

**Отзыв на выпускную квалификационную работу магистра
Дуровой Анастасии Вячеславовны на тему
"Расчеты модели Изинга и электронной структуры атомов и молекул с
помощью квантовых алгоритмов"**

Представленная работа посвящена расчетам задачи логистики буровых установок и энергии ионизации с помощью квантовых алгоритмов. Для расчета задачи логистики использовался Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) с оптимизационной процедурой COBYLA. Для расчета энергии ионизации применялся новый алгоритм, позволяющий осуществлять прямой расчет этой величины на квантовом компьютере. При этом использовались два оптимизационных метода: безградиентный COBYLA и алгоритм Adam, который требует вычисления градиентов.

Анастасией Вячеславовной были проведены расчеты задачи логистики на нескольких наборах данных, полученные с помощью алгоритма QAOA. Результаты расчетов были сопоставлены с соответствующими данными, полученными с помощью алгоритма симуляции отжига, Or-tools, жадного алгоритма и симулятора когерентной машины Изинга. В результате было показано, что допустимые решения могут быть получены с помощью квантовых алгоритмов. Также в работе представлены тестирования квантового алгоритма прямого расчета энергии ионизации на примере молекулы водорода. С помощью полученных результатов были продемонстрированы корректность и эффективность работы данного алгоритма.

Все цели, поставленные перед Анастасией, были успешно достигнуты. Я рекомендую поставить данной работе оценку отлично.

01.06.2023

к. ф.-м. н., доцент,
И. А. Мальцев