

# Variational eigenvalue solver

量子变分求解器

刘昆承

中国科学技术大学

2024 年 11 月 7 日

Under the supervision of A.R. Feng

# 目录

## 1 背景

- 为什么要有?
- 发展过程
- 优越性

## 2 VQE算法

- 求解
- VQE求解分子基态能量
- 哈密顿量二次量子化
- Jordan-Wigner变换
- 酉耦合簇方法

## 3 基于量子变分电路实现VQE算法

- Trotter-Suzuki分解
- 流程
- $BeH_2$  VQE模拟结果

## 4 总结与展望

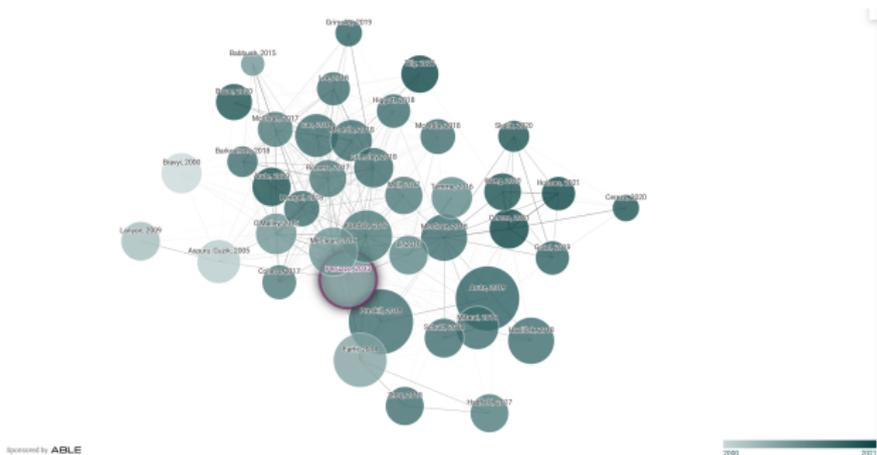
- 总结
- 展望

# 为什么要有量子变分电路？

- 一些算法量子计算效率高  $\xrightarrow{\hspace{10em}}$  硬件资源需求大 量子变分电路
- 采用量子 and 经典硬件混合的方式求解，显著降低对量子资源的需求。 $\rightarrow$  NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) 硬件可以集中处理问题中的复杂部分，
- 在量子化学，Heisenberg模型等方面有显著优势

# 发展过程

- k.Mitarai,M.Negoro等人提出，在近期量子处理器上进行机器学习的经典-量子混合算法，称之为量子电路学习。
- Marcello Benedetti等人认为量子变分电路可以看作表达能力较强的机器学习模型
- Peruzzo等人在2014年提出变分量子本征值求解VQE算法，基于光量子芯片实现



图· Peruzzo(2014)文献关系图

# 量子变分电路优势

通用容错的量子计算机可以执行Shor算法和Grover算法，但需要数百万量子比特和很好相干性

量子变分电路在有噪声的中性量子计算机上实现，可以在有限的相干时间执行有噪声操作。

量子变分电路参数可调，经典计算机迭代优化，这些参数可以看作是人工神经网络中的权值。并且可以模拟任何函数逼近，分类器

VQE对量乎误差有鲁棒性并且对相干时间要求相对较低，使该算法成为使用容错量子计算机之前可以超过经典计算机的潜在。

## Chapter2 VQE算法

薛定谔方程的解可表示为

$$\hat{H}_{mol}(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$\hat{H}_{mol}$ 是分子的哈密顿量 $\Psi(\vec{r}, t)$ 是系统的波函数， $E$ 是能量特征值

- 波函数的大小随粒子数呈指数增长，
- 计算薛定谔方程的精确解计算资源也会随着分子的大小呈指数增长
- 利用VQE优化变分电路参数可以用较少资源得到特征值和特征向量

方法：给定一个不知道最小特征值的Hermitian矩阵 $H$  假设其最小特征值为 $\lambda_{min}$ ，对应特征态为 $|\psi_{min}\rangle$ ，VQE提供估计值 $\lambda_{\theta}$ 通过优化逼近 $\lambda_{min}$

即 $\hat{H}$ 在 $\psi(\theta)$ 下表象:

$$\langle \Psi(\theta) | \hat{H} | \Psi(\theta) \rangle = \lambda_\theta \geq \lambda_{min} \quad (2)$$

其中 $\hat{H}$ 是Hermitian阵, 有 $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ , 特征值满足 $\lambda_i = \lambda_j^*$ , Hermitian阵可以表示为

$$H = \sum_i^N \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (3)$$

则H在 $\psi$ 态上的期望可以表为:

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) | \psi \rangle \quad (4)$$

$$= \sum_{i=1}^N \lambda_i \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 \quad (5)$$

而式5说明在任意 $\psi$ 态下观测的期望可以表为相关特征值的线性组合。则:

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | H | \psi \rangle \geq \lambda_{min} \quad (6)$$

则6为所谓变分法，期望最小值为特征值最小值，H为哈密顿量时，为基态能量

- 在化学中描述系统的基态能量就是分子的Hermite阵的最小特征值。
- 量子相位估计算法来寻找最小特征值，然而它的硬件实现所需要的电路深度和资源超过NISQ时代可用硬件的限制
- 2014年，peruzzo等人提出了VQE算法，可以用更浅的电路和资源实现基态能量估算

核电荷 $Z_i$ 和一些电子，H可以二次量子化表示为：

$$H = -\sum_i \frac{\nabla_{\vec{R}_i}^2}{2M_i} - \sum_i \frac{\nabla_{\vec{r}_i}^2}{2} - \sum_{i,j} \frac{Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (7)$$

$\vec{R}_i, M_i, Z_i$ 分别表示空间坐标距离、质量和电荷。采用Born-Oppenheimer近似，因为原子核质量远大于电子，可以分开处理

引入产生湮灭算符可以化简7

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s \quad (8)$$

$h_{pq}$ ,  $h_{pqrs}$  是电子自旋轨道确定的常数,  $pqrs$  是自旋轨道  $\sum_{pq} h_{pq}$  为单粒子算符系数  $\sum_{pqrs} h_{pqrs}$  为双粒子算符系数  $h_{pq}$ ,  $h_{pqrs}$  有:

$$h_{pq} = \int d\sigma \varphi_p^*(\sigma) \left( \frac{-\nabla_R^2}{2} - \sum_i \frac{Z_i}{|R_i - r|} \right) \varphi_q(\sigma) \quad (9)$$

$$h_{pqrs} = \int d\sigma_1 d\sigma_2 \frac{\varphi_p^*(\sigma_1) \varphi_q^*(\sigma_2) \varphi_s(\sigma_1) \varphi_r(\sigma_2)}{|r_1 - r_2|} \quad (10)$$

$Z_i$  核电荷,  $\sigma_i$  电子空间位置和自旋,  $\varphi_s$ ,  $\varphi_r$  电子不同轨道波函数  $r_i$  表示电子位置

算符 $a$ ,  $a^\dagger$ , 有对易关系:

$$\{a_p^\dagger a_r\} = a_p^\dagger a_r + a_r a_p^\dagger = \delta_{p,r} \quad (11)$$

$$\{a_p^\dagger a_r^\dagger\} = \{a_p a_r\} = 0 \quad (12)$$

可以通过Jordan-Wigner变换子映射到量子比特上

Jordan-Wigner变换可以用于自旋算符与费米子的产生算符 $a^\dagger$ 和湮灭算符 $a$ 之间的相互转换，如一个系统有向上和向下量子态 $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$ 可以看做单粒子费米子系统两种状态，可表示为：

$$|\uparrow\rangle = a^\dagger |0\rangle \quad (13)$$

$$|\downarrow\rangle = |0\rangle \quad (14)$$

产生算符 $a^\dagger$ 和湮灭算符 $a$ 之间有对易关系

$$\{a^\dagger, a\} = 1 \quad (15)$$

$$\{a^\dagger, a^\dagger\} = \{a, a\} = 0 \quad (16)$$

自旋向上算符和自旋向下算符的矩阵表达形式为：

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (17)$$

=

有对易关系:

$$[S_\alpha, S_\beta] = iS_\gamma \quad (18)$$

$\alpha, \beta, \gamma$ 为 $x, y, z$ 的齐次轮换关系, 则 $S_x, S_y$ 在 $S_z$ 表象( $|+\rangle, |-\rangle$ )为

$$S_x = \frac{1}{2} (|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|) = \frac{1}{2} (S^+ + S^-) = \frac{1}{2} (a^\dagger + a) \quad (19)$$

$$S_y = \frac{1}{2} (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|) = \frac{1}{2} (S^+ - S^-) = \frac{1}{2} (a^\dagger - a) \quad (20)$$

由18、20得到,

$$S_z = a^\dagger a - \frac{1}{2} \quad (21)$$

在多自旋系统在费米子上添加一个相位因子 $\phi_j$ 同样可以Jordan-Wigner变换，表示为：

$$S_j^+ = a_j^\dagger e^{i\phi_j} \quad (22)$$

其中相位算符 $\phi_j$  包含所有占据在j 位置左侧的费米子的和：

$$\phi_j = \pi \sum_{l < j} n_l \quad (23)$$

因此我们可以得到多自旋的Jordan-Wigner 变换可以表示为：

$$S_j^+ = a_j^\dagger e^{i\pi \sum_{l < j} n_l} \quad (24)$$

$$S_j^- = a_j^\dagger e^{-i\pi \sum_{l < j} n_l} \quad (25)$$

$$S_j^z = a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \quad (26)$$

- 耦合簇(Coupled Cluster,CC)是一种数值技术，经常用来描述物理多体系统
- 采用酉耦合簇方法制备初始的试验态
- 耦合簇理论给出了求解与时间无关的薛定谔方程近似解的方法

与时间无关的定态薛定谔方程可以表示为：

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (27)$$

耦合簇理论的波函数可以写成指数拟设 (ansatz)：

$$|\psi\rangle = e^T|\phi\rangle \quad (28)$$

其中是Hartree-Fork基态，T是簇算符，可以表示成：

$$T = T_1 + T_2 + T_3 + \dots \quad (29)$$

$T_1$ 表示所有的单激发算符， $T_2$ 表示所有的双激发算符，更高激发略去。  
仅考虑单激发算符和双激发算符，指数耦合算符 $e^T$ 可以泰勒展开为：

$$e^T = 1 + \hat{T} + \frac{1}{2!}\hat{T}^2 + \dots \quad (30)$$

$$= 1 + T_1 + T_2 + \frac{1}{2}T_1^2 + T^1T^2 + \frac{1}{2}T_2^2 \quad (31)$$

二次量子化之后，激发算符被表示为：

$$T_1 = \sum_p \sum_q t_{pq} a_p^\dagger a_q \quad (32)$$

$$T_2 = \sum_{p,q} \sum_{r,s} t_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s \quad (33)$$

$p, q, r, s$ 表示轨道数， $t_{pq}, t_{pqrs}$ 表示优化算法所要优化的系数。

将非酉算符 $e^T$ 酉化，即酉耦合簇方法(UCC)用来构造量子线路（线路要酉算符）

$$|\psi_{UCC}\rangle = e^{T-T^\dagger} |\psi\rangle \quad (34)$$

酉算符 $U = e^{T-T^\dagger}$ 是时间演化算子，令 $U = e^{-iH}$ ， $H$ 是等效哈密顿量

# 哈密顿量泡利算子形式

费米子哈密顿量通过J-W变换变成泡利算子形式时，它是若干子项的和，表达式为：

$$\hat{H} = \sum_{i\alpha} h_{\alpha}^i \sigma_{\alpha}^i + \sum_{ij\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ij} \sigma_{\alpha}^i \sigma_{\beta}^j + \dots \quad (35)$$

其中 $h_{\alpha}^i$ 和 $h_{\alpha\beta}^{ij}$ 是实数， $\sigma$ 是泡利算子， $i,j$ 表示哈密顿量子项所作用的子空间。可观测量是线性的，可得：

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (36)$$

$$= \sum_{i\alpha} h_{\alpha}^i \langle \sigma_{\alpha}^i | \psi \rangle \langle \psi | \sigma_{\alpha}^i \rangle + \sum_{ij\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ij} \langle \psi | \sigma_{\alpha}^i \sigma_{\beta}^j | \psi \rangle \quad (37)$$

# 过程

VQE过程为

- 在量子计算机上制备一个量子态 $|\psi(\theta_0)\rangle$ ,  $\theta$ 是可以任意调节的量子门参数
- 经过电路测量期望 $\langle \psi | H | \psi \rangle$
- 在经典计算机利用算法（如Nelder-Mead）优化 $\theta$ ，降低期望 $\langle \psi | H | \psi \rangle$
- 将新 $\theta$ 带入电路，重复，直到期望 $\langle \psi | H | \psi \rangle$ 收敛。

即有：

$$E = \frac{\langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle} \geq E_0 \quad (38)$$

$E_0$ 为最小能量，此时 $|\psi(\theta)\rangle = |\psi_{min}\rangle$ 可得H的基态

# Trotter-Suzuki分解

在酉耦合簇方法和J-W变换将费米子映射到量子比特之后，用Trotter-Suzuki分解将 $U(\theta) = e^{-iHt}$ 编译成一系列的基本门 if  $H = \sum_{j=1}^m H_j$  是哈密顿量，Trotter-Suzuki分解：

$$e^{-i\sum_{j=1}^m H_j t} = \prod_{j=1}^m e^{-iH_j t} + O(m^2 t^2) \quad (39)$$

- if  $t \ll 1$ ，误差就可以忽略不计。
- if  $t$ 较大  $\xrightarrow{\text{分解}}$  TrotterSuzuki分解为一系列短时间步

## 消U(t)误差项

$t$ 较大, 令 $r$ 为演化步数, 每个时间步长运行时间为 $\frac{t}{r}$ 得:

$$e^{-i\sum_{j=1}^m H_j t} = \left( \prod_{j=1}^m e^{-iH_j \frac{t}{r}} \right) + O\left(\frac{m^2 t^2}{r^2}\right) \quad (40)$$

构造一个算子指数序列更精确的近似, 消误差项即得到二级Trotter-Suzuki公式

$$U(t) = \left( \prod_{j=1}^m e^{-\frac{iH_j t}{2r}} \prod_{j=m}^1 e^{-\frac{iH_j t}{2r}} \right) = e^{-iHt} + O\left(\frac{m^3 t^3}{r^3}\right) \quad (41)$$

对任意 $\epsilon > 0$ , 可让 $r > \frac{m^{\frac{3}{2}} t^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\epsilon}}$  可使 $\frac{m^3 t^3}{r^3} < \epsilon$

就此VQE流程为

- 制备初始态, Hatree-Fock态
- 用耦合簇法, J-W变换将费米子映射到量子比特
- Trotter-Suzuki分解编译 $e^{-iHt}$ 的基本门
- 测量当前量子态下的平均能量 $E_0$
- 优化参数 $\theta$
- 循环迭代
- $\Delta E$ 小于阈值 $\rightarrow E$ 收敛到 $E_0$

# 模拟结果

BeH<sub>2</sub> VQE模拟结果

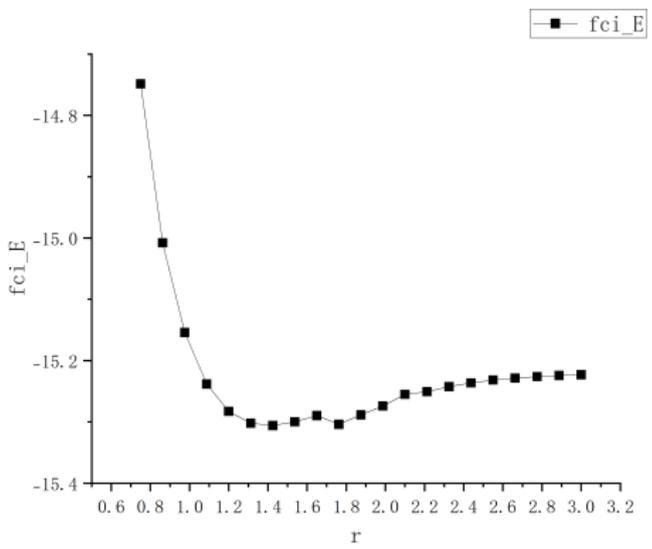


图: fci\_E - r

# 总结

- VQE算法是算法是基于量子变分电路的量子经典混合算法
- VQE可在NISQ中实现不需要太深的电路，和太长相干时间
- VQE成功解决了一些化学、组合优化、机器学习等问题

# 展望

## 光量子计算机优势

- 光子是中性粒子没有强相互作用
- 在光纤中长距离低损耗传输
- 低延迟，易组合
- 以非线性介质为媒介，可以光子相互作用

## 不足

- 最好的非线性Kerr介质能力也很弱，不好调制相位，用传统非线性光学器件建造量子计算机前景不乐观
- 虽然稳定光学干涉可行，但如果实现大规模量子算法所要的多重互锁干涉仪也是有挑战性
- 基于光学的量子电路可编程能力较弱

# References