

УДК 621.315; 577.322

Сжатие квантового контура для моделирования пространственной структуры белка

© 2022 г. М. О. Лисниченко¹, С. И. Протасов¹

¹ Университет Иннополис,
ул. Университетская, д. 1, Иннополис, Республика Татарстан, 420500,
Российская Федерация

✉ Автор для переписки: m.lisnichenko@innopolis.university

Аннотация. Вычислительное материаловедение направлено на моделирование веществ для изучения их физических свойств. Биоэлектроника — это междисциплинарная область, изучающая биологические материалы с точки зрения проводимости. Пространственная структура (или свертка) белка напрямую влияет на его физические и химические свойства, в том числе на проводимость. Моделирование пространственной структуры белка является вычислительно трудной задачей: число возможных степеней свободы делает моделирование экспоненциально сложным для классических вычислений из-за ограниченности ресурсов, а именно памяти и процессорного времени. Квантовые вычисления направлены на обработку многомерных данных, при которых потребность в вычислительных ресурсах (кубитах) растет логарифмически по отношению к размеру данных. Квантовые операторы, вентили, составляют квантовые программы, называемые контурами (или схемами). В реальных квантовых компьютерах вентили являются неточными и дорогими в исполнении. Одним из способов повышения точности результата и снижения стоимости вычислений служит уменьшение количества квантовых вентилях. Данная работа описывает подход к уменьшению количества вентилях, состоящий из двух комбинируемых техник. Первая техника оптимизации основана на свойствах обратных и коммутирующих матриц. В рассматриваемом случае оптимизированный контур при моделировании предсказывает такую же структуру белка, как и при моделировании исходным контуром, поскольку они математически эквивалентны. Вторая техника основана на исключении из квантового контура операторов с малоамплитудными параметрами. В этом случае оптимизированный контур рассчитывает приближенную структуру белка с погрешностью, зависящей от величины амплитуды параметров матриц. В ходе работы при моделировании части молекулы азурина удалось сократить глубину квантового контура с 631 до 629 вентилях первой техникой. Сокращение числа операторов первого метода совместно со вторым зависит от порогового значения, заданным вручную: для порогового значения 0,4 радиан глубина квантового контура составляет 314 вентилях.

Ключевые слова: квантовые технологии, оптимизация, моделирование, биоэлектроника

Для цитирования: Лисниченко М.О., Протасов С.И. Сжатие квантового контура для моделирования пространственной структуры белка. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2022; 25(4): 305—311. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-305-311>

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на VI-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 24–26 октября 2022 г.

© 2022 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

Protein folding quantum circuit quantum circuit for bio material modelling compression

M. O. Lisnchenko¹✉, S. I. Protasov¹

¹ *Innopolis University,
1 Universitetskaya Str., Innopolis, 420500, Russian Federation*

✉ *Corresponding author: m.lisnichenko@innopolis.university*

Abstract. Computational material science aims to simulate substances to understand their physical properties. Bioelectronics is an interdisciplinary field that studies biological material from the conductivity point of view. In case of proteins, the folding is an important feature that directly influences physical and chemical properties. The folding modelling is a hard task. The enormous number of degrees of freedom makes modelling impossible for classical computation due to resource limits. Quantum computations aim to process multidimensional data with logarithmic growth of quantum bits. Quantum operators (gates) form quantum programs, known as circuits that process the input data. In real quantum computers, the gates are noisy and expensive to execute. Thus, it is essential to reduce the number of quantum gates both for the quality of the result and the cost of computations. This work describes an approach to decrease the number of quantum gates based on their mathematical property. The matrix properties form the first optimization technique. In this case, the optimized quantum circuit predicts precisely the same protein folding as the not optimized circuit predicts. This happens because both of the circuits are mathematically equivalent. The removal of weakly-parametrized gates forms the second optimization technique. In such case the optimized quantum circuit calculates the approximate protein folding. The error depends on parameter's amplitude of the gates. The first technique allows to decrease the circuit depth from 631 to 629 gates while modelling the part of Azurin peptide. The second technique allows to decrease the depth to 314 gates with the threshold parameter value 0.4 radians.

Keywords: quantum technology, optimization, modelling, bioelectronics

For citation: Lisnchenko M.O., Protasov S.I. Protein folding quantum circuit quantum circuit for bio material modelling compression. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2022; 25(4): 305—311. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-305-311>

Введение

Биоэлектроника является перспективной областью на стыке электроники и биологии [1]. Она изучает электрическую проводимость биоматериалов для создания «новых систем обработки информации, датчиков и приводов, атомарного размера» [2]. Белковые молекулы в составе биоэлектронных материалов также обладают электропроводностью. Ю. Токита и др. [3] исследовали *s*- и *p*-полупроводниковые свойства цитохрома в зависимости от структуры молекулы. В ходе исследования авторы предложили идею «белкового полупроводника с *p*—*n*-переходом». Дж. Феррейро и др. [4] предложили метод «детектирования биомолекулярных электронных соединений» в экспериментах с азуринном. М. Кордес в своей работе [5] описал транспортный механизм электронов в молекулах аминокислот. М. Кордес и Б. Гизе в работе [6] описали возможные механизмы проводимости: обмен электронами, «прыжки» электронов и перенос протонов. М. Ха и др. в своей работе [7] показали

взаимосвязь между структурой белка и механизмом образования полупроводникового перехода. С. Левинталь [8] показал, что пространственная структура белка определяется составом аминокислотной последовательности и эта структура уникальна для каждого белка. Однако другие исследования показывают, что существуют белки, у которых стабильная структура не единственна [9], а также существуют неупорядоченные белки [10]. Подобные феномены выходят за рамки данного исследования, предложенный метод направлен на поиск любой одной стабильной структуры, если она существует.

Знать структуру белка — значит знать свойства проводимости белка [7]. Математическое моделирование позволяет определить структуру белка по заданной последовательности аминокислот. Следовательно, помогает определить свойства проводимости биоматериала.

В. Харт и С. Истрайл доказали, что моделирование свертывания белков является NP-трудной задачей [11]. Следовательно, не существует точного

алгоритма моделирования сворачивания белка, требующего полиномиального времени на классическом компьютере, при этом существуют достаточно продвинутые приближенные решения, основанные на машинном обучении [12]. Квантовые вычисления справляются с задачами моделирования и оптимизации с меньшими затратами ресурсов [13].

В данной работе представлен метод оптимизации квантового контура для решения задачи фолдинга белка на квантовом компьютере.

Теоретический анализ

А. Роберт и др. [14] представили метод для предсказания нативной структуры белка. Метод начинается с кодирования аминокислот. Каждая аминокислота обладает уникальными физическими свойствами, которые влияют на проводимость белка. Авторы описали формирование оператора энергии для аминокислот. Этот оператор, гамильтониан, удовлетворяет следующими ограничивающими факторами:

– *рост*: «препятствует тому, чтобы последовательность аминокислот (основная или побочная) ... складывалась сама с собой» [14];

– *хиральность*: «обеспечивает правильную стереохимию боковых последовательностей, если они присутствуют» [14];

– *взаимодействие*: состоит из двух гамильтонианов и равняется $H_{in} = H_{overlap} + H_{pair}$. Первый гамильтониан «определяет, перекрываются ли какие-либо два участка молекулы, и впоследствии добавляет штраф за перекрытие», а второй «учитывает взаимодействие между двумя не связанными ближайшими соседними участками» [15].

В работе [15] этот метод кодирования используется как основа для дальнейшей оптимизации. Из-за перечисленных ограничений кодирование является экспоненциально сложной вычислительной задачей для классических компьютеров, но разрешимой для квантовых компьютеров.

Существующая элементная база квантовых компьютеров подвержена ошибкам, которыми нельзя пренебречь. Каждый оператор вносит незначительные ошибки, которые вместе приводят к существенному искажению результата. Эта особенность определила эру шумных среднemasштабных квантовых компьютеров (Noisy Intermediate-Scaled Quantum — NISQ) [16] и подразумевает, что вычисления ведутся на ненадежных квантовых компьютерах, ограниченных числом кубитов (до 100). Уменьшение количества взаимодействий между кубитами и окружающей средой приводит к более точной реализации на физическом уровне, в то время как алгоритмы квантовой коррекции ошибок (Quantum Error Correction — QEC) от-

вечают за надежность с точки зрения обработки данных [17]. Если представить кубиты как линии, а вентили как узлы на них, то квантовая схема представляет собой пути от входных данных до выходных состояний вдоль линий по узлам. Чем длиннее путь, тем, как правило, больше вентилях содержит схема. Таким образом, уменьшение глубины схемы — самого длинного пути в квантовом контуре — означает одновременное уменьшение ошибки и стоимости исполнения квантового контура. Однако, если просто удалить вентили, то результат будет отличаться от изначально ожидаемого. Данная работа описывает метод оптимизации, который сохраняет *фидельность* (либо максимизирует ее в случае приближенного подхода), меру сходства между фактическим результатом и предсказанным состоянием.

Новизна. Данная работа описывает алгоритм оптимизации квантового контура, кодирующего часть пептида азурин [18]. Оптимизация использует математические свойства матриц и анализ слабопараметризованных вентилях. Алгоритм позволяет получить как абсолютно точный, так и приближенный результат, в зависимости от выбора техники оптимизации. Оптимизация точным методом сохраняет фидельность равной единице, а также сохраняет вентили с небольшой амплитудой параметров. Оптимизация приближенной техникой удаляет вентили с малым влиянием на выходное состояние, следовательно, снижает фидельность. Оптимизация также может включать обе — точную и приближенную — техники.

До измерения вектора состояния размера 2^N описывает состояние N частиц с двумя квантовыми состояниями — кубитов. Например, следующие вектор-столбцы — кет-векторы — представляют один кубит в состоянии $|0\rangle$ и $|1\rangle$ соответственно:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle. \quad (1)$$

Вектор-строка (также называемый бра-вектором) является транспонированным сопряженным кет-вектора. Например, для состояний $\langle 0|$ и $\langle 1|$ соответствующие бра-вектор выглядят следующим образом:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \langle 0|, \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \langle 1|. \quad (2)$$

В квантовых вычислениях произвольное состояние одного кубита $|\psi\rangle$ принято описывать через суперпозицию наблюдаемых (т. е. тех, которые можно обнаружить при измерении) следующим образом:

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle, \quad (3)$$

где $\theta, \phi \in \mathbf{R} [0, \pi]$ [20].

В квантовых вычислениях все кубиты инициализируются в нулевом состоянии $|0\rangle$. Квантовые операторы воздействуют на кубиты и изменяют их состояния (и состояние всей системы). Квантовые вентили являются унитарными матрицами. Любые однокубитные вентили являются частным случаем следующей матрицы:

$$U(\theta, \phi, \lambda) = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -e^{-i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i(\phi+\lambda)} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где θ , ϕ , и λ представляют собой *параметры* — вращение вокруг осей X , Y , Z общепринятой графической репрезентации квантовых состояний — сферы Блоха [21].

Далее рассмотрим алгоритм упрощения квантового контура.

Методика техники оптимизации

Рассмотрим метод уменьшения глубины кодирующей квантовой схемы свертывания белков. Алгоритм состоит из двух техник:

- удаление избыточных квантовых операторов при сохранении математической эквивалентности;
- удаление квантовых операторов с малыми параметрами.

Качество предложенных техник оценивается с помощью следующих численных характеристик. Глубина квантовой схемы, количество квантовых вентилях и фидельность состояния, позволяют численно оценить предложенный подход. Глубина схемы и количество квантовых вентилях соответствуют количеству узлов в самом длинном пути схемы и общему количеству операций в схеме, соответственно. Функция *фидельности* определяет меру сходства двух квантовых состояний. *Евклидово расстояние* или L_2 -метрика, определяет расстояние (в пространстве относительных углов структуры) между нативной и предсказанной на основе упрощенного квантового контура пространственными конфигурациями белка.

Коммутативность. Первый этап используют коммутативность матриц, а также определение обратных матриц. Для унитарных матриц (которыми являются все квантовые операторы) обратная матрица равна транспонированной комплексно-сопряженной исходной матрицы. Для унитарной матрицы U это свойство выглядит следующим образом:

$$UU^{-1} = U^{-1}U = UU^\dagger = U^\dagger U = I, \quad (5)$$

где I представляет собой единичную матрицу. Таким образом, если схема содержит вентили, за

которыми следуют им обратные вентили, алгоритм их сокращает. Коммутативное свойство применяется следующим образом. Предположим, что матрицы A , U , U^\dagger образуют квантовую схему (рис. 1).

Определение: Если унитарный оператор U и его обратный оператор U^\dagger ограничивает последовательность унитарных операторов, где все матрицы коммутируют с U , то операторы U и U^\dagger назовем избыточными операторами.

Операторы с малоамплитудными параметрами. Вторая техника оптимизации связана с параметрами матричных операторов. Выше были рассмотрены универсальные квантовые вентили с параметрами θ , ϕ , λ . Выходное состояние контура зависит от пороговых значений параметров и выражается в фидельности по сравнению с нативной структурой белка. Очевидно, что существенно измененная схема приводит к ошибкам в результате вычислений. Предложенная идея заключается в том, чтобы проверить насколько точно работает контур, сжатый путем исключения операторов с низкими амплитудами параметров θ , ϕ , λ (см. формулу (4)). Пороговые значения лежат в интервале $[0, \pi]$. Одним из способов измерения точности является введение оценки фидельности для квантовых состояний после кодирования. На основе двух состояний $|\rho\rangle$ и $|\sigma\rangle$ функция фидельности выглядит следующим образом:

$$F(\rho, \sigma) = |\langle \rho | \sigma \rangle|^2. \quad (6)$$

Другой способ — использовать евклидову меру L_2 чтобы найти расстояние между приближенно рассчитанной структурой белка и точной в радианах. Координаты каждой аминокислоты кодируют структуру белка в виде матрицы. Пусть матрицы A и B содержат попарно относительные углы аминокислот белковой структуры, вычисленной несжатым и сжатым квантовым контуром соответственно. Тогда L_2 представляется следующим образом

$$L_2(A, B) = \sqrt{\sum_p |A^p - B^p|^2}, \quad (7)$$

где p — индекс аминокислоты в цепи молекулы.

Следующий раздел приводит данные по собранным экспериментам с обоими описанными режимами.

Экспериментальные результаты

Экспериментальная часть включает в себя использование фреймворка Qiskit [22] для моделирования работы квантовых контуров. Эксперименты охватывают моделирование исходных контуров, а также контуров, сжатых путем удаления избы-

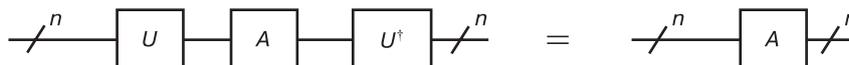


Рис. 1. Квантовая схема
Fig. 1. Quantum circuit

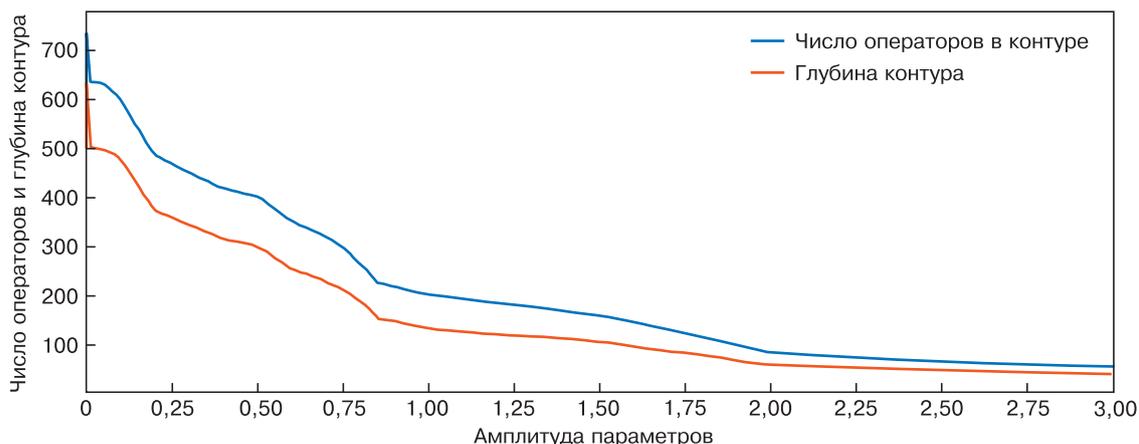


Рис. 2. Глубины квантового контура и количество вентилей в нем. Исходный контур состоит из 746 квантовых вентилей и имеет глубину 631
Fig. 2. Quantum circuit depth and number of gates in this circuit. The initial uncompressed circuit performs with 746 quantum gates having depth 631

точных вентилей, и полностью сжатых контуров обеими техниками.

На рис. 2 показана зависимость глубины квантового контура и количества квантовых вентилей от пороговой амплитуды параметра.

При уменьшении числа параметризованных вентилей нарушается правильность кодирования физических свойств белка. В результате определяемая структура белка оказывается ошибочной. Однако при определенных параметрах предсказанная структура совпадает со структурой, которую определяет исходная схема. В данном случае пороговое значение 0,4 радиана позволяет удалить вентили с параметрами ниже этого значения так, что оценка L_2 равняется нулю. На рис. 3 представлены показатели фидельности и L_2 -метрики.

Результаты и их обсуждение

Обе техники сжатия квантового контура сокращают глубину схемы и число операторов. В частности, контур кодирования без сжатия глубиной 631 вентилей имеет 746 оператора; если исключить избыточные вентили, то схема глубиной 629 вентилей имеет 744 оператора. Этот шаг не является эффективным в чистом виде для рассматриваемого случая. Несмотря на то, что контур имеет большое число операторов, он не содержит значительного числа вентилей, которые коммутируют.

Напротив, если для параметризованных вентилей установлено соответствующее пороговое значение, контур значительно сокращается как по глубине, так и по количеству вентилей. Если ис-

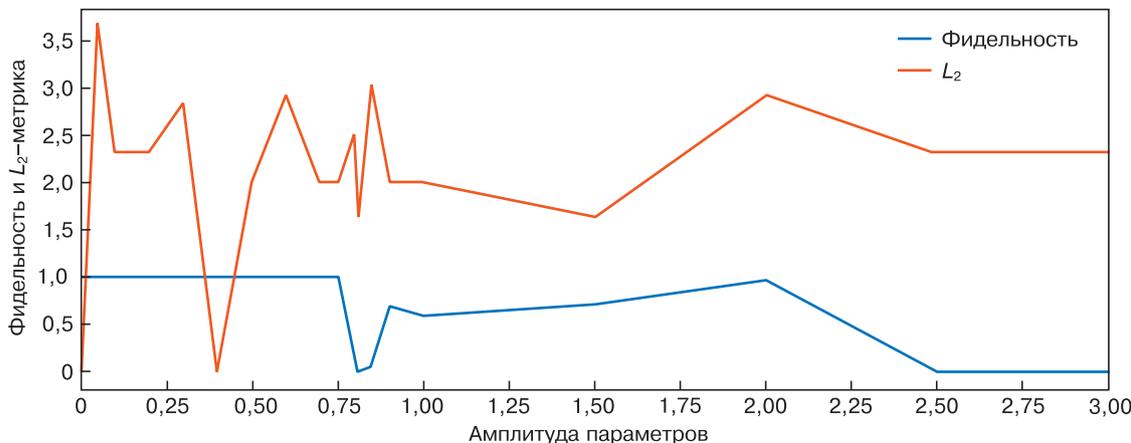


Рис. 3. Показатели фидельности и L_2 -метрики. Аномалия наблюдается в области высоких обеих метрик – достоверности и L_2 , при пороговом значении 0,4
Fig. 3. Fidelity and L_2 score. The anomaly in the area of high both fidelity and L_2 score under threshold value 0.4

ключить операторы со значениями параметров в пределах $[0,05; 0,4)$, $(0,4; \pi]$, то L_2 -метрика отлична от 0. Примечательно, что, если удалить вентили с параметрами меньше или равными пороговому значению 0,4, предсказанная структура белка точно такая же, как и в случае предсказания по несжатому контуру. При этом глубина контура снижается до 314 вентиляей, а суммарное их количество составляет 417. Таким образом, для наблюдаемого случая *схема с уменьшенным числом вентиляей определяет структуру белка верно*. Стоит заметить, что выходное квантовое состояние и пространственная структура не являются одним понятием. Отсюда следует, что метод расчета структуры не учитывает симметрично отображенные конфигурации.

Заключение

Данная работа описывает метод сжатия квантового контура, используемого для моделирования пространственной структуры белков. Метод основан на свойстве обратных матриц и анализе параметризованных вентиляей. Первая техника оптимизации позволяет уменьшить количество вентиляей без изменения выходного результата по сравнению с реальной структурой белка. Однако сокращение количества вентиляей и глубины незначительно. Вторая техника позволяет сократить большее количество операторов в зависимости от пороговой амплитуды. Например, при пороговом значении амплитуды 0,4 радиана глубина квантового контура составляет 314 вентиляей при исходной глубине 631.

Ценой сжатия является снижение фидельности кодирующего состояния, что является признаком неточно предсказанной структуры белка.

Предложенный метод позволяет найти значения параметров, при которых более сжатый контур предсказывает пространственную структуру точнее менее сжатого. Контур предсказывает структуру белка с низким значением L_2 используя преимущества этих аномалий. Симуляция такого контура дает высокую точность выходного состояния при уменьшенной глубине и сокращенном количестве вентиляей. Во-первых, возникает гипотеза о всеобщности этого явления. Данное предположение относится к перебалансировке параметров внутри контура. Вместо того чтобы сокращать числа вентиляей, возможно их разделение на отдельные одно- или многопараметрические вентили и их объединение. Однако в этом случае оптимизация «грубой силой» потребует много времени и ресурсов. Дальнейшее развитие идеи требует изучения вычислительно незатратных методов в области разложения матриц. Второе предположение связано с процессом моделирования структуры белка как таковым. Предложенный алгоритм сжимает только кодирующую часть квантового контура. Если производить оптимизацию контура на каждой итерации процесса обновления параметров, то время и стоимость обучения сокращаются. Дальнейшая работа направлена на проверку двух идей на более широких выборках.

Библиографический список / References

- Zhang L., Lu J.R., Waigh T.A. Electronics of peptide- and protein-based biomaterials. *Advances in Colloid and Interface Science*. 2021; 287: 102319—102320. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102319>
- Nicolini C. From neural chip and engineered biomolecules to bioelectronic devices: An overview. *Biosensors and Bioelectronics*. 1995; 10(1-2): 105—127. [https://doi.org/10.1016/0956-5663\(95\)96799-5](https://doi.org/10.1016/0956-5663(95)96799-5)
- Tokita Y., Yamada S., Luo W., Goto Y., Bouley-Ford N., Nakajima H., Watanabe Y. Protein photoconductors and photodiodes. *Angewandte Chemie International Edition*. 2011; 50(49): 11663—11666. <https://doi.org/10.1002/anie.201103341>
- Fereiro J.A., Porat G., Bendikov T., Pecht I., Sheves M., Cahen D. Protein electronics: chemical modulation of contacts control energy level alignment in gold-azurin-gold junctions. *Journal of the American Chemical Society*. 2018; 140(41): 13317—13326. <https://doi.org/10.1021/jacs.8b07742>
- Cordes M. How do amino acids transport electrons through peptides? Germany: Cuvillier Verlag; 2008. 8 p.
- Cordes M., Giese B. Electron transfer in peptides and proteins. *Chemical Society Reviews*. 2009; 38(4): 892—901. <https://doi.org/10.1039/b805743p>
- Ha M., Kim V.N. Regulation of microRNA biogenesis. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*. 2014; 15(8): 509—524. <https://doi.org/10.1038/nrm3838>
- Levinthal C. Are there pathways for protein folding? *Journal de Chimie Physique*. 1968; 65: 44—45. <https://doi.org/10.1051/jcp/1968650044>
- Bryan P.N., Orban J. Proteins that switch folds. *Current Opinion in Structural Biology*. 2010; 20(4): 482—488. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2010.06.002>
- Dunker A.K., Lawson J.D., Brown C.J., Williams R.M., Romero P., Oh J.S., Oldfield C.J., Campen A.M., Ratliff C.M., Hipps K.W., Ausio J., Nissen M., Reeves R., Kang C., Kissinger C., Bailey R., Griswold M., Chiu, E. Garner W., Obradovic Z. Intrinsically disordered protein. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 2001; 19(1): 26—59. [https://doi.org/10.1016/s1093-3263\(00\)00138-8](https://doi.org/10.1016/s1093-3263(00)00138-8)
- Hart W.E., Istrail S. Robust proofs of NP-hardness for protein folding: general lattices and energy potentials. *Journal of Computational Biology: a Journal of Computational Molecular Cell Biology*. 1997; 4(1): 1—22. <https://doi.org/10.1089/cmb.1997.4.1>
- Tunyasuvunakool K., Adler J., Wu Z., Green T., Zielinski M., Zidek A., Bridgland A., Cowie A., Meyer C., Laydon A. et al. Highly accurate protein structure prediction

- for the human proteome. *Nature*. 2021; 596(7873): 590—596. <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03828-1>
13. Outeiral C., Strahm M., Shi J., Morris G.M., Benjamin S.C., Deane Ch.M. The prospects of quantum computing in computational molecular biology. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*. 2021; 11(1): e1481—e1504. <https://doi.org/10.1002/wcms.1481>
14. Robert A., Barkoutsos P.K., Woerner S., Tavernelli I. Resource-efficient quantum algorithm for protein folding. *npj Quantum Information*. 2021; 7(1): 1—5. <https://doi.org/10.1038/s41534-021-00368-4>
15. Fingerhuth M., Babej T., Ing Ch. A quantum alternating operator ansatz with hard and soft constraints for lattice protein folding. arXiv: 1810.13411; 2018. 12 p. <https://arxiv.org/pdf/1810.13411.pdf>
16. Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*. 2018; 2: 79—101. <https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
17. Matsumoto R., Hagiwara M. A survey of quantum error correction. *IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences*. 2021; E104.A(12): 1654—1665. <https://doi.org/10.1587/transfun.2021EAI0001>
18. Huang F., Shu Q., Qin Zh., Tian J., Su Zh., Huang Y., Gao M. Anticancer actions of Azurin and its derived peptide p28. *The Protein Journal*. 2020; 39(2): 182—189. <https://doi.org/10.1007/s10930-020-09891-3>
19. Thekkadath G.S., Giner L., Chalich Y., Horton M.J., Banker J., Lundeen J.S. Direct measurement of the density matrix of a quantum system. *Physical Review Letters*. 2016; 117(12): 120401—120407. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.120401>
20. The Jupyter Book Community. Representing qubit states. <https://qiskit.org/textbook/ch-states/representing-qubit-states.html>
21. Boyer M., Liss R., Mor T. Geometry of entanglement in the Bloch sphere. *Physical Review A*. 2017; 95(3): 032308—032315. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.032308>
22. Open-source quantum development. <https://qiskit.org/> (дата обращения: 17.12.2022).

Информация об авторах / Information about the authors

Лисниченко Марина Олеговна — ассистент, аспирант, лаборатория машинного обучения и представления данных; Университет Иннополис, ул. Университетская, д. 1, Иннополис, Республика Татарстан, 420500, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2701-6083>; e-mail: m.lisnichenko@innopolis.university

Протасов Станислав Игоревич — кандидат физ.-мат. наук, доцент, лаборатория машинного обучения и представления данных; Университет Иннополис, ул. Университетская, д. 1, Иннополис, Республика Татарстан, 420500, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5404-2773>; e-mail: s.protasov@innopolis.ru

Marina O. Lisnichenko — Assistant, Postgraduate Student, Machine Learning and Knowledge Representation Lab; Innopolis University, 1 Universitetskaya Str., Innopolis, 420500, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2701-6083>; e-mail: m.lisnichenko@innopolis.university

Stanislav I. Protasov — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Machine Learning and Knowledge Representation Lab; Innopolis University, 1 Universitetskaya Str., Innopolis, 420500, Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5404-2773>; e-mail: s.protasov@innopolis.ru

Поступила в редакцию 29.11.2022; поступила после доработки 13.12.2022; принята к публикации 23.12.2022
Received 29 November 2022; Revised 13 December 2022; Accepted 23 December 2022