi\rangle = U^{2^t-1}e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle = \dots = e^{2\pi i\theta 2^t}|\psi\rangle$$

Toán tử biến đổi pha đơn nguyên bị điều khiển CU làm quay pha trạng thái trên thanh ghi đích chỉ khi qubit điều khiển là $|1\rangle$, (đây là điều đặc biệt trong mạch lượng tử):

$$U(|0\rangle + |1\rangle)|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |\psi\rangle + |1\rangle \otimes e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle = (|0\rangle + e^{2\pi i\theta}|1\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

Sau khi áp dụng tất cả 2^t toán tử đơn nguyên điều khiển CU^{2^t} :

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= \frac{1}{2^{t/2}} (|0\rangle + e^{2\pi i\theta(2^{t-1})}|1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i\theta 2^1}|1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i\theta 2^0}|1\rangle) \otimes |\psi\rangle \\ &= \frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} e^{2\pi i\theta k} |k\rangle \otimes |\psi\rangle \end{aligned}$$

Bước 4: Biến đổi Fourier ngược: Lưu ý rằng biểu thức trên chính xác là kết quả của việc áp dụng một phép biến đổi Fourier lượng tử:

$$QFT|x\rangle = \frac{1}{2^{t/2}} \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2}x}|1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^2}x} \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^{t-1}}x} \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^t}x}|1\rangle \right)$$

Bằng cách thay thế x bởi $2^t\theta$ trong trạng thái $|\psi_2\rangle$ ở bước 3. Do đó, để phục hồi trạng thái $|2^t\theta\rangle$, ta áp dụng biến đổi Fourier (QFT) ngược trên thanh ghi phụ:

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{2^{t/2}} \sum_{k=0}^{2^t-1} e^{2\pi i\theta k} |k\rangle \otimes |\psi\rangle \xrightarrow{QFT_n^{-1}} \frac{1}{2^t} \sum_{x=0}^{2^t-1} \sum_{k=0}^{2^t-1} e^{-\frac{2\pi ik}{2^t}(x-2^t\theta)} |x\rangle \otimes |\psi\rangle$$

Bước 5: Thực hiện phép đo: Biểu thức trên đạt đỉnh gần $x = 2^t\theta$. Đối với trường hợp khi $2^t\theta$ là một số nguyên, phép đo trong cơ sở tính toán cho kết quả pha trong thanh ghi phụ với xác suất cao:

$$|\psi_4\rangle = |2^t\theta\rangle \otimes |\psi\rangle$$

Đối với trường hợp khi $2^t\theta$ không phải là số nguyên, có thể chứng minh rằng biểu thức trên vẫn đạt cực đại gần $x = 2^t\theta$ với xác suất cao hơn $4/\pi^2 \approx 40\%$.

Cuối cùng, ta hãy lấy một cổng quay pha mà chúng ta biết rõ và sử dụng ước tính pha lượng tử để ước tính pha của nó. Cổng T thêm một pha $e^{i\pi/4}$ vào trạng thái $|1\rangle$:

$$T(|0\rangle + |1\rangle) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = |0\rangle + e^{i\pi/4}|1\rangle = |0\rangle + e^{2i\pi\theta}|1\rangle$$

So sánh với QPE, sẽ tìm được $\theta = 1/8$.

4. BÀN LUẬN

Các thuật toán lượng tử cho ta cách tiếp cận đầy hứa hẹn và tiềm năng với các kỹ thuật sàng lọc ảo và mô phỏng phân tử hiệu quả hơn. Bằng cách tận dụng các thuật toán lượng tử như VQE và QAOA, các nhà nghiên cứu có thể dự đoán chính xác hơn mối quan hệ liên kết của các phân tử thuốc với protein mục tiêu, từ đó xác định được

các ứng cử viên thuốc mới có tỷ lệ thành công cao hơn. Trong khoa học vật liệu, thuật toán lượng tử có khả năng dự đoán và thiết kế vật liệu với các đặc tính cụ thể là rất quan trọng để phát triển các công nghệ mới và cải tiến các công nghệ hiện có. Các thuật toán lượng tử cung cấp một công cụ mạnh mẽ để khám phá không gian rộng lớn của các cấu trúc và tính chất vật chất có thể có. Bằng cách sử dụng các thuật toán như VQE và QPE, các nhà nghiên cứu có thể mô phỏng cấu trúc điện tử của vật liệu với độ chính xác chưa từng có, cho phép thiết kế vật liệu có đặc tính phù hợp cho các ứng dụng từ điện tử đến năng lượng tái tạo.

Bên cạnh những cửa thuật toán lượng tử trong khoa học vật liệu và hóa học, tồn tại một số thách thức tính mất kết hợp và lỗi lượng tử. Bởi vì trạng thái lượng tử rất “nhạy” nên khả năng mất kết hợp do ảnh hưởng môi trường nào và lỗi lật pha và lật bit rất phức tạp. Việc phát triển các kỹ thuật sửa lỗi mạnh mẽ là rất quan trọng để đảm bảo độ tin cậy của thuật toán lượng tử, đặc biệt đối với các phép tính dài và phức tạp cần thiết trong khoa học vật liệu và hoá học.

Những tiến bộ trong phần cứng lượng tử, bao gồm thời gian kết hợp qubit, độ trung thực của cổng và kết nối qubit, sẽ rất quan trọng để khắc phục những hạn chế hiện tại. Giải quyết những thách thức này sẽ đòi hỏi sự hợp tác giữa các ngành, bao gồm vật lý lượng tử, khoa học máy tính, khoa học vật liệu và hóa học.

Song song với việc sửa lỗi và phát triển phần cứng tối ưu hoá chế tạo MTLT, ta có thể tích hợp tính toán lượng tử và cổ điển (*hybrid*), như dùng thuật toán tối ưu hóa cổ điển và xử lý trước và sau dữ liệu lượng tử.

Cuối cùng, cần nghiên cứu sâu hơn để phát triển các thuật toán lượng tử mới và cải tiến các thuật toán hiện có cho các ứng dụng cụ thể trong khoa học vật liệu và hóa học, như phương pháp tiếp cận lượng tử-cổ điển lai và điều chỉnh thuật toán cho phù hợp với các loại phần cứng lượng tử khác nhau. Việc này cần có sự kết hợp của các nhà toán học, vật lý và tin học.

5. KẾT LUẬN

Các thuật toán lượng tử bộ giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE), Thuật toán tối ưu hóa gần đúng lượng tử (QAOA) và Ước tính pha lượng tử (QPE) mang lại tiềm năng cách mạng hóa các lĩnh vực như mô phỏng phân tử, thiết kế vật liệu, hoá học và thiết kế thuốc với ưu điểm tính toán nhanh hơn và chính xác hơn các thuật toán cổ điển.

Những thách thức, như nhiễu và lỗi, cần được hợp tác nghiên cứu liên ngành.

Các thuật toán lượng tử này chỉ là một vài ví dụ về tiềm năng của tính toán lượng tử trong khoa học vật liệu và hóa học. Với việc tiếp tục nghiên cứu và cải tiến, chúng ta có thể kì vọng khả năng ứng dụng đột phá của tính toán lượng tử.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] R. Feynman (1982). Simulating physics with computers, *Int. J. of Theoretical Physics*, Vol. 21(6–7), pp. 467-488.
- [2] P. Benioff (1980). The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines, *J. Stat. Phys.*, Vol. 22, pp. 563-591.
- [3] Yu. I. Manin (1980). Vychislimoe i nevychislimoe [Computable and Noncomputable] (in Russian), *Sov. Radio*, pp. 13-15.
- [4] B. Bauer, et al. (2020). Quantum algorithms for quantum chemistry and quantum materials science. *Chemical Reviews*, Vol. 120(22), pp. 12685-12717.
- [5] A. Parra-Rodriguez, et al. (2020). Digital-Analog Quantum Computation, *Phys. Rev. A*, Vol. 101, p. 022305.
- [6] D. Aharonov, et al. (2008). Adiabatic Quantum Computation Is Equivalent to Standard Quantum Computation, *SIAM review*, Vol. 50, p. 755.
- [7] E. Farhi, et al. (2001). A Quantum Adiabatic Evolution Algorithm Applied to Random Instances of an NP-Complete Problem, *Science* Vol. 292, p. 472.
- [8] D. Deutsch and R. Jozsa (1992). Rapid solutions of problems by quantum computation, *Proc. of the Royal Society of London A*, Vol. 439, pp. 553–558.
- [9] E. Bernstein and U. Vazirani (1997). Quantum Complexity Theory, *SIAM Journal on Computing*, Vol. 26(5), 1411-1473.
- [10] D. R. Simon (1997). On the Power of Quantum Computation, *SIAM Journal on Computing*, Vol. 26(5), pp. 1474–1483.
- [11] P. Shor (1994). Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring, *Pro. 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pp. 124-134.
- [12] X. Liu, H. Yang, L. & Yang (2023). Feasibility Analysis of Cracking RSA with Improved Quantum Circuits of the Shor's Algorithm, *Security and Comm. Networks*, Vol. 1, p. 2963110.
- [13] L. K. Grover (1996). A fast quantum mechanical algorithm for database search, *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC)*, pp. 212-219.
- [14] Lloyd, S. (1996). Universal quantum simulators, *Science*, Vol. 273(5278), pp. 1073-1078.
- [15] L. Clinton, et al. (2024). Towards near-term quantum simulation of materials. *Nature Communications*, Vol. 15(1), p. 211.
- [16] A. Peruzzo, et al. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature Commun.*, Vol. 5(1).
- [17] E. Farhi, J. Goldstone, & S. Gutmann (2014). A quantum approximate optimization algorithm, *arXiv preprint*, arXiv:1411.4028.
- [18] A.Y. Kitaev (1995). Quantum measurements and the Abelian stabilizer problem, *arXiv preprint*, quant-ph/9511026.
- [19] S. Lloyd (1995). Quantum-mechanical computers, *Scientific American: The Solid-State Century*, October, p. 140.
- [20] J.R. McClean, et al. (2016). The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New J. Phys.* Vol. 18(2), p. 023023.

QUANTUM ALGORITHMS FOR MATERIALS SCIENCE

Dung Van Lu^{1*}, Dang Duc Long², Nguyen Trong Bac³, Nguyen Quang San⁴

¹ Faculty of Physics, University of Science of Education, The University of Danang

² VN-UK Institute for Research & Executive Education, The University of Danang

³ Institute of Fundamental and Applied Sciences, Duy Tan University

⁴ School of Engineering and Technology, Hue University

*Email: dvlu@ued.udn.vn

ABSTRACT

With its potential for “quantum supremacy” compared to classical computers, quantum computing applying quantum mechanical properties has been extensively studied and applied to solve complex problems, including materials science and chemistry. This article offers an overview of quantum computing and its algorithms applied in molecular simulation, materials design and quantum chemistry. It provides a detailed discussion of variational quantum eigensolver (VQE), quantum approximate optimization algorithm (QAOA), and quantum phase estimation (QPE). In addition, we discuss the future prospects of quantum algorithms as well as challenges and research directions.

Keywords: Optimization algorithm (QAOA), Quantum approximate Quantum phase estimation (QPE), quantum computing, quantum algorithm, variational quantum eigensolver (VQE).



Dung Văn Lữ sinh ngày 28/12/1986 tại Thừa Thiên Huế. Ông tốt nghiệp cử nhân và thạc sĩ chuyên ngành Vật lý lý thuyết năm 2010 tại Trường Đại học Quốc gia Belarus. Hiện nay, ông công tác tại Khoa Vật lý, Trường ĐH Sư phạm, ĐH Đà Nẵng.

Lĩnh vực nghiên cứu: Tính toán lượng, khoa học vật liệu.



Đặng Đức Long sinh năm 1972 tại Bắc Ninh. Ông tốt nghiệp cử nhân ngành Hóa học năm 1994 Trường Đại học Bách khoa Hà Nội; nhận học vị thạc sĩ chuyên ngành Hóa sinh năm 1999 và học vị tiến sĩ Hóa sinh năm 2003 tại Đại học Massachusetts ở Lowell. Ông công tác tại Viện Nghiên cứu và Đào tạo Việt - Anh, Đại học Đà Nẵng từ năm 2014.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa Sinh, Tin Sinh, thông tin lượng tử.



Nguyễn Trọng Bắc sinh năm 1986 tại Thái Nguyên. Ông tốt nghiệp cử nhân ngành Toán học năm 2008 tại Trường Đại học Khoa học - Đại học Thái Nguyên và thạc sĩ chuyên ngành Toán năm 2010 tại Viện Toán học; nhận học vị tiến sĩ năm 2015 tại Đại học Mahidol, Thailand. Ông công tác tại Trường Đại học Duy Tân từ 2021.

Lĩnh vực nghiên cứu: Thông tin lượng tử, lý thuyết mã hóa.



Nguyễn Quang San sinh ngày 17/04/1991 tại Thừa Thiên Huế. Ông tốt nghiệp cử nhân năm 2015, thạc sĩ năm 20216 và bảo vệ luận án Tiến sĩ năm 2022 chuyên ngành Vật lý lý thuyết tại Trường Đại học Quốc gia Belarus. Ông công tác tại Khoa Kỹ thuật và Công nghệ – Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Vật lý toán, tương tác điện từ với vật chất, thông tin lượng tử, thuật toán lượng tử, bức xạ tia X tham số.

