

Структурный подход к проектированию квантовых алгоритмов на основе композиции модулей

П. В. Зрелов, О.В. Иванцова

Аннотация — Статья посвящена исследованию структурного подхода к проектированию квантовых алгоритмов на основе композиции модулей. Обосновывается необходимость разработки высокоуровневых абстракций для снижения когнитивного барьера у специалистов, имеющих опыт работы с классическими вычислениями, и для активного внедрения квантовых методов в различные предметные области. Представлен анализ современных языков и платформ для квантовых вычислений, поддерживающих модульность через библиотеки операций и гибридную интеграцию с классическими программами. Изложена методология поэтапного проектирования квантовых схем, заключающаяся в последовательном переходе от высокоуровневых шаблонов к практической реализации на симуляторах и квантовых компьютерах. Описана технология применения модульного подхода, который позволяет использовать готовые, оптимизированные библиотечные функции, что упрощает и ускоряет разработку алгоритмов. Применение данной методологии проиллюстрировано на примере формализации композиционных правил для встроженных шаблонов фреймворка PennyLane и создания гибридного квантово-классического конвейера для анализа данных. Практическая апробация предложенного подхода на задаче классификации методами машинного обучения показала, что его эффективность по крайней мере не уступает лучшим классическим решениям. Рассмотрены перспективы развития структурного подхода как основы для формирования стандартов проектирования квантового программного обеспечения. Подчеркивается практическая ценность материалов статьи для специалистов в области квантовых вычислений, машинного обучения и анализа данных.

Ключевые слова — гибридные квантово-классические вычисления, квантовые алгоритмы, конвейеры анализа данных, модульный подход, шаблоны проектирования квантовых алгоритмов, PennyLane.

I. ВВЕДЕНИЕ

Современный этап развития квантовых вычислений (КВ) характеризуется возрастающей интеграцией квантовых технологий в практические решения, что открывает новые возможности для их применения в таких сферах, как оптимизация, машинное обучение, криптография и моделирование сложных систем [1, 2, 3, 4, 5]. Особую значимость квантовые алгоритмы (КА) приобретают в задачах анализа данных [6, 7, 8], где их интеграция в классические конвейеры открывает новые возможности. Например, квантовые методы машинного обучения могут улучшать обработку данных большой размерности, а гибридные алгоритмы – комбинировать квантовую и классическую логику для решения задач классификации, регрессии или кластеризации. Интеграция КА в конвейеры анализа данных открывает новые возможности для создания адаптивных систем, в которых квантовые модули дополняют и усиливают традиционные методы, повышая их эффективность. Такой подход способствует развитию гибридных вычислительных платформ и ускоряет переход от теоретических исследований к практическим приложениям. Однако разработка квантовых программ требует глубокого понимания фундаментальных принципов квантовой механики, которые лежат в основе квантовых вычислений, а также специфики проектирования КА и их аппаратной реализации через квантовые схемы (КС). Актуальность разработки подходов и инструментов, которые упрощают использование квантовых вычислений, делая их доступными для специалистов, не обладающих глубоким пониманием квантовой механики, подчеркивается отсутствием стандартизированных методов интеграции КА в классические конвейеры анализа данных. В качестве основы структурного подхода в работе предлагается трехуровневая модель проектирования квантовых алгоритмов (см. рис.1). Верхний уровень — «Предметная задача» определяет цель (например, классификацию данных). Средний уровень —

Статья получена 9 октября 2025.

П. В. Зрелов — начальник научно-технического отдела программного и информационного обеспечения, Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований (141980 г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6); доцент, Государственный университет «Дубна», Институт системного анализа и управления (141980, Россия, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19),
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0642-3042>, zrelov@jinr.ru

О. В. Иванцова — научный сотрудник, Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований (141980 г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6); старший преподаватель, Государственный университет «Дубна», Институт системного анализа и управления (141980, Россия, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, 19),
ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9575-7142>, ivancova@jinr.ru

«Квантовый алгоритм» — описывает структуру алгоритма (например, вариационный квантовый классификатор VQC) в виде КС с помощью шаблонов PennyLane и правил их композиции. Нижний уровень — «Аппаратная реализация» — включает адаптацию КС под конкретные квантовые устройства (транспилицию) и интеграцию с программно-аппаратными бэкендами (Qiskit, Cirq и другие). Использование высокоуровневых абстракций для описания квантовых программ снижает порог вхождения в данную предметную область и позволяет начинать проектирование квантовых программ на уровне, независимом от конкретной квантовой платформы, постепенно переходя на более низкий уровень, углубляясь в детали реализации.



Рис. 1. Трехуровневая модель проектирования квантовых алгоритмов

Теоретические основы шаблонного проектирования КА были заложены в работе [9]. Этот фундаментальный подход получил развитие в последующих исследованиях [10, 11], в которых были разработаны некоторые специализированные шаблоны для кодирования данных и гибридных алгоритмов. Значительный вклад в развитие методологии внесла работа [12], в ней авторы предложили детальную классификацию шаблонов для различных этапов разработки квантового программного обеспечения. Несмотря на использование базовых шаблонов, таких как суперпозиция, запутывание, инициализация и оракул, в открытых репозиториях GitHub в период с 2017 по 2024 год, их практическое применение в реальных проектах остается ограниченным [13, 14]. Это обусловлено тем, что многие теоретические разработки, включая предложенные в [11], недостаточно адаптированы к работе с реальными данными и к специфике конкретных квантовых платформ. Тем не менее устойчивый интерес к этим методикам свидетельствует об их значительном потенциале для дальнейшего развития отрасли КВ.

Основные проблемы практического применения шаблонов в квантовых вычислениях связаны с их недостаточной адаптацией к реальным условиям работы: многие шаблоны не учитывают особенности обработки высокоразмерных данных, отсутствуют четкие рекомендации по оптимизации гиперпараметров гибридных архитектур, что усложняет их внедрение для

конкретных аналитических задач. Эти ограничения подчеркивают необходимость разработки комплексного подхода для специализированных решений, который бы объединял не только структуру квантовых схем, но и методики их интеграции в полные аналитические цепочки. Такие решения должны включать способы (а в дальнейшем, и стандарты) взаимодействия с классическими вычислительными модулями, адаптацию под различные бэкенды и практические рекомендации по работе с реальными данными, включая высокоразмерные.

Данное исследование направлено на разработку и апробацию структурного подхода к проектированию квантовых алгоритмов на основе композиции модулей для эффективного внедрения квантовых методов в практику анализа данных. Основными задачами исследования являются разработка методики поэтапного проектирования квантовых схем, обеспечивающей переход от высокоуровневых шаблонов к практической реализации, формализация композиционных правил для шаблонов фреймворка PennyLane, а также создание и апробация гибридного квантово-классического конвейера для анализа данных на основе предложенного модульного подхода.

II. МОДУЛЬНЫЙ ПОДХОД В КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЯХ

Модульное проектирование упрощает процесс разработки и тестирования сложных алгоритмов за счет декомпозиции на небольшие модули, каждый из которых содержит определенную и хорошо изолированную функциональность. Модульность применима как на программном, так и на аппаратном уровне, что делает данный подход универсальным в квантовых вычислениях. Модульное проектирование в квантовых вычислениях позволяет интегрировать готовые библиотечные функции, содержащие оптимизированные реализации квантовых схем. Это сокращает и упрощает время разработки, предоставляя возможность использовать уже готовые проверенные решения при моделировании КА. Квантовые программные симуляторы (КПС) эмулируют квантовые вычисления на классических вычислительных архитектурах [15]. Их основное преимущество заключается в возможности разработки, тестирования и оптимизации структуры КА в контролируемой среде (до их реализации на физических квантовых устройствах (что особенно ценно в условиях ограниченной доступности этих устройств) [16].

PennyLane — это кроссплатформенный фреймворк Python для квантовых вычислений, ключевой особенностью которого является унифицированная архитектура, абстрагирующаяся от аппаратной реализации [17]. Он функционирует как единый интерфейс для программирования квантовых устройств, поддерживая в качестве бэкенда встроенные симуляторы и оборудование различных производителей, включая Qiskit, Cirq, Forest и Strawberry Fields. Эта гибкость делает PennyLane мощным инструментом для исследований, образования и решения прикладных задач. Однако для эффективного использования его высокоуровневых абстракций необходима систематизация принципов композиции квантовых

программ и их интеграции в классические конвейеры обработки данных.

Обобщенная модульная архитектура квантового алгоритма (см. рис. 2) демонстрирует три фундаментальных компонента с четко определенными интерфейсами:

- ✓ модуль подготовки состояния (определяемый размерностью данных и числом кубитов), преобразующий входные данные в начальное квантовое состояние;
- ✓ модуль преобразований, принимающий параметры для построения унитарных операций, выполняет основные квантовые вычисления;
- ✓ модуль измерений преобразует квантовое состояние в классические данные. Он отвечает за финальную стадию алгоритма, где выбор наблюдаемой величины непосредственно влияет на структуру и интерпретацию выходных данных.

классических данных в квантовые состояния с помощью углов вращения кубитов. AmplitudeEmbedding – метод кодирования классических данных в квантовые состояния с помощью амплитуд вероятности кубитов.

- ✓ Шаблоны подготовки состояния (State Preparations) преобразуют нулевое состояние $|0\dots 0\rangle$ в другое начальное состояние. В отличие от Embedding templates, которые могут использоваться в любом месте квантовой схемы, подготовка состояния обычно используется в качестве первой операции.
- ✓ Шаблоны слоев (Layer templates) – это предопределённые шаблоны квантовых схем, которые упрощают построение параметризованных квантовых цепей для машинного обучения и оптимизации. Каждый шаблон принимает на вход параметры (обычно углы вращения), которые настраиваются в процессе обучения.
- ✓ Арифметические шаблоны (Arithmetic templates) – это

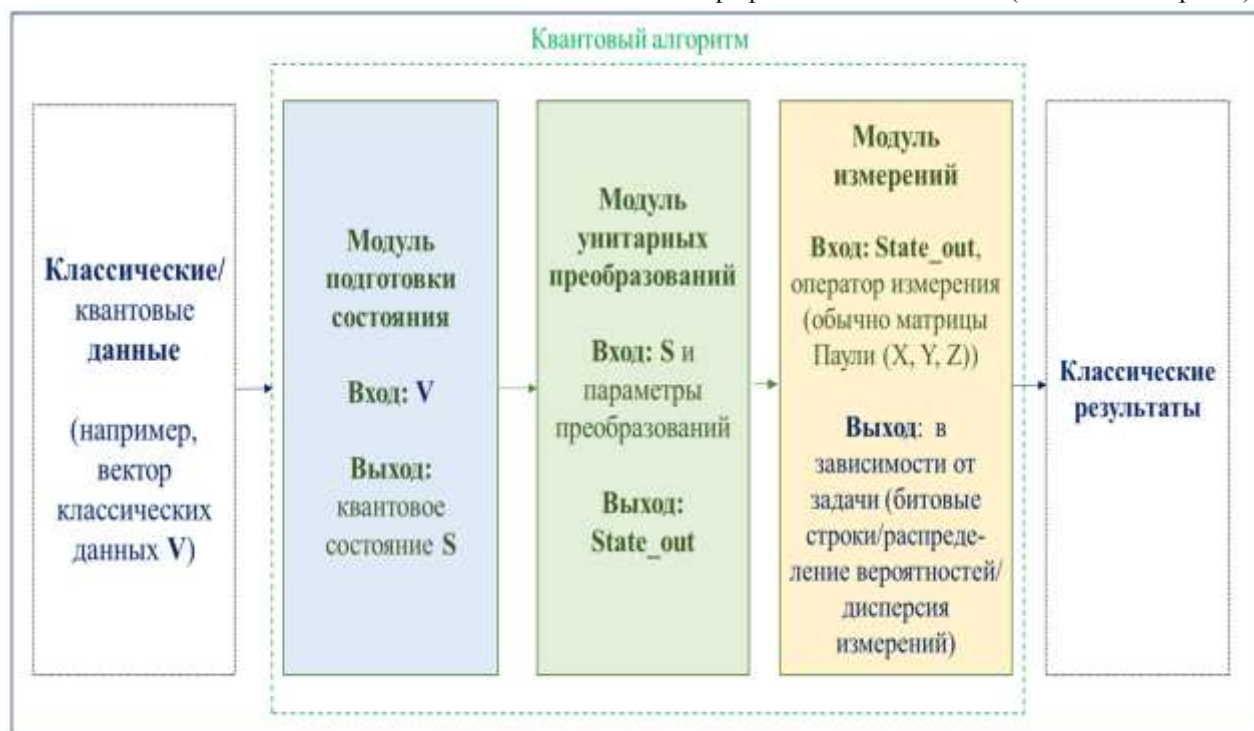


Рис. 2. Модульная архитектура квантовых алгоритмов (обобщенная схема)

III. КЛАССИФИКАЦИЯ ШАБЛОНОВ PENNYLANE

PennyLane предоставляет библиотеку предварительно закодированных шаблонов, которые можно использовать: для внедрения данных в квантовые состояния, для определения обучаемых слоев квантовых вентилей, для подготовки квантовых состояний в качестве первой операции в схеме, просто как общие подпрограммы, из которых строится схема.

Шаблоны PennyLane структурированы следующим образом:

- ✓ Шаблоны встраивания (Embedding templates) кодируют входные признаки в квантовое состояние схемы. Наиболее часто используемыми шаблонами являются AngleEmbedding и AmplitudeEmbedding. AngleEmbedding – это метод кодирования

специализированные шаблоны для выполнения квантовых арифметических операций (сложение, умножение, возведение в степень и другие) как с изменением исходного регистра, так и с сохранением исходных данных. Они сочетают квантовые гейты и классическую логику для эффективных вычислений.

- ✓ Шаблоны квантовой химии (Quantum Chemistry templates) – это специализированные шаблоны для моделирования квантово-химических систем и вычисления молекулярных свойств с использованием вариационных квантовых алгоритмов.
- ✓ Шаблоны тензорных сетей (Tensor Networks) – это математический и вычислительный инструмент для представления и манипуляции многомерными данными (тензорами) через их разложение в сеть связанных низкоранговых компонентов.

✓ Шаблоны других подпрограмм (Other Subroutines) представляют собой вспомогательные КА и процедуры (например, оператор диффузии Гровера, амплитудное усиление, оценка квантовой фазы и другие), которые могут использоваться в качестве строительных блоков для более сложных вычислений.

Все шаблоны поддерживают параметризацию для вариационных алгоритмов, интеграцию с автоматическим дифференцированием и совместимость с разными квантовыми устройствами.

параметризации шаблонов и корректности дифференцирования (при комбинации шаблонов с разными схемами дифференцирования следует явно указывать метод дифференцирования для всей схемы).

При параллельной композиции шаблонов, действующих на непересекающихся наборах кубитов, необходимо соблюдать принцип разделения кубитов (исключать их перекрытие между различными шаблонами), объединения выходов (результат должен быть тензорным произведением состояний) и учитывать особенности градиентов, которые вычисляются

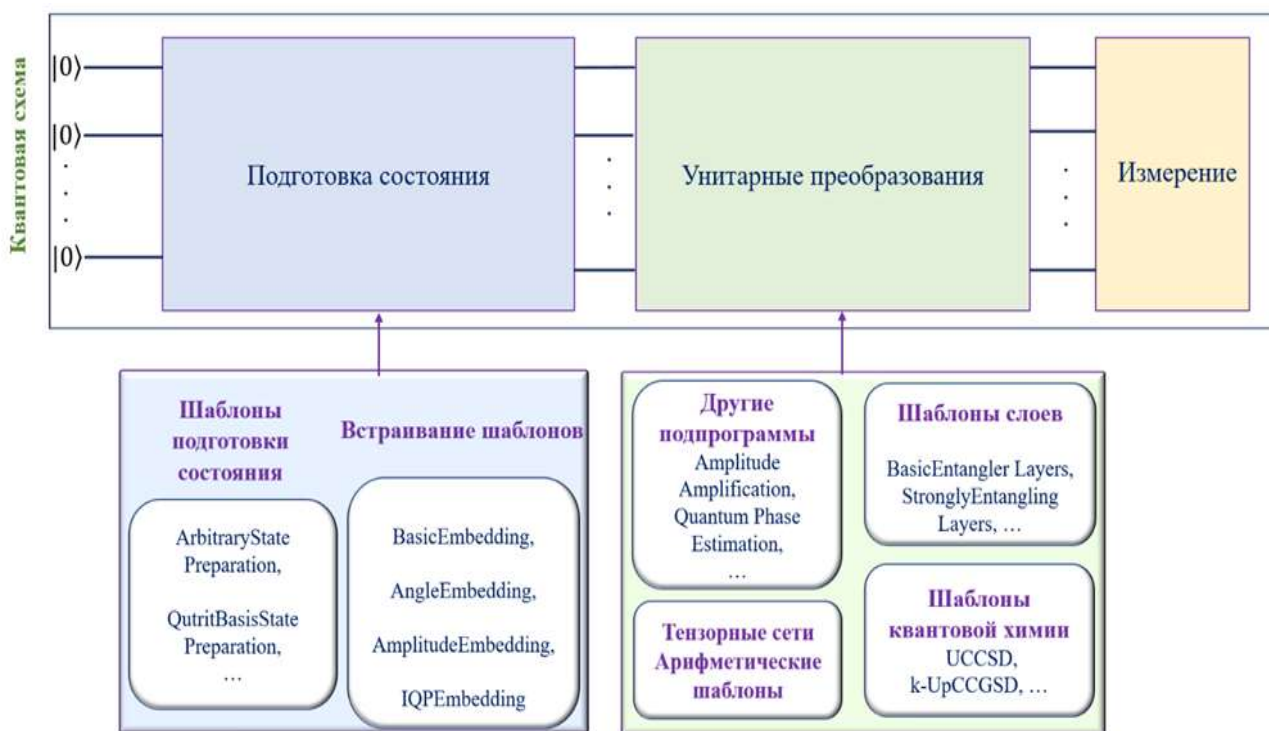


Рис. 3. Шаблоны PennyLane для разработки квантовых алгоритмов

На рисунке 3 показано, как стандартные шаблоны PennyLane интегрируются в основные модули квантовой схемы: инициализацию кубитов, унитарные преобразования и измерение результатов. Применение шаблонов в PennyLane требует строгого соблюдения формальных правил композиции, обеспечивающих корректное построение КС.

Основными из них являются: согласованность параметров по размерности тензоров и количеству кубитов, операционная совместимость при последовательном или параллельном преобразовании, а также соблюдение условий дифференцируемости для обеспечения корректного градиентного спуска в рамках автоматического дифференцирования.

В PennyLane каждый шаблон обладает строго определенными требованиями к форме входных параметров, требующими согласования между последовательно применяемыми операциями.

При последовательной композиции шаблонов в рамках единой квантовой схемы необходимо обеспечивать согласованность по числу кубитов (выходное состояние предыдущего шаблона должно соответствовать входным требованиям последующего). Особое внимание необходимо уделять порядку

независимо для каждого параллельно выполняемого блока.

Практическая верификация корректности комбинированных шаблонов требует последовательного выполнения нескольких процедур. Первоначально осуществляется анализ размерностей параметров и состояний перед выполнением КС. Затем проводится проверка операционной совместимости применяемых преобразований.

Завершающим этапом становится численная валидация градиентных вычислений.

Для автоматизации процесса проверки может быть использован встроенный валидатор PennyLane, а в случае выявления конфликтных ситуаций целесообразно применять стратегию вмешательства, предполагающую либо вставку нейтральных операций, либо декомпозицию проблемных шаблонов на элементарные операции с последующим явным контролем градиентных вычислений.

IV. КОНВЕЙЕРЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ

Конвейер анализа данных представляет собой систематизированный процесс обработки и анализа

данных, состоящий из нескольких последовательных этапов.

На начальном этапе происходит сбор данных из разнообразных источников.

На следующем этапе выполняется первичная обработка, фильтрация, преобразование и сжатие данных.

Этап анализа включает исследование подготовленных данных с целью выявления скрытых закономерностей, трендов, аномалий и взаимосвязей между признаками.

Создание прогностических и описательных моделей происходит на этапе моделирования.

Заключительный этап включает оценку точности моделей и анализ их значимости в контексте конкретной исследовательской или прикладной задачи.

аналитической обработки и моделирования, где КА могут обеспечить существенное ускорение решения определенных классов вычислительных задач по сравнению с классическими подходами.

Реализация таких гибридных конвейеров требует тщательного проектирования архитектуры системы и разработки специализированных протоколов обмена данными между классическими и квантовыми вычислительными модулями. Возможные варианты встраивания квантовых модулей в классические конвейеры анализа данных представлены на рисунке 4.

Наиболее комплексное решение, требующее особенно тщательного проектирования интерфейсов между компонентами, комбинирует классические и квантовые методы на всех этапах обработки данных и представляет собой «полностью гибридный конвейер».



Рис. 4. Варианты гибридных конвейеров анализа данных

Квантовые алгоритмы для задачи классификации

Подход/Алгоритм	Основная идея	Преимущества	Недостатки	Когда применять
Вариационные квантовые схемы	Гибридное обучение параметров квантовой схемы	Гибкость архитектуры, относительно малая глубина схем, подходит для NISQ-устройств	Проблема "баррен-плато" (исчезновение градиентов)	Основной метод для экспериментов на NISQ
Квантовая машина опорных векторов	Для вычисления функции ядра в высокоразмерном пространстве	Гарантированно находит глобальный оптимум благодаря выпуклости функции потерь	Требует O(N²) запусков	Исследование эффективности квантовых feature maps
Ансамблевый подход (One-vs-Rest, стратегия поверх VQC/QSVM)	Отдельные схемы для каждого класса	Высокая точность для многоклассовых задач	Высокая сложность реализации	Не подходит для большого числа классов

Рис. 5. Стратегии для решения задачи классификации с использованием КА

При построении гибридных квантово-классических конвейеров [18] крайне важным аспектом является определение точек интеграции квантовых модулей в классическую структуру конвейера.

Наибольший потенциал для интеграции квантовых методов анализа данных наблюдается на этапах

Вариант использования квантовых методов для предварительной обработки и преобразования данных (таких как квантовое снижение размерности или вычисление квантовых ядер) с последующим применением классических алгоритмов машинного обучения особенно эффективен для задач с высокой



Рис. 6. Схема гибридного конвейера машинного обучения для задачи классификации

размерностью признакового пространства. При работе с параметризованными квантовыми схемами и вариационными квантовыми классификаторами используются классические методы анализа данных, а квантовые алгоритмы чаще применяются на этапе построения предсказательной модели.

Квантовые методы наиболее органично внедряются в этапы анализа для выявления закономерностей, трендов, других значимых характеристик и моделирования

Вариационные квантовые схемы являются основным методом для экспериментов в эпоху NISQ [22].

В рамках данного исследования были разработаны гибридные конвейеры для двух стандартных наборов данных из репозитория `scikit-learn`¹, интегрирующие квантовые и классические методы машинного обучения для решения задачи классификации с использованием вариационного квантового классификатора [23].

Схема гибридного конвейера машинного обучения для задачи классификации для набора данных², состоящего из 178 образцов и 13 признаков представлена на рисунке 6.



Рис. 7. Квантовая схема для задачи классификации

(прежде всего в задачах квантового машинного обучения [19]).

V. РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОГО КОНВЕЙЕРА ДЛЯ ЗАДАЧИ КЛАССИФИКАЦИИ

Существуют различные стратегии для решения задачи классификации с использованием КА [20, 21] (см. рис. 5). Выбор конкретного метода зависит от характеристик задачи, доступных ресурсов и требований к точности.

Классические модули предобработки и анализа включают нормализацию данных и снижение размерности с помощью метода главных компонент (PCA) до 4 признаков.

Квантовая часть конвейера, представляющая собой параметризованную квантовую схему (см. рис. 7), разработана с использованием шаблонов PennyLane для углового кодирования данных и реализации квантовых слоев с сильной перепутывающей связью между кубитами.

¹ <https://scikit-learn.ru/stable/datasets.html>

² https://scikit-learn.ru/stable/modules/generated/sklearn.datasets.load_wine.html#sklearn.datasets.load_wine

Четырехкубитная схема начинается с этапа кодирования признаков через AngleEmbedding, где каждой компоненте соответствует один кубит. Для обеспечения корректного отображения в пространство параметров квантовых вентилей выполняется дополнительное масштабирование значений в интервал $[0, \pi]$. Вариационная часть схемы состоит из двух слоев параметризованных операций StronglyEntanglingLayers, комбинирующих вращения кубитов и сложную энтанглементацию между ними, что функционально аналогично скрытым слоям в классических нейронных сетях. Завершающий этап квантовых вычислений предполагает измерение ожидаемых значений операторов Паули Z для каждого кубита, дающее на выходе четыре вещественных значения в диапазоне от -1 до 1.

Классическая часть модели представляет собой многослойный перцептрон, принимающий на вход результаты квантовых измерений, с 8 и 3 нейронами соответственно, дополненный механизмом Dropout для предотвращения переобучения.

Выходной слой формирует вероятностные распределения по трем целевым классам.

Процесс обучения осуществляется с использованием оптимизатора Adam, адаптивно настраивающего шаг обучения для каждого параметра, в сочетании с функцией потерь на основе кросс-энтропии.

Оценка качества модели проводилась на тестовой выборке (20% исходных данных), для анализа использовались стандартные метрики классификации: Precision (точность), Recall (полнота) и F1-мера. Результаты показали, что модель демонстрирует высокую точность, варьирующуюся в пределах от 97.22% до 100% на тестовых данных (см. рис. 8).

высокой производительностью на задачах классификации и регрессии, особенно при работе с небольшими и средними наборами данных. В данном случае алгоритм случайный лес также показал точность, близкую к 100%, что соответствует результатам гибридного алгоритма, описанного выше.

VI. НАПРАВЛЕНИЕ ДАЛЬНЕЙШИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Важным направлением будущих исследований является изучение поведения гибридных конвейеров на более крупных наборах данных и с большим количеством кубитов. При увеличении количества кубитов возникает экспоненциальный рост гильбертова пространства, что теоретически должно усиливать выразительную способность модели. Однако на практике это обычно сопровождается рядом вычислительных сложностей. При запуске на КПС или квантовых устройствах параметризованные квантовые схемы, подобные использованным в исследовании, могут столкнуться с проблемой «баррен-плато», когда градиенты параметров становятся пренебрежимо малыми с ростом числа кубитов. Особый интерес представляет анализ того, как соотношение между классической и квантовой частями модели влияет на ее производительность при увеличении сложности задач. Важным практическим вопросом остается оптимальное распределение вычислительной нагрузки: какие преобразования данных эффективнее выполнять на классических процессорах, а какие – делегировать квантовому устройству. Этот баланс особенно важен при работе с реальными данными, где часто встречаются шумы и пропущенные значения. Ограниченная доступность квантовых устройств с большим числом кубитов делает многие эксперименты зависимыми от

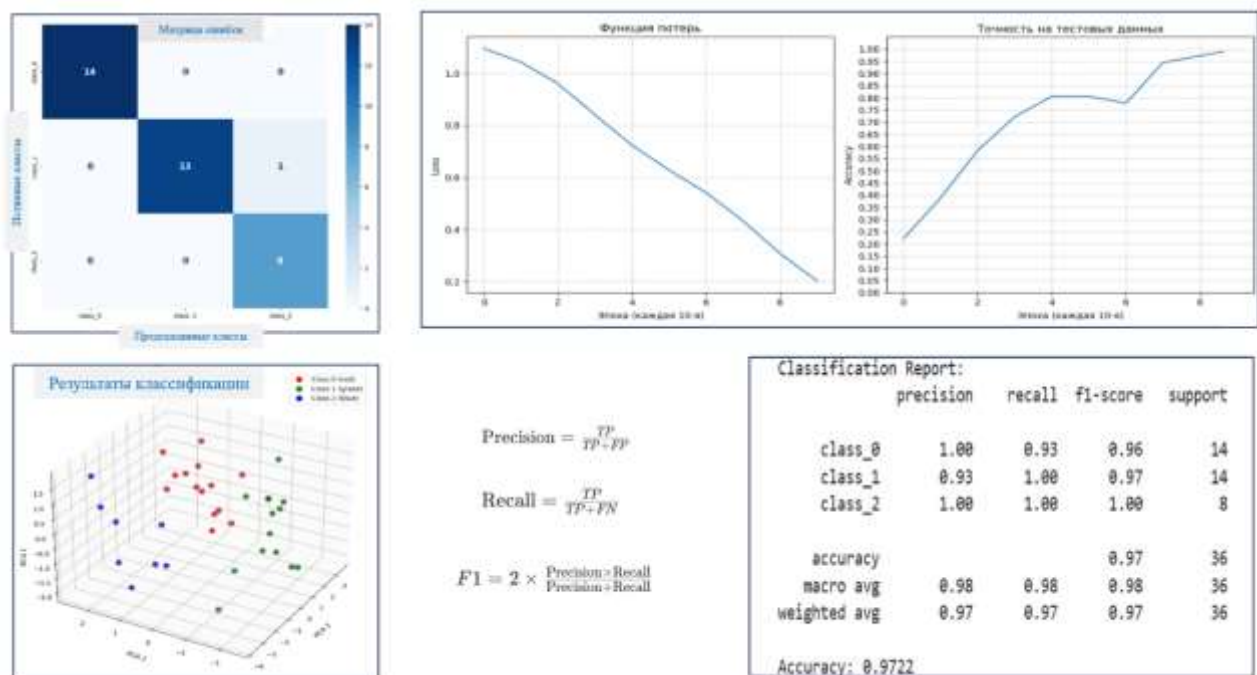


Рис. 8. Результаты классификации

Для сравнения эффективности гибридного алгоритма был выбран классический алгоритм случайного леса (Random Forest) [24]. Этот алгоритм известен своей

КПС (однако они не всегда точно воспроизводят поведение реальных квантовых процессоров и имеют ограниченное число кубитов). Но несмотря на все

перечисленные трудности и ограничения необходимо развивать теоретическую базу для понимания условий, при которых гибридные модели демонстрируют преимущество при решении задач обработки и анализа данных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данное исследование демонстрирует результативность структурного подхода к проектированию квантовых алгоритмов через композицию модулей. Была разработана и апробирована трехуровневая модель проектирования, обеспечивающая последовательный переход от формулировки предметной задачи к её реализации на квантовых симуляторах. Формализация правил композиции шаблонов фреймворка PennyLane позволила установить требования к корректному построению сложных квантовых схем из стандартизированных компонентов. Практической реализацией подхода стало создание гибридного квантово-классического конвейера для анализа данных, объединяющего параметризованные квантовые схемы и классические нейронные сети. Экспериментальная проверка на задаче классификации показала сопоставимую точность предложенного гибридного решения с лучшими классическими методами, что подтверждает принципиальную возможность интеграции квантовых модулей в существующие аналитические цепочки. Разработанный структурный подход и формализованные правила композиции создают основу для будущих стандартов проектирования квантового программного обеспечения, способствуя снижению порога вхождения для специалистов и ускорению внедрения квантовых вычислений в прикладные области.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Daley A. J. et al. Practical quantum advantage in quantum simulation // *Nature*. – 2022. – Vol. 607. – №. 7920. – P. 667–676. Available: <https://doi.org/10.1038/s41586-022-04940-6>
- [2] Bova F., Goldfarb A., Melko R. G. Commercial applications of quantum computing // *EPI quantum technology*. – 2021. – Vol. 8. – №. 1. – P. 2. Available: <https://doi.org/10.1140/epjqt/s40507-021-00091-1>
- [3] Miessen A. et al. Quantum algorithms for quantum dynamics. // *Nat Comput Sci*. – 2023. – Vol. 3. – Pp. 25–37 Available: <https://doi.org/10.1038/s43588-022-00374-2>
- [4] Bauer C. W. et al. Quantum simulation for high-energy physics // *PRX quantum*. – 2023. – Vol. 4. – №. 2. – P. 027001. Available: <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.4.027001>
- [5] Sajjan M., et al. Quantum machine learning for chemistry and physics. // *Chemical Society Reviews*. – 2022. – 51.15. Pp 6475–6573. Available: <https://doi.org/10.1039/D2CS00203E>
- [6] Bhuvanawari, S. et al. Computational analysis: unveiling the quantum algorithms for protein analysis and predictions. // *IEEE Access* 11. – 2023. – Pp 94023–94033. Available: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3310812>
- [7] Suo, J. et al. Quantum algorithms for typical hard problems: a perspective of cryptanalysis. // *Quantum Information Processing*. – 2020. – Vol.19. – №. 2 – P.6178. Available: <https://doi.org/10.1007/s11128-020-02673-x>
- [8] Guan W. et al. Quantum machine learning in high energy physics // *Machine Learning: Science and Technology*. – 2021. – Vol.2. – №. 1. – P. 011003. Available: <https://doi.org/10.1088/2632-2153/abc17d>
- [9] Leymann F. Towards a pattern language for quantum algorithms // *Quantum Technology and Optimization Problems: First International Workshop, QTOP 2019, Munich, Germany, March 18, 2019, Proceedings 1*. – Springer International Publishing. 2019. – P. 218–230. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1906.03082>
- [10] Weigold M. et al. Data encoding patterns for quantum computing // *Proceedings of the 27th Conference on Pattern Languages of Programs*. – 2020. – P. 1–11.
- [11] Weigold M. et al. Patterns for hybrid quantum algorithms // *Symposium and Summer School on Service-Oriented Computing*. – Cham: Springer International Publishing. 2021. – P. 34–51. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-030-87568-8_2
- [12] Bühler F. et al. Patterns for quantum software development // *Proceedings of the 15th International Conference on Pervasive Patterns and Applications*. – 2023. – P. 30–39. Available: https://www.iaas.uni-stuttgart.de/publications/Buehler2023_PatternsQuantumSE.pdf
- [13] Khan A. A. et al. Software architecture for quantum computing systems – A systematic review // *Journal of Systems and Software*. – 2023. – Vol.201. – P. 111682. Available: <https://doi.org/10.1016/j.jss.2023.111682>
- [14] Pérez-Castillo R. et al. A preliminary study of the usage of design patterns in quantum software // *Proceedings of the 2024 IEEE/ACM 5th International Workshop on Quantum Software Engineering*. – 2024. Pp. 41–48. Available: <https://doi.org/10.1145/3643667.36482>
- [15] Paltenghi M., Pradel M. A Survey on Testing and Analysis of Quantum Software. 2024. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.00650>
- [16] Zrelow P.V. et al. Evaluation of the capabilities of classical computers in the implementation of simulators of quantum algorithms. // *Software products and systems*. – 2022. – № 4, Vol.35, Pp. 618 – 630. Available: <http://doi.org/10.15827/0236-235X.140.618-630>
- [17] Bergholm V. et al. PennyLane: Automatic differentiation of hybrid quantum-classical computations. // *arXiv preprint 2018*. arXiv:1811.04968. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.04968>
- [18] Callison A., Chancellor N. Hybrid quantum-classical algorithms in the noisy intermediate-scale quantum era and beyond // *Physical Review A*. – 2022. – Vol. 106. – №. 1. – P. 010101. Available: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.010101>
- [19] Zeguendry A., Jarir Z., Quafafou M. Quantum machine learning: A review and case studies // *Entropy*. – 2023. – T. 25. – №. 2. – P. 287. Available: <https://doi.org/10.3390/e25020287>
- [20] McClean J.R. et al. The theory of variational hybrid quantum-classic algorithms // *New J. Phys.* – 2016. – Vol. 18, N. 2. P. 023023. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1509.04279>
- [21] Chalumuri A., Kune R., Manoj B. S. A hybrid classical-quantum approach for multi-class classification // *Quantum Information Processing*. – 2021. – Vol. 20. – №. 3. Available: <http://doi.org/10.1007/s11128-021-03029-9>
- [22] Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. // *Quantum*. 2018. – Vol.2. pp. 79. Available: <http://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
- [23] Cerezo M. et al. Variational quantum algorithms // *Nature Reviews Physics*. – 2021. – Vol. 3. – №. 9. – Pp. 625–644. Available: <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00348-9>
- [24] Biau G., Scornet E. A random forest guided tour // *Test*. – 2016. – Vol. 25. – №. 2. – Pp. 197–227. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1511.05741>

A structural approach to the design of quantum algorithms based on the composition of modules

P. V. Zrelov, O.V. Ivantsova

Abstract – This article explores a structured approach to designing quantum algorithms based on module composition. It argues for the need to develop high-level abstractions to reduce the cognitive barrier for specialists experienced with classical computing and to facilitate the active implementation of quantum methods in various subject areas. This article presents an analysis of modern quantum computing languages and platforms that support modularity through operation libraries and hybrid integration with classical programs. A methodology for the step-by-step design of quantum circuits is presented, consisting of a consistent transition from high-level templates to practical implementation on simulators and quantum computers. A technology for applying a modular approach is described, which allows the use of ready-made, optimized library functions, simplifying and accelerating algorithm development. The application of this methodology is illustrated by formalizing compositional rules for built-in templates of the PennyLane framework and creating a hybrid quantum-classical pipeline for data analysis. Practical testing of the proposed approach on a classification problem using machine learning methods demonstrated that its effectiveness is at least as good as the best classical solutions. The article discusses the potential for developing a structured approach as a basis for developing quantum software design standards. The practical value of the article's materials for specialists in the fields of quantum computing, machine learning, and data analysis is emphasized.

Keywords: hybrid quantum-classical computing, quantum algorithms, data analysis pipelines, modular approach, quantum algorithm design patterns, PennyLane.

REFERENCES

- [1] Daley A. J. et al. Practical quantum advantage in quantum simulation // *Nature*. – 2022. – Vol. 607. – №. 7920. – P. 667-676. Available: <https://doi.org/10.1038/s41586-022-04940-6>
- [2] Bova F., Goldfarb A., Melko R. G. Commercial applications of quantum computing // *EPJ quantum technology*. – 2021. – Vol. 8. – №. 1. – P. 2. Available: <https://doi.org/10.1140/epjqt/s40507-021-00091-1>
- [3] Miessen A. et al. Quantum algorithms for quantum dynamics. // *Nat Comput Sci*. – 2023. – Vol. 3. – Pp. 25–37 Available: <https://doi.org/10.1038/s43588-022-00374-2>
- [4] Bauer C. W. et al. Quantum simulation for high-energy physics // *PRX quantum*. – 2023. – Vol. 4. – №. 2. – P. 027001. Available: <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.4.027001>
- [5] Sajjan M., et al. Quantum machine learning for chemistry and physics. // *Chemical Society Reviews*. – 2022. – 51.15. Pp 6475–6573. Available: <https://doi.org/10.1039/D2CS00203E>
- [6] Bhuvanewari, S. et al. Computational analysis: unveiling the quantum algorithms for protein analysis and predictions. // *IEEE Access* 11. – 2023. – Pp 94023–94033. Available: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3310812>
- [7] Suo, J. et al. Quantum algorithms for typical hard problems: a perspective of cryptanalysis. // *Quantum Information Processing*. – 2020. – Vol.19. – №. 2 – P.6178. Available: <https://doi.org/10.1007/s11128-020-02673-x>
- [8] Guan W. et al. Quantum machine learning in high energy physics // *Machine Learning: Science and Technology*. – 2021. – Vol. 2. – №. 1. – P. 011003. Available: <https://doi.org/10.1088/2632-2153/abc17d>
- [9] Leymann F. Towards a pattern language for quantum algorithms // *Quantum Technology and Optimization Problems: First International Workshop, QTOP 2019, Munich, Germany, March 18, 2019, Proceedings 1*. – Springer International Publishing. 2019. – P. 218-230. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1906.03082>
- [10] Weigold M. et al. Data encoding patterns for quantum computing // *Proceedings of the 27th Conference on Pattern Languages of Programs*. – 2020. – P. 1–11.
- [11] Weigold M. et al. Patterns for hybrid quantum algorithms // *Symposium and Summer School on Service-Oriented Computing*. – Cham: Springer International Publishing. 2021. – P. 34–51. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-030-87568-8_2
- [12] Bühler F. et al. Patterns for quantum software development // *Proceedings of the 15th International Conference on Pervasive Patterns and Applications*. – 2023. – P. 30-39. Available: https://www.iaas.uni-stuttgart.de/publications/Buehler2023_PatternsQuantumSE.pdf
- [13] Khan A. A. et al. Software architecture for quantum computing systems – A systematic review // *Journal of Systems and Software*. – 2023. – Vol.201. – P. 111682. Available: <https://doi.org/10.1016/j.jss.2023.111682>
- [14] Pérez-Castillo R. et al. A preliminary study of the usage of design patterns in quantum software // *Proceedings of the 2024 IEEE/ACM 5th International Workshop on Quantum Software Engineering*. – 2024. Pp. 41–48. Available: <https://doi.org/10.1145/3643667.36482>
- [15] Paltenghi M., Pradel M. A Survey on Testing and Analysis of Quantum Software. 2024. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.00650>
- [16] Zrelov P.V. et al. Evaluation of the capabilities of classical computers in the implementation of simulators of quantum algorithms. // *Software products and systems*. – 2022. – № 4, Vol.35, Pp. 618 – 630. Available: <http://doi.org/10.15827/0236-235X.140.618-630>
- [17] Bergholm V. et al. PennyLane: Automatic differentiation of hybrid quantum-classical computations. // *arXiv preprint 2018*. arXiv:1811.04968. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.04968>
- [18] Callison A., Chancellor N. Hybrid quantum-classical algorithms in the noisy intermediate-scale quantum era and beyond // *Physical Review A*. – 2022. – Vol. 106. – №. 1. – P. 010101. Available: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.010101>
- [19] Zeguendry A., Jarir Z., Quafafou M. Quantum machine learning: A review and case studies // *Entropy*. – 2023. – T. 25. – №. 2. – P. 287. Available: <https://doi.org/10.3390/e25020287>
- [20] McClean J.R. et al. The theory of variational hybrid quantum-classic algorithms // *New J. Phys.* – 2016. – Vol. 18, N. 2. P. 023023. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1509.04279>
- [21] Chalumuri A., Kune R., Manoj B. S. A hybrid classical-quantum approach for multi-class classification // *Quantum Information Processing*. – 2021. – Vol. 20. – №. 3. Available: <http://doi.org/10.1007/s11128-021-03029-9>
- [22] Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. // *Quantum*. 2018. – Vol. 2. pp. 79. Available: <http://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
- [23] Cerezo M. et al. Variational quantum algorithms // *Nature Reviews Physics*. – 2021. – Vol. 3. – №. 9. – Pp. 625–644. Available: <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00348-9>
- [24] Biau G., Scornet E. A random forest guided tour // *Test*. – 2016. – Vol. 25. – №. 2. – Pp. 197-227. Available: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1511.05741>