

Вариационные квантовые алгоритмы для расчета молекул

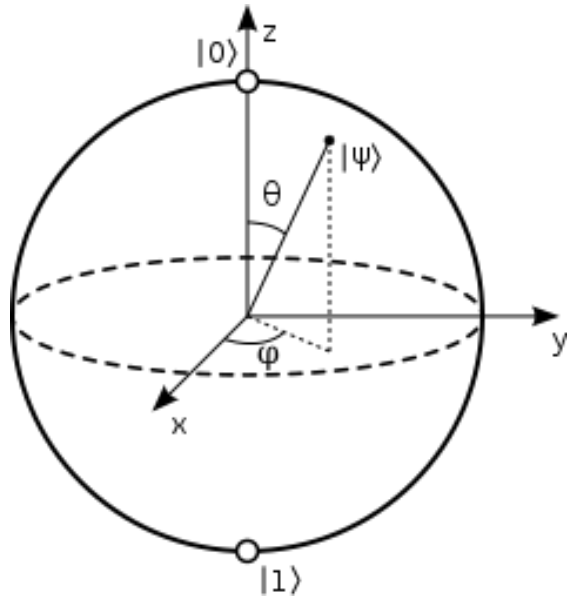
Захаров Р.В.

Quantum Chemistry Calculations on a Trapped-Ion Quantum Simulator

Cornelius Hempel, Christine Maier et al

Phys. Rev. X 8, 031022 – Published 24 July 2018

Состояние кубита на сфере Блоха



$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$\alpha = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\beta = e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Вероятности:

$$P_0 = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$P_1 = \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Удобно обозначать:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pauli-X gate

$$X \equiv NOT = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

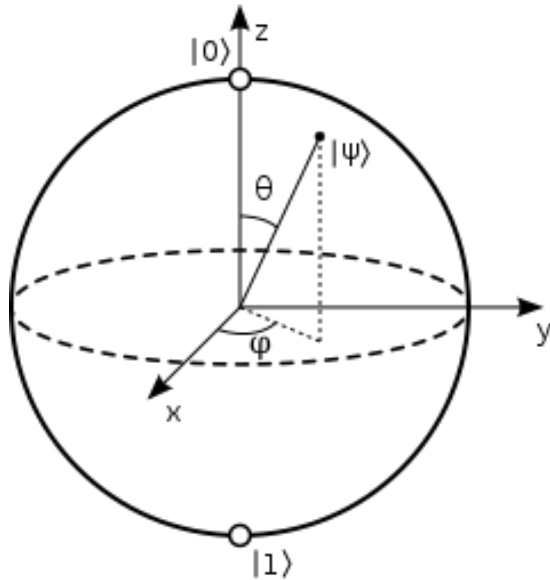


The Pauli X gate is a π -rotation around the X axis and has the property that $X \rightarrow X, Z \rightarrow -Z$. Also referred to as a bit-flip.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$X(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle)$$



$$X^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Hadamard gate

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

$$|1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$$



The Hadamard gate has the property that it maps $X \rightarrow Z$, and $Z \rightarrow X$. This gate is required to make superpositions.

- Hadamard gate produces quantum superpositions
- Rotation on π around x-axis followed by rotations on $\pi/2$ around y-axis

Measurements



Measurement in the computational (standard) basis (Z).



$$|0\rangle \rightarrow |1\rangle$$



$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

In general case

$$\cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2)|1\rangle$$

Using multiple measurements, we can extract *theta*, but not *phi*

Measurements



Measurement in the computational (standard) basis (Z).

In general case

$$\cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2)|1\rangle$$

By measuring in X basis, we can extract also ϕ . Apply H before the standard measurement



The state of the qubit after H:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \right) |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} - e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \right) |1\rangle$$

The probability to measure 0:

$$\frac{1 + \cos \phi \sin \theta}{2}$$

Pauli-Y gate

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Y

The Pauli Y gate is a π -rotation around the Y axis and has the property that $X \rightarrow -X, Z \rightarrow -Z$. This is both a bit-flip and a phase-flip, and satisfies $Y = XZ$.

Pauli-Z gate

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Z

The Pauli Z gate is a π -rotation around the Z axis and has the property that $X \rightarrow -X, Z \rightarrow Z$. Also referred to as a phase-flip.

$$XY - YX = 2iZ$$

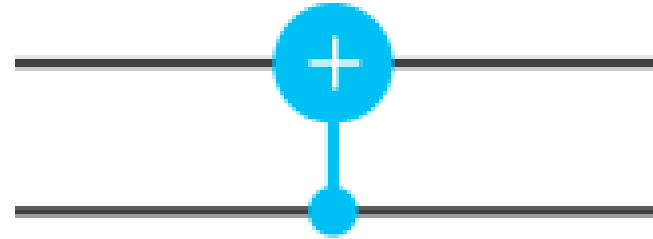
$$YZ - ZY = 2iX$$

$$ZX - XZ = 2iY$$

Two-qubit gate CNOT

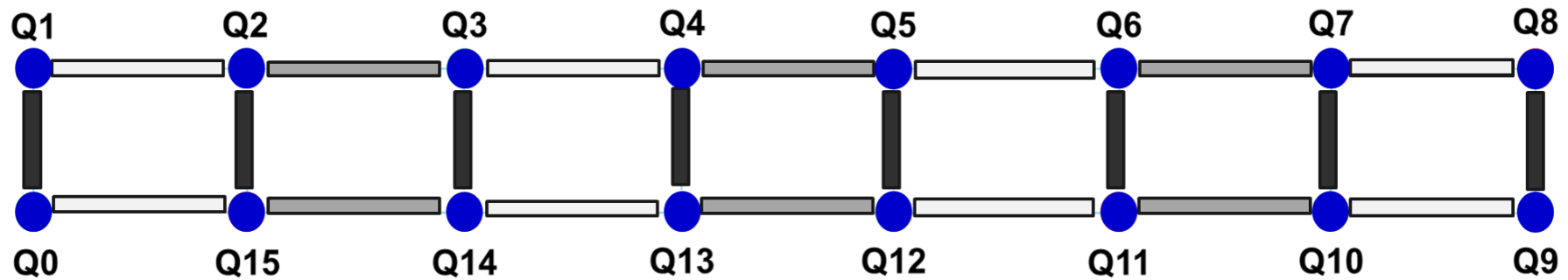
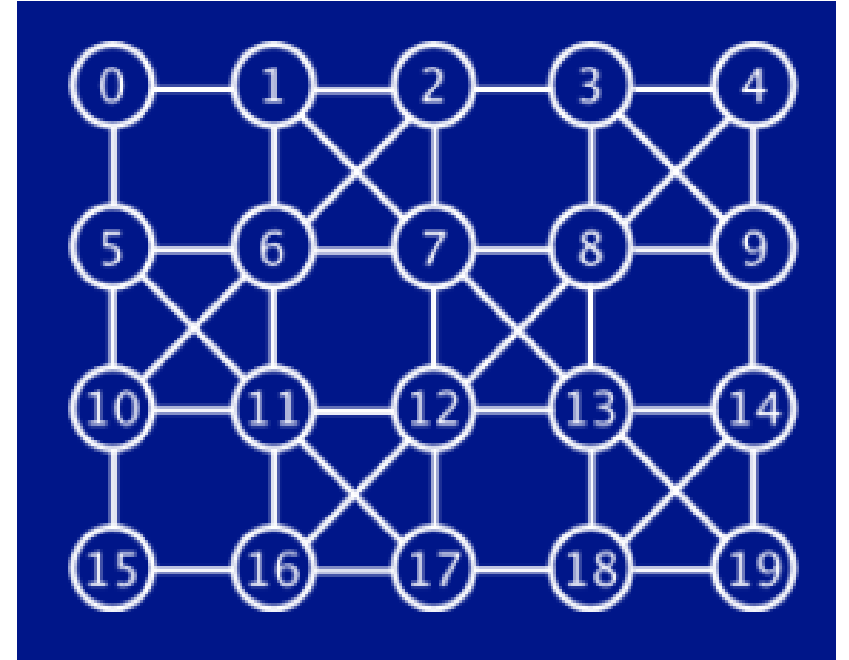
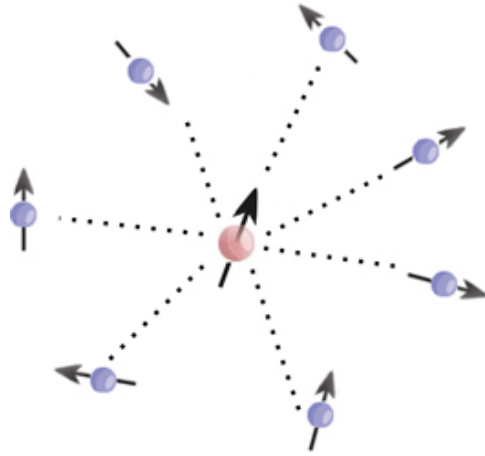
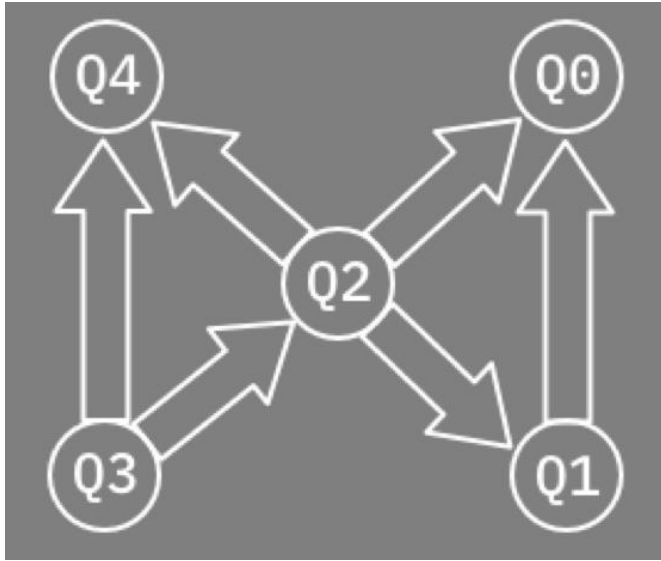


Controlled-NOT gate: a two-qubit gate that flips the target qubit (i.e. applies Pauli X) if the control is in state 1. This gate is required to generate entanglement and is the physical two qubit gate.



- Control qubit and target qubit
- CNOT does not change the state of the target qubit provided control qubit is in the state 0
- CNOT inverts the state of the target qubit provided control qubit is in the state 1

CNOT - различные реализации



Идея вариационного алгоритма поиска собственных значений

- Матрица H , большой размерности
- Цель – найти собственные значения

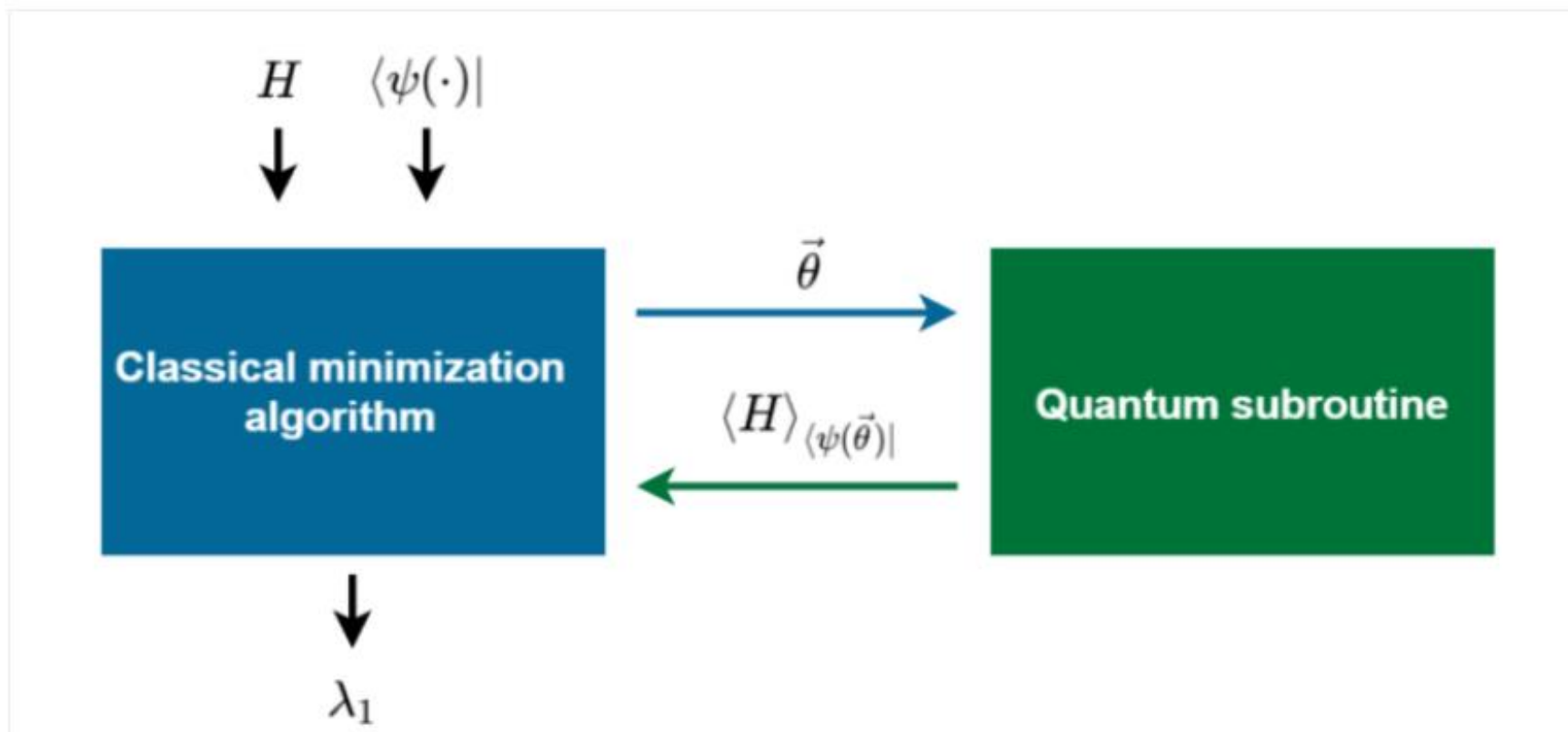
$$\langle H \rangle_{|\psi(\vec{\theta})\rangle} = \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle \quad \langle H \rangle_{|\psi(\vec{\theta})\rangle} \geq \lambda_1 .$$

Минимальное среднее – собственное значение

Для следующих значений

$$F(\theta_k) := \langle \psi(\theta_k) | H | \psi(\theta_k) \rangle + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i \left| \langle \psi(\theta_k) | \psi(\theta_i) \rangle \right|^2$$

Общая схема



Поиск энергий молекул

$$H = - \sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{2M_i} - \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{2} - \sum_{i,j} \frac{Z_i}{|R_i - r_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{Z_i Z_j}{|R_i - R_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{1}{|r_i - r_j|},$$

$$H_2 = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s$$

$$h_{pq} = \int d\sigma \phi_p^*(\sigma) \left(\frac{\nabla_r^2}{2} - \sum_i \frac{Z_i}{|R_i - r|} \right) \phi_q(\sigma)$$

$$h_{pqrs} = \int d\sigma_1 d\sigma_2 \frac{\phi_p^*(\sigma_1) \phi_q^*(\sigma_2) \phi_s(\sigma_1) \phi_r(\sigma_2)}{|r_1 - r_2|}.$$

Как связать фермионные операторы с кубитами?

- Тривиальный метод – сопоставить состоянию кубита одноэлектронное состояние

$$a_j^\dagger = \sigma_j^+ \quad a_j = \sigma_j^-$$

- Правильное коммутация внутри 1 уровня

$$\{a_j^\dagger, a_j\} = 1$$

- Не те коммутационные правила для разных уровней

(должен быть антикоммутатор 0 для фермионов)

$$[a_i^\dagger, a_j] = 0 \quad i \neq j$$

Jordan-Wigner transformation

- Пронумеруем все кубиты и введем

$$a_j^\dagger = \sigma_j^+ \prod_{k=1}^{j-1} (-\sigma_k^z) \quad a_j = \sigma_j^- \prod_{k=1}^{j-1} (-\sigma_k^z)$$

- Выполняются нужные коммутационные соотношения

$$\{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{ij} \quad \{a_i, a_j\} = 0 \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$$

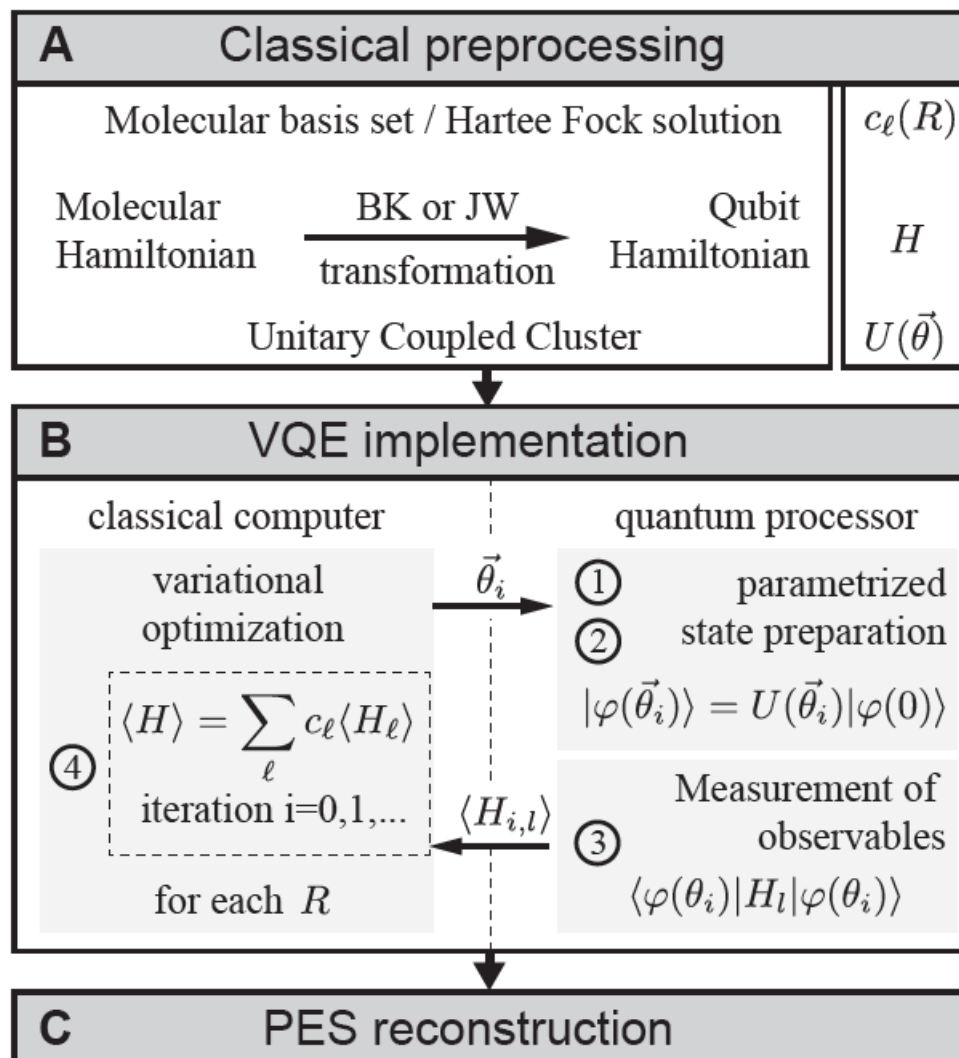
Разложение Гамильтониана

$$H = \sum c_l H_l \quad \longleftarrow \quad H_2 = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s$$

$$\begin{aligned} H^{\text{JW}} = & c_0 \mathcal{I} + c_1 (\sigma_0^z + \sigma_1^z) + c_2 (\sigma_2^z + \sigma_3^z) + c_3 \sigma_3^z \sigma_2^z \\ & c_4 \sigma_1^z \sigma_0^z + c_5 (\sigma_2^z \sigma_0^z + \sigma_3^z \sigma_1^z) + c_6 (\sigma_2^z \sigma_1^z + \sigma_3^z \sigma_0^z) \\ & + c_7 (\sigma_3^x \sigma_2^y \sigma_1^y \sigma_0^z + \sigma_3^y \sigma_2^x \sigma_1^x \sigma_0^y) \\ & - c_7 (\sigma_3^x \sigma_2^x \sigma_1^y \sigma_0^y + \sigma_3^y \sigma_2^y \sigma_1^x \sigma_0^x), \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

$$\begin{aligned} H^{\text{BK}} = & c_0 \mathcal{I} + c_1 \sigma_0^z + c_2 \sigma_1^z \\ & + c_3 \sigma_0^z \sigma_1^z + c_4 \sigma_0^x \sigma_1^x + c_5 \sigma_0^y \sigma_1^y \end{aligned}$$

Общий алгоритм



Эволюция состояния

$$U_{\text{UCC}}(\vec{\theta}) = e^{\{\sum_{\gamma} \theta_{\gamma}(T_{\gamma} - T_{\gamma}^{\dagger})\}} \approx \prod_{\gamma} e^{\theta_{\gamma}(T_{\gamma} - T_{\gamma}^{\dagger})}$$

Цель: создать эволюцию, которая будет вести состояние на входе к основному

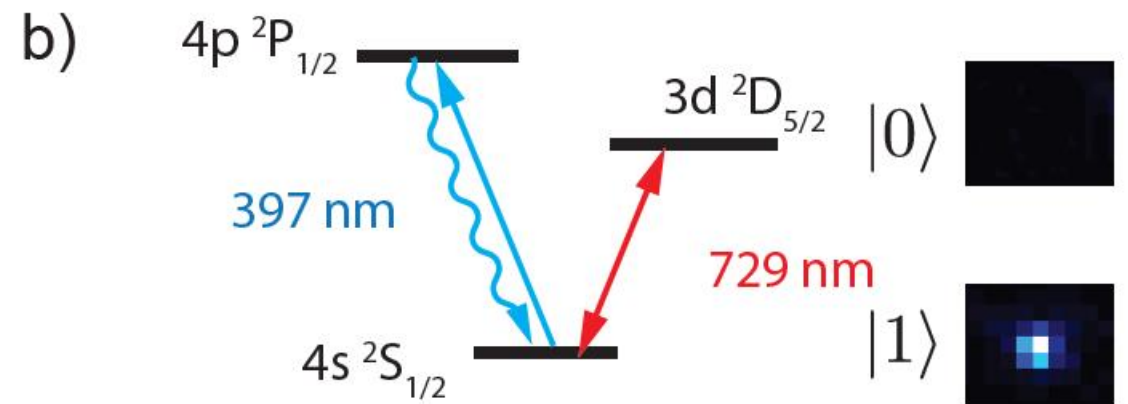
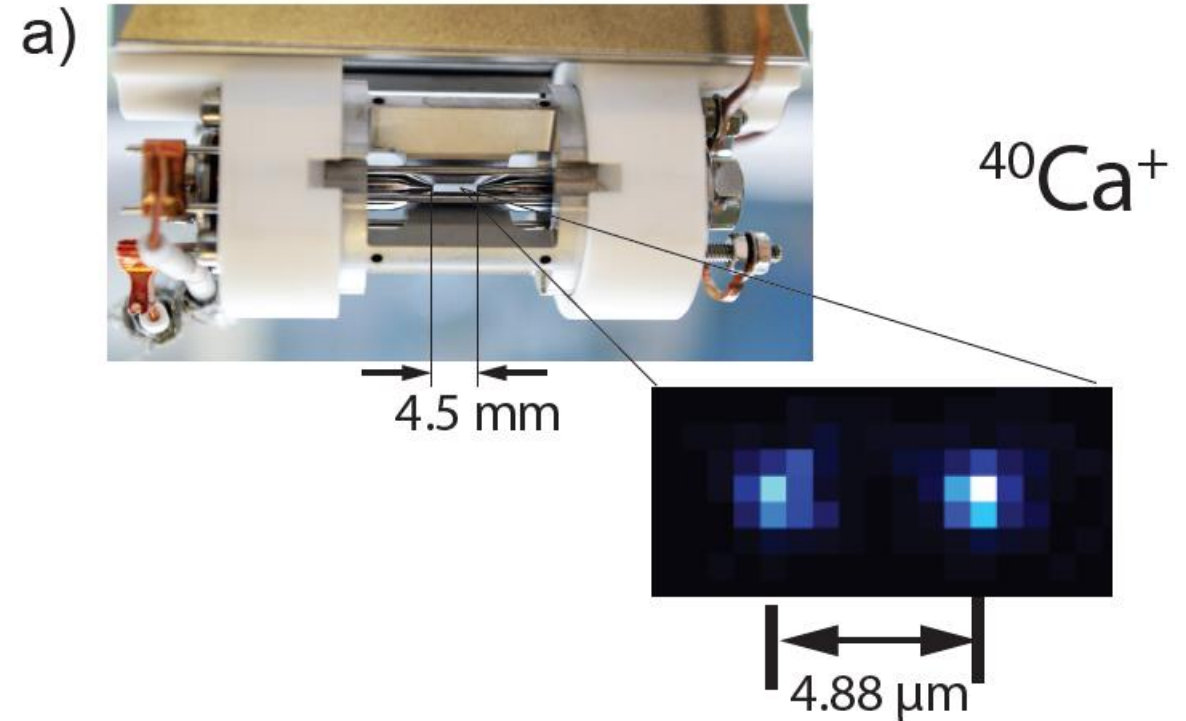
$$T_1 = \sum_{pr} t_p^r \hat{a}_p^{\dagger} \hat{a}_r$$

$$T_2 = \sum_{pqrs} t_{pq}^{rs} \hat{a}_p^{\dagger} \hat{a}_q^{\dagger} \hat{a}_r \hat{a}_s$$

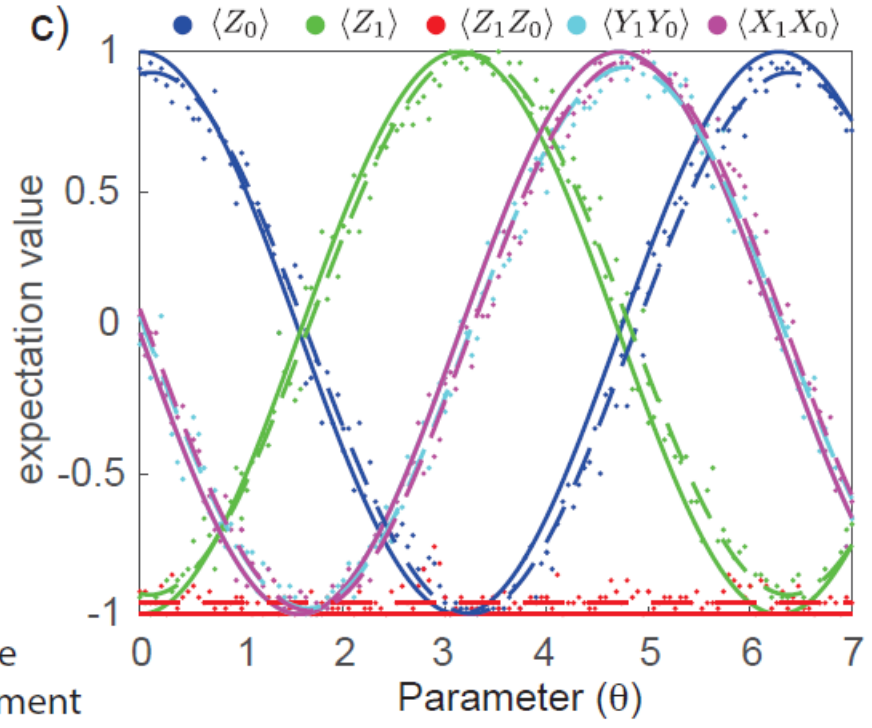
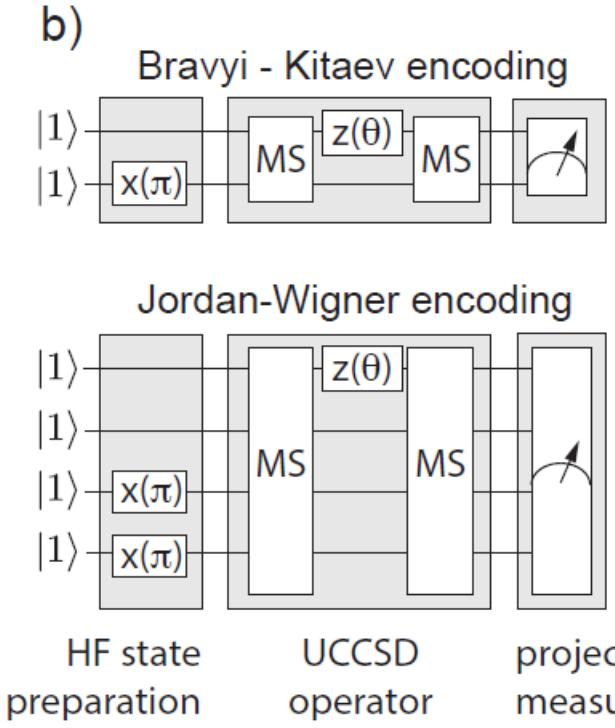
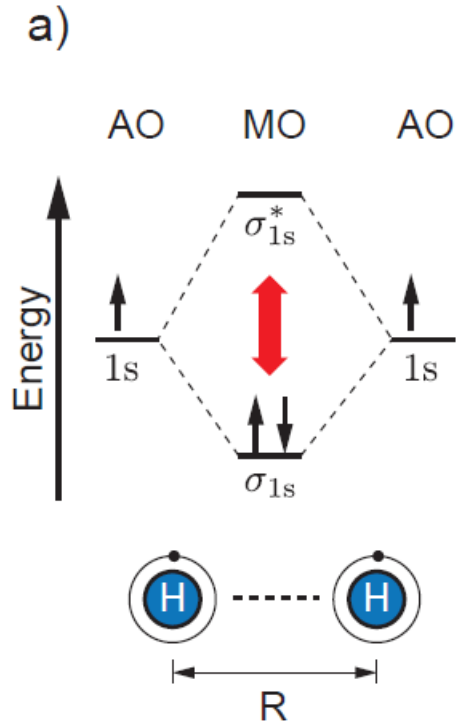
Система кубитов

Ионы Ca^+

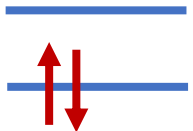
$$|0\rangle = |\uparrow\rangle = |3d^2D_{5/2} (m = +3/2)\rangle$$
$$|1\rangle = |\downarrow\rangle = |4s^2S_{1/2} (m = +1/2)\rangle.$$



Моделирование молекулы H2



Эволюция состояния для молекулы H2



$$U_{\text{UCC}}(\vec{\theta}) = e^{\{\sum_{\gamma} \theta_{\gamma} (T_{\gamma} - T_{\gamma}^{\dagger})\}} \approx \prod_{\gamma} e^{\theta_{\gamma} (T_{\gamma} - T_{\gamma}^{\dagger})}$$

Цель: создать эволюцию, которая будет вести наше состояние к основному

$$U_{\text{UCCSD}}(\theta) = e^{\theta(a_2^{\dagger} a_3^{\dagger} a_1 a_0 - a_0^{\dagger} a_1^{\dagger} a_3 a_2)}$$

Синглетные возмущения являются в новом базисе просто поворотами и не требуют квантового контура

$$U_{\text{UCCSD}}^{\text{JW}}(\theta) = e^{-i\theta\sigma_3^x\sigma_2^x\sigma_1^x\sigma_0^y} \quad |\varphi(0)_{\text{JW}}\rangle = |0011\rangle$$

$$U_{\text{UCCSD}}^{\text{BK}}(\theta) = e^{-i\theta\sigma_2^x\sigma_0^y} \quad |\varphi(0)_{\text{BK}}\rangle = |01\rangle$$

Более оптимальный метод преобразования базиса от кубитного к фермионному

Реализация унитарного оператора с помощью MS gate

A, B – матрицы Паули

$$\exp(-i\alpha A) \exp(i\theta B) \exp(i\alpha A) = \exp(i\theta B'),$$

$$B' = \exp(-i\alpha A) B \exp(i\alpha A)$$

$$B' = (\mathcal{I} \cos \alpha - iA \sin \alpha) B (\mathcal{I} \cos \alpha + iA \sin \alpha)$$

$$B' = B \cos 2\alpha - \frac{i}{2} [A, B] \sin 2\alpha$$

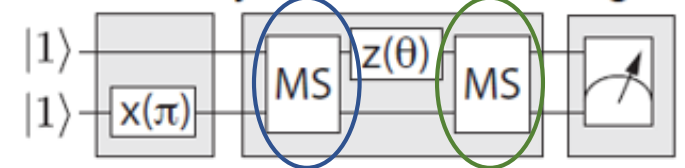
$$\alpha = \pi / 4$$

$$\begin{aligned} \exp(-i\theta \sigma_y^1 \sigma_x^j) &= \sin \left(i\theta \frac{i[\sigma_x^1 \sigma_x^j, \sigma_z^1]}{2} \right) \\ &= \exp\left(-i\frac{\pi}{4} \sigma_x^1 \sigma_x^j\right) \exp(-i\theta \sigma_z^1) \exp\left(i\frac{\pi}{4} \sigma_x^1 \sigma_x^j\right) \\ &= \exp\left(i\frac{\pi}{4} \sigma_x^1 \sigma_x^j\right) \exp(-i(\theta + \pi) \sigma_z^1) \exp\left(i\frac{\pi}{4} \sigma_x^1 \sigma_x^j\right). \end{aligned}$$

MS gate

$$U_{\text{MS}}(\phi) = \exp(-i\phi/2 \sum_{i < j} \sigma_x^i \sigma_x^j)$$

Bravyi - Kitaev encoding



MS gate

Квантовый алгоритм оптимизации

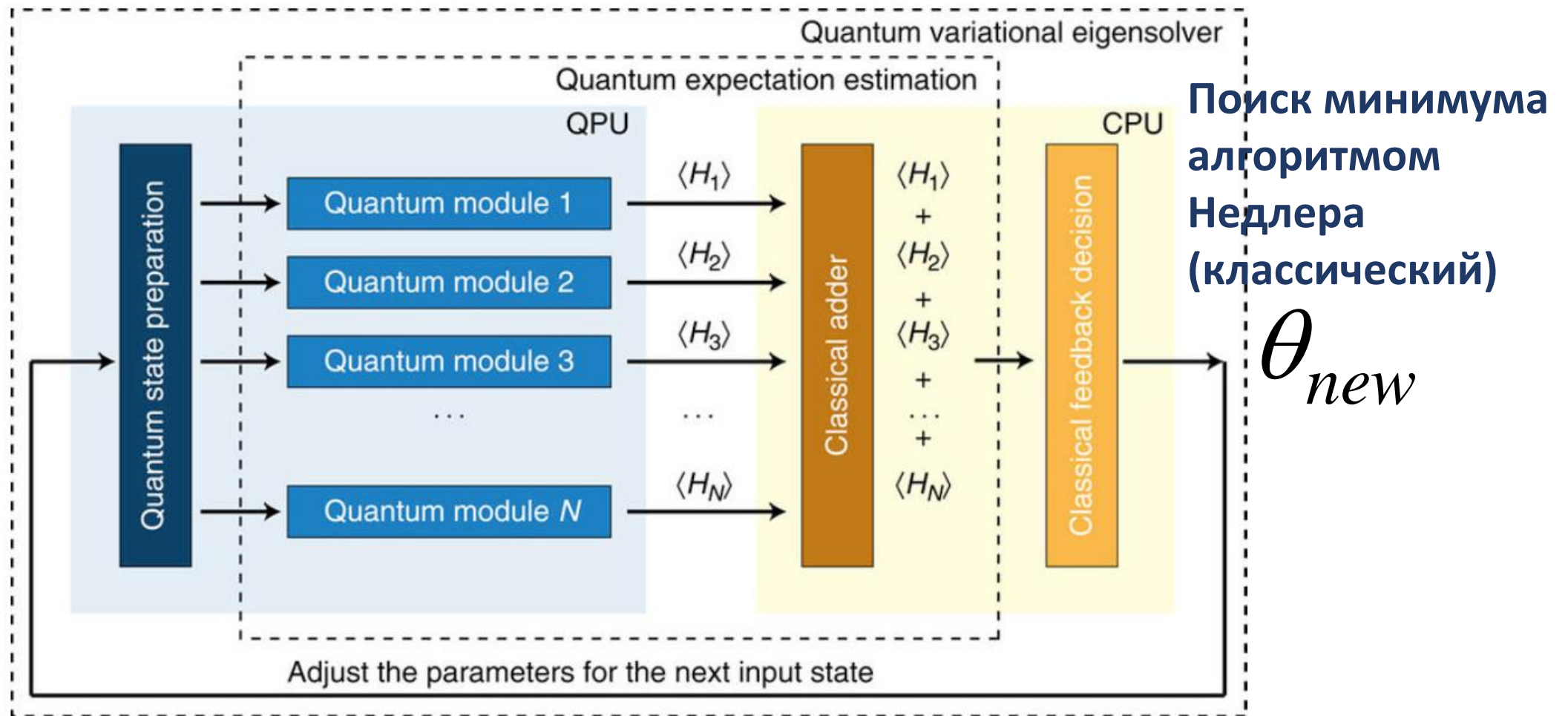


FIG. 49: Schematic view of the implementation of the variational quantum eigensolver using a hybrid classical and quantum circuit. The figure is adopted from Ref. 80.

Алгоритм поиска минимума (Nedler)

Размерность пространства N

Order according to the values at the vertices:

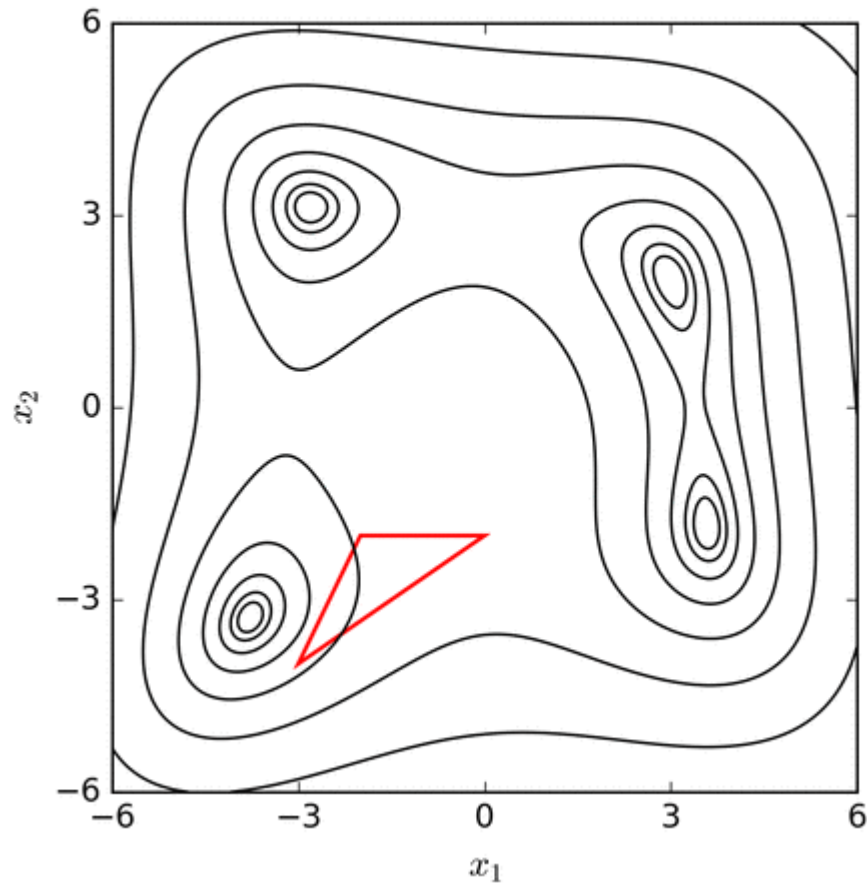
$$f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_2) \leq \dots \leq f(\mathbf{x}_{n+1}).$$

$$\mathbf{x}_0 = \sum \mathbf{x}_k / (N + 1) \quad \text{centroid}$$

Compute

$$\text{reflection} \quad \mathbf{x}_r = \mathbf{x}_0 + \alpha(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_{n+1}) \quad \text{with } \alpha > 0.$$

$$f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{x}_r) < f(\mathbf{x}_n), \quad \text{to} \quad \mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{x}_r$$



Продолжение

4. Expansion

If the reflected point is the best point so far, $f(\mathbf{x}_r) < f(\mathbf{x}_1)$,

then compute the expanded point $\mathbf{x}_e = \mathbf{x}_o + \gamma(\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_o)$ with $\gamma > 1$.

If the expanded point is better than the reflected point, $f(\mathbf{x}_e) < f(\mathbf{x}_r)$,

then obtain a new simplex by replacing the worst point \mathbf{x}_{n+1} with the expanded point \mathbf{x}_e and go to step 1;

else obtain a new simplex by replacing the worst point \mathbf{x}_{n+1} with the reflected point \mathbf{x}_r and go to step 1.

5. Contraction

Here it is certain that $f(\mathbf{x}_r) \geq f(\mathbf{x}_n)$. (Note that \mathbf{x}_n is second or "next" to highest.)

Compute contracted point $\mathbf{x}_c = \mathbf{x}_o + \rho(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_o)$ with $0 < \rho \leq 0.5$.

If the contracted point is better than the worst point, i.e. $f(\mathbf{x}_c) < f(\mathbf{x}_{n+1})$,

then obtain a new simplex by replacing the worst point \mathbf{x}_{n+1} with the contracted point \mathbf{x}_c and go to step 1;

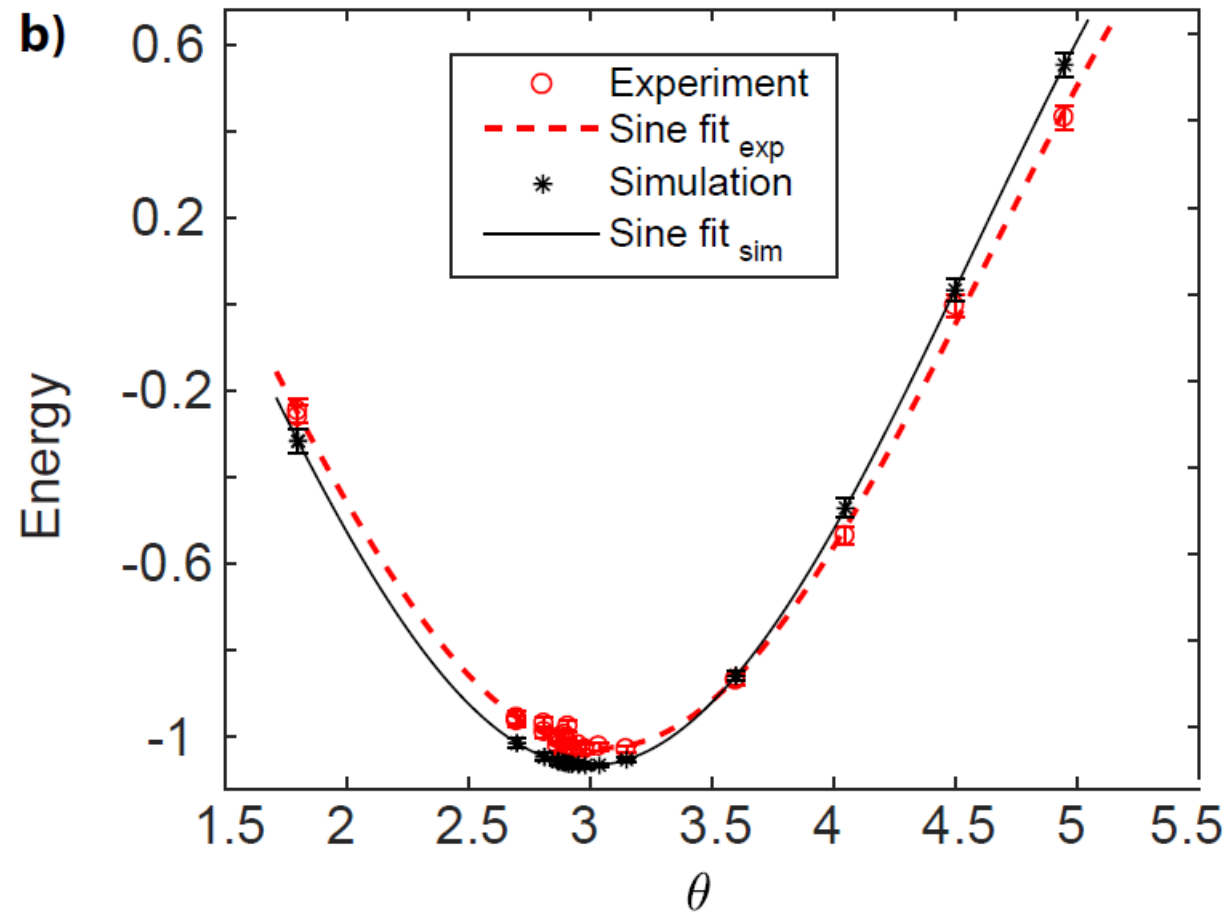
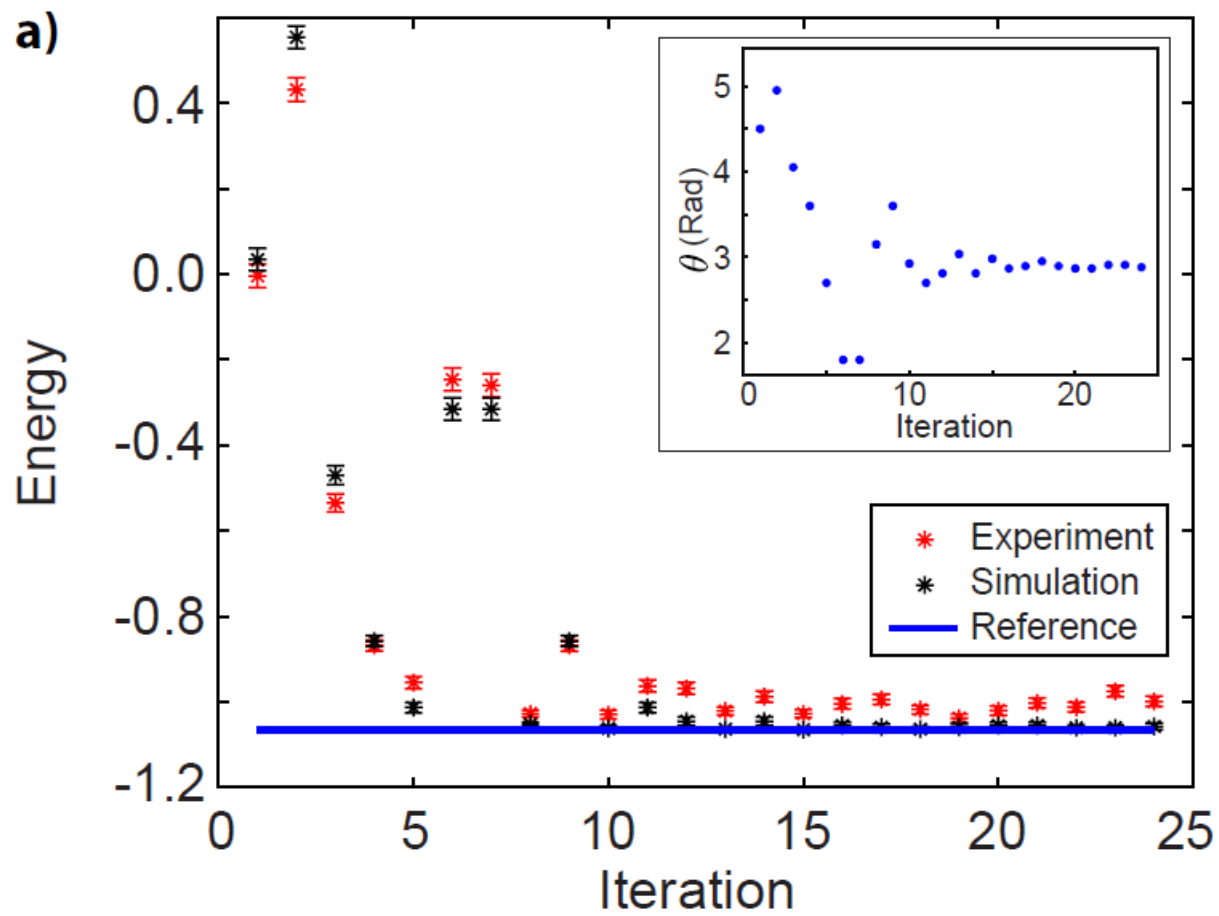
6. Shrink

Replace all points except the best (\mathbf{x}_1) with

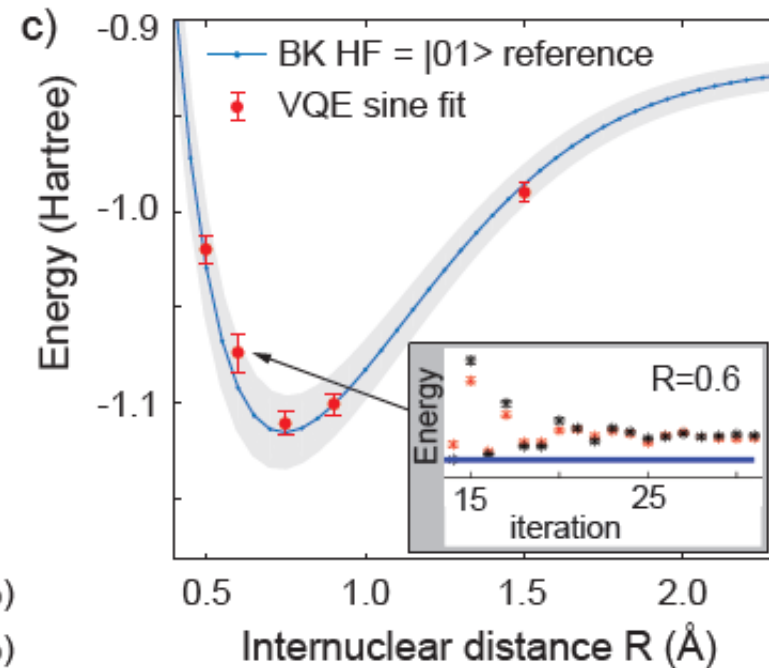
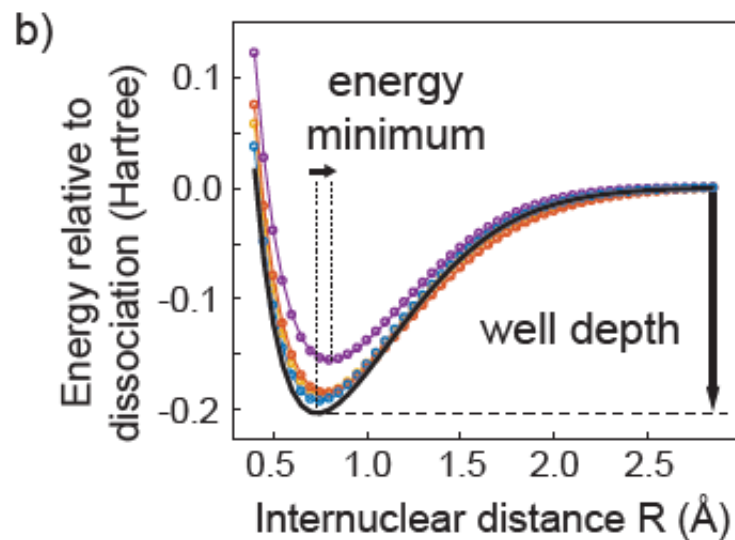
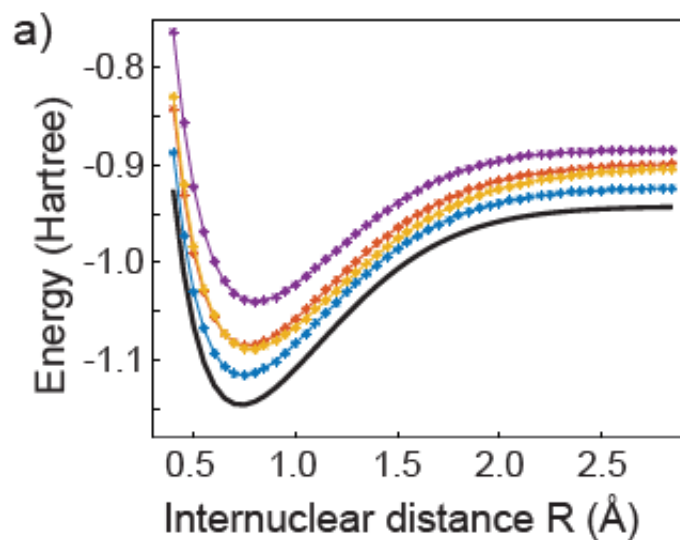
$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_1 + \sigma(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1)$ and go to step 1.

Nelder–Mead method applied to the
[Rosenbrock function](#)

Пример расчета по шагам



Результат расчета H2

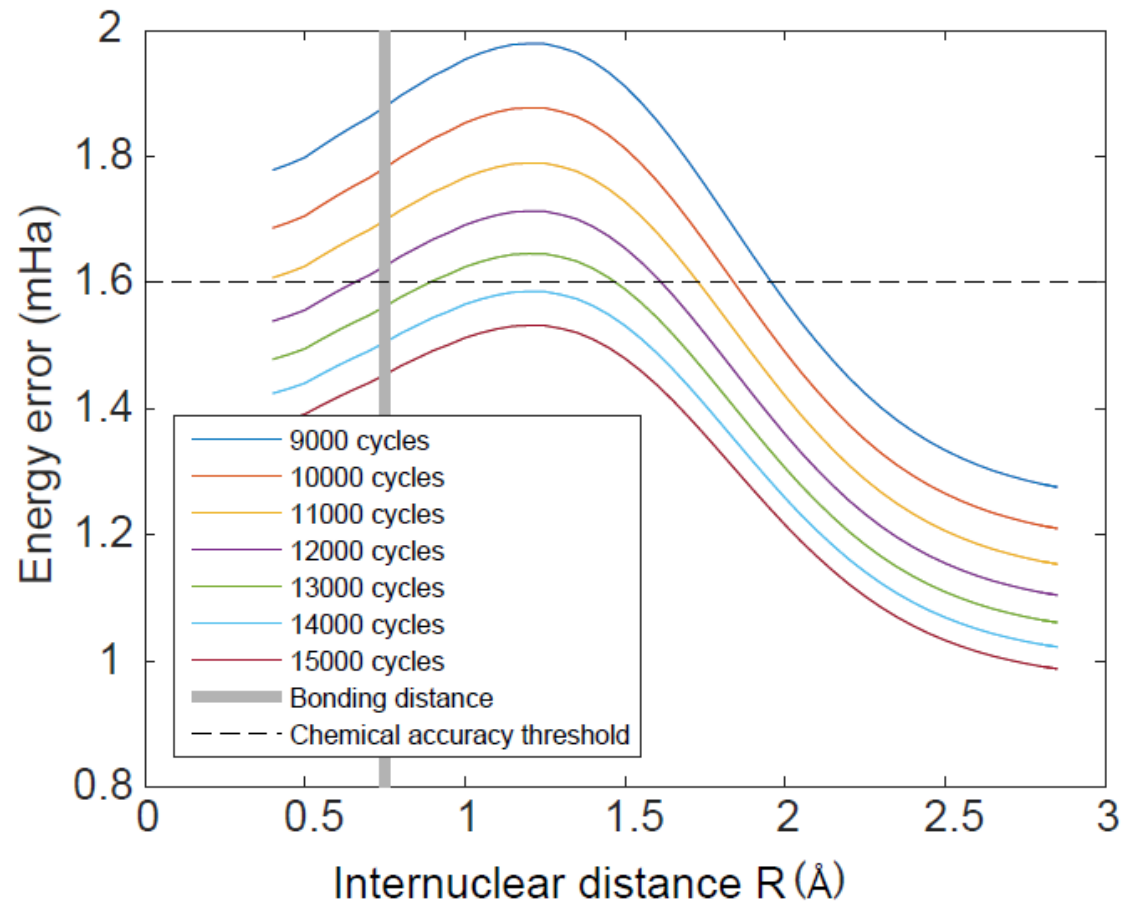


Theory —

Data {

- BK HF = $|11\rangle$ (F~99%)
- JW HF = $|0011\rangle$ (F~97%)
- BK HF = $|01\rangle$ (F~99%)
- JW HF = $|0011\rangle$ (F~93%)

Ошибки усреднения

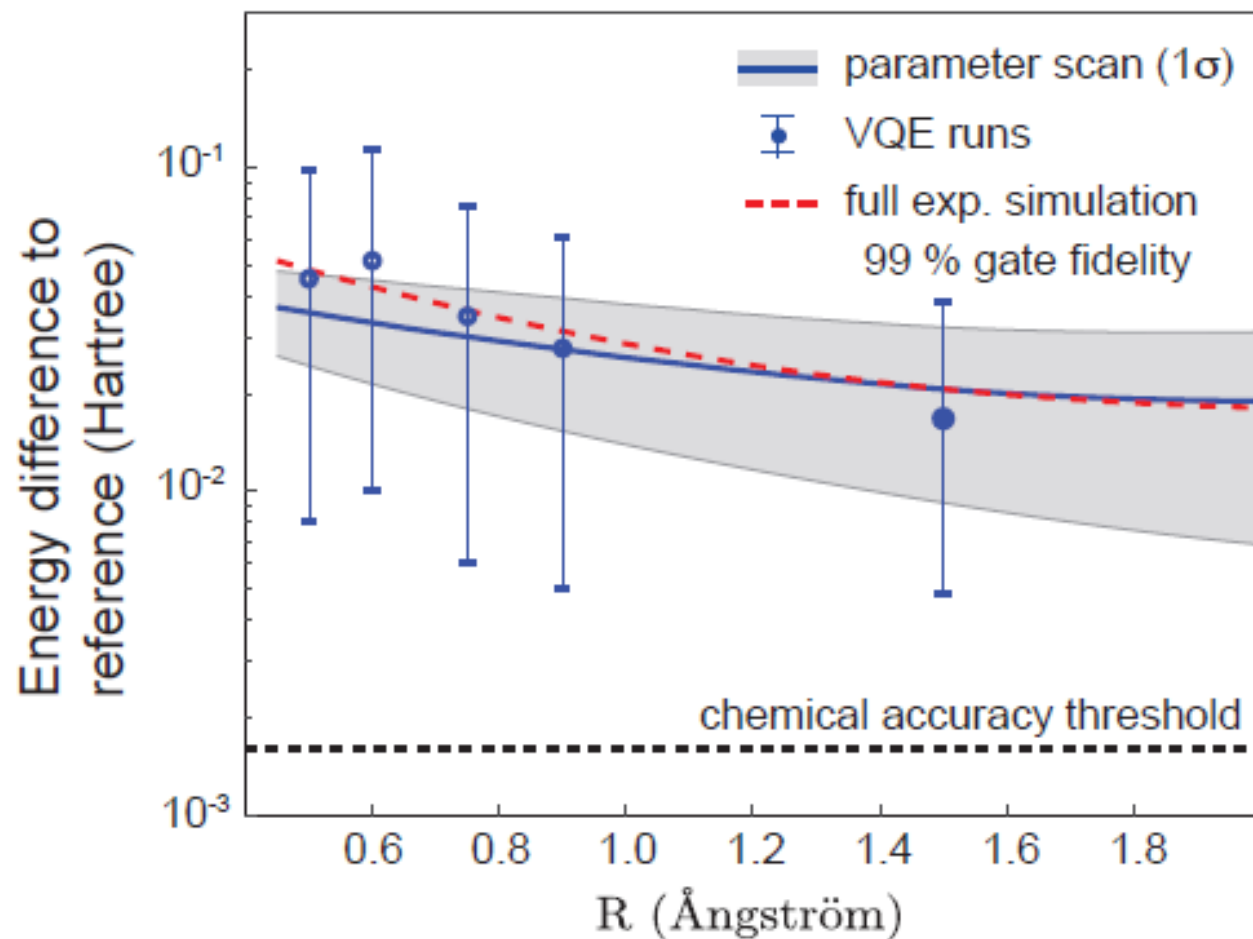


1 цикл ~ 20 мс

Хорошее усреднение при 15000 циклах – 5 мин

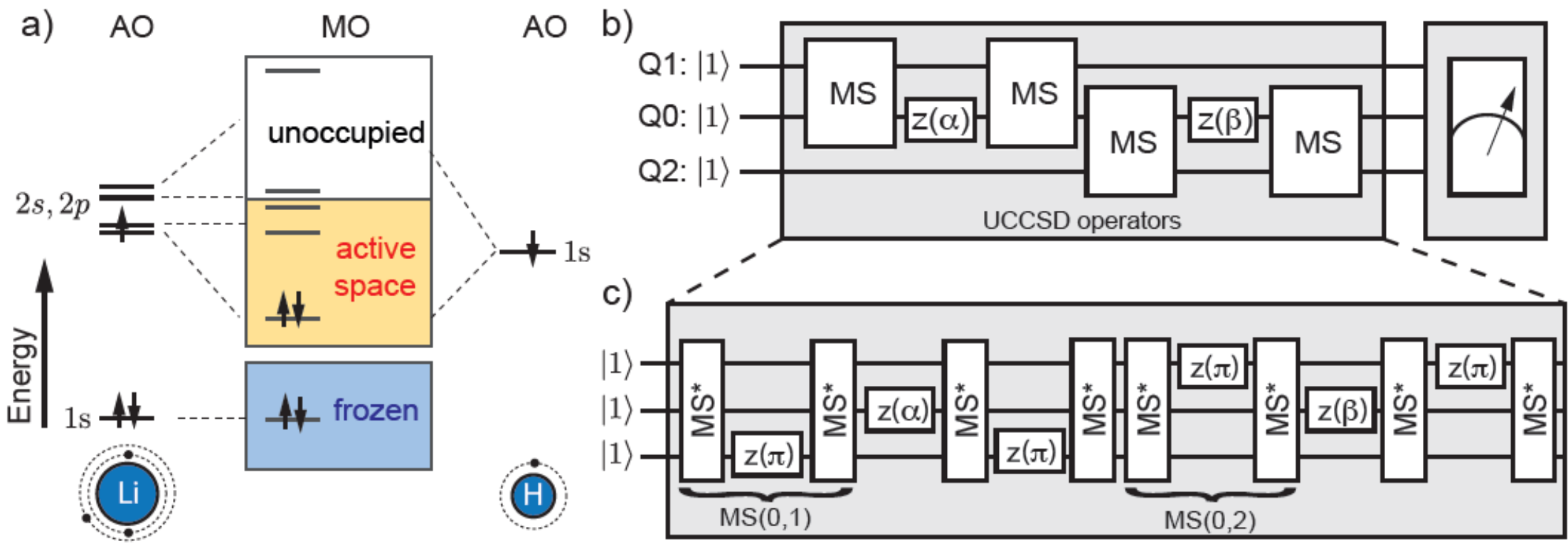
И это только одно значение параметра

Суммарные ошибки



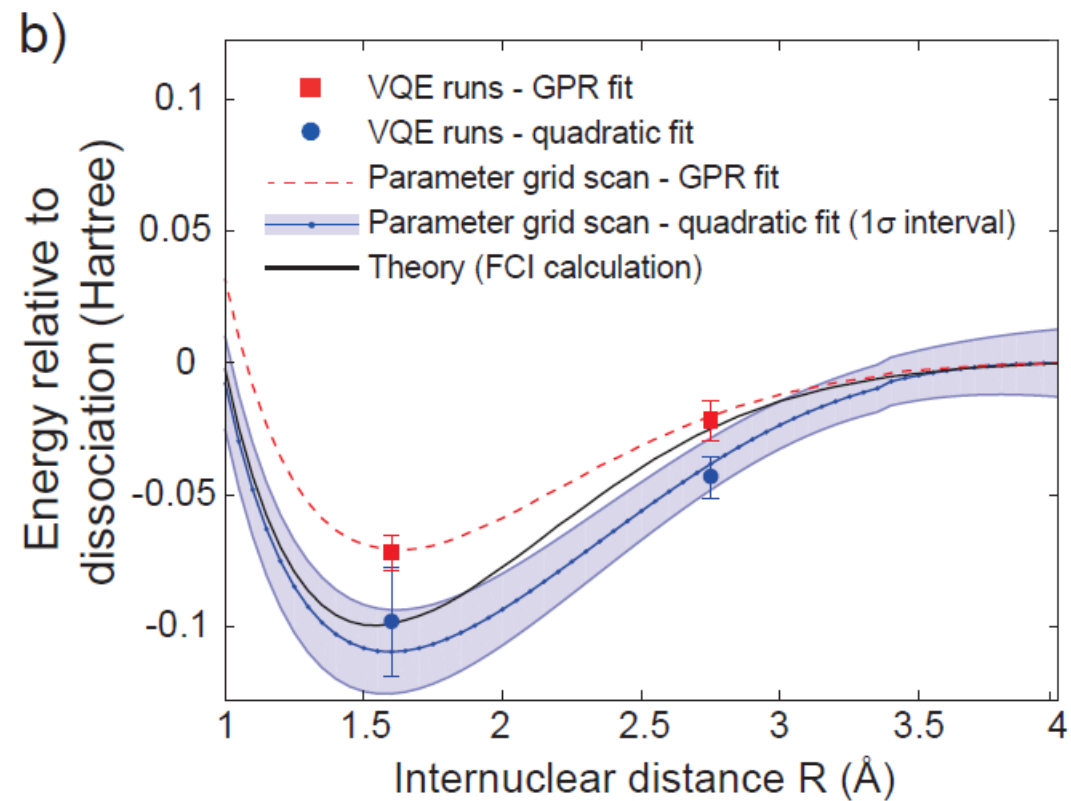
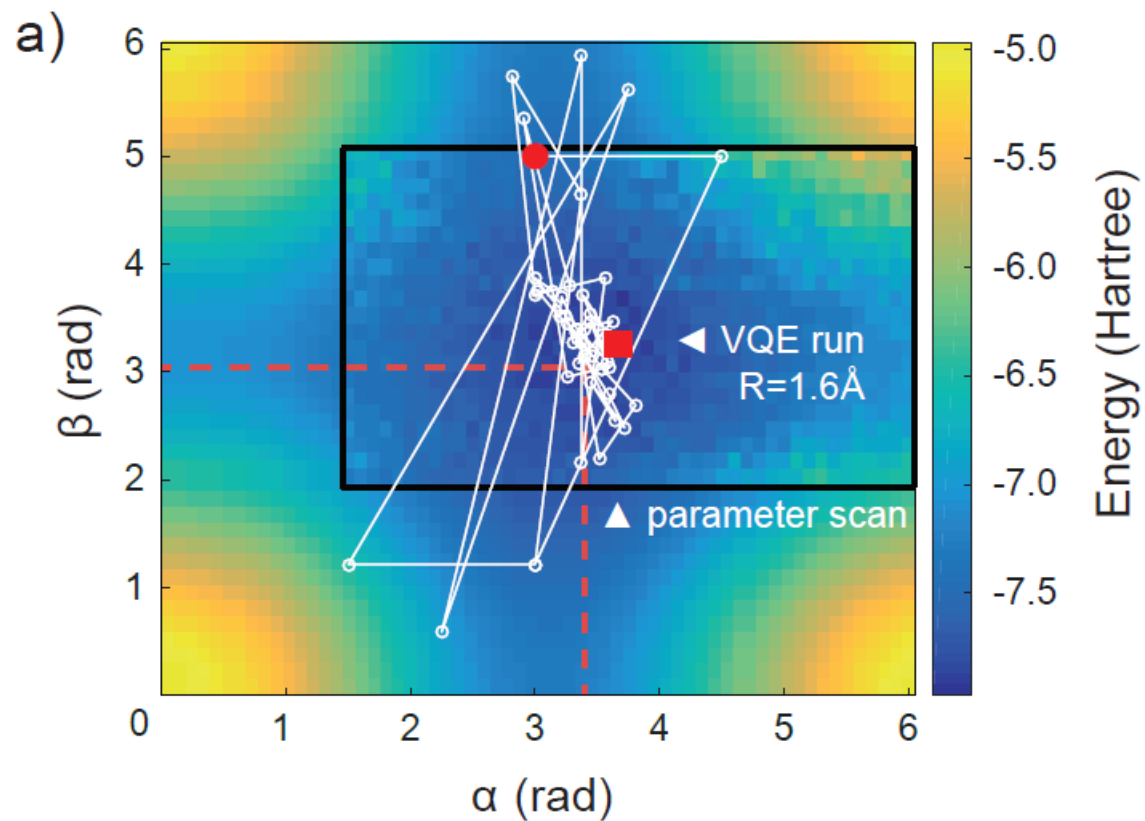
- Погрешности детекторов
- Скачки мощности лазера (ошибки при операциях в гейтах)

Молекула LiH



$$U_{\text{UCCSD}} = e^{\alpha(a_5^\dagger a_4^\dagger a_3 a_2 - a_2^\dagger a_3^\dagger a_4 a_5)} \cdot e^{\beta(a_7^\dagger a_6^\dagger a_3 a_2 - a_2^\dagger a_3^\dagger a_6 a_7)} \quad U_{\text{UCCSD}}^{\text{BK}}(\alpha, \beta) = e^{-i\alpha\sigma_2^x \sigma_4^y} \cdot e^{-i\beta\sigma_2^x \sigma_6^y}$$

Результаты LiH



Минимизация не сошлась

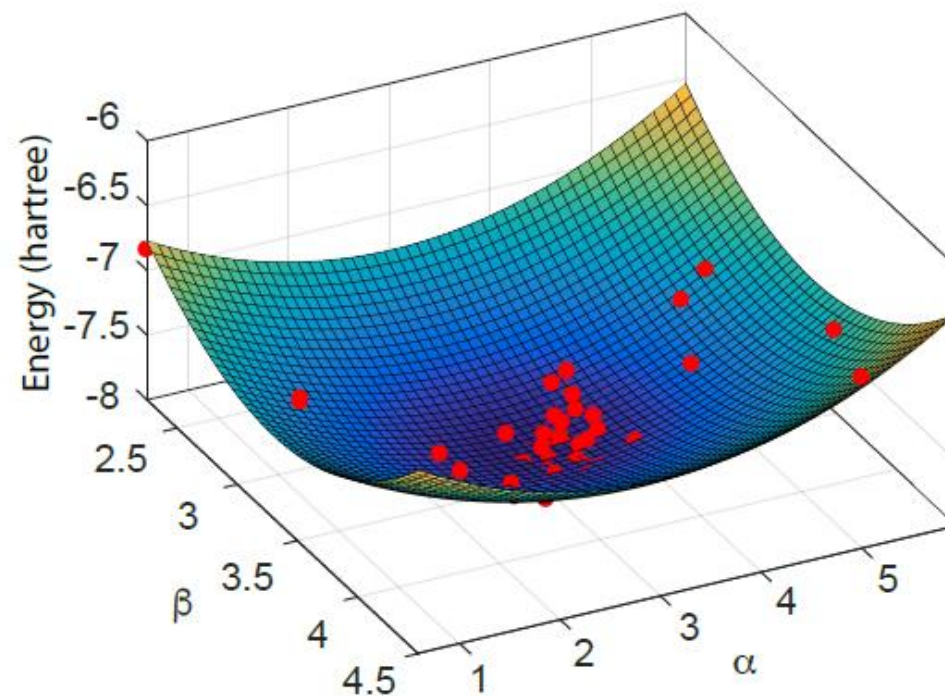
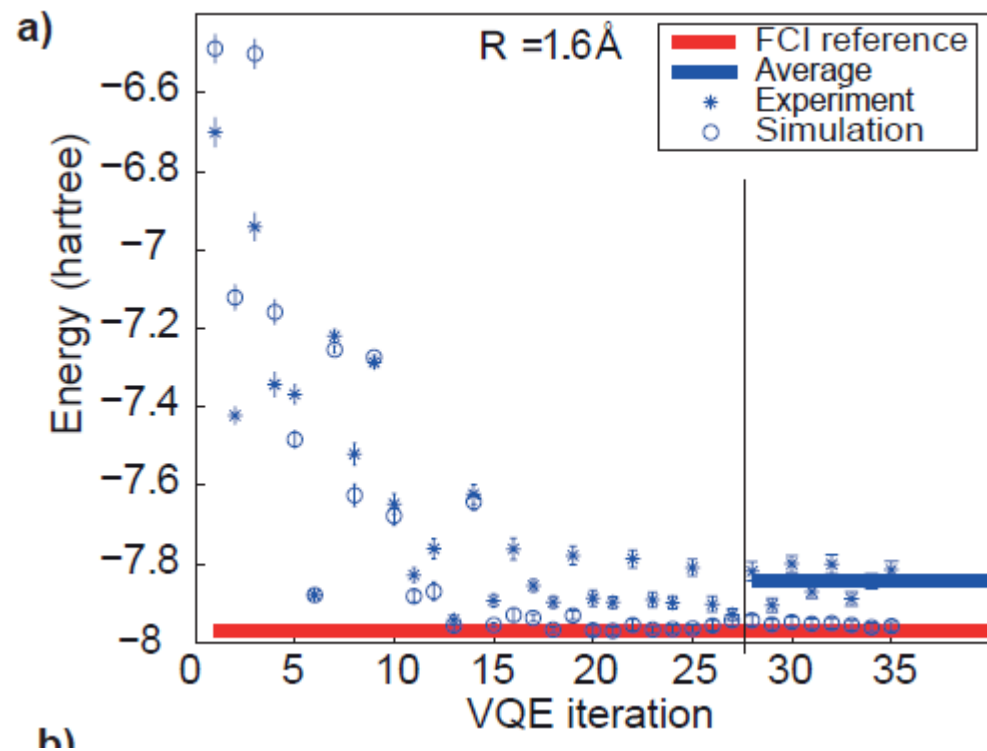
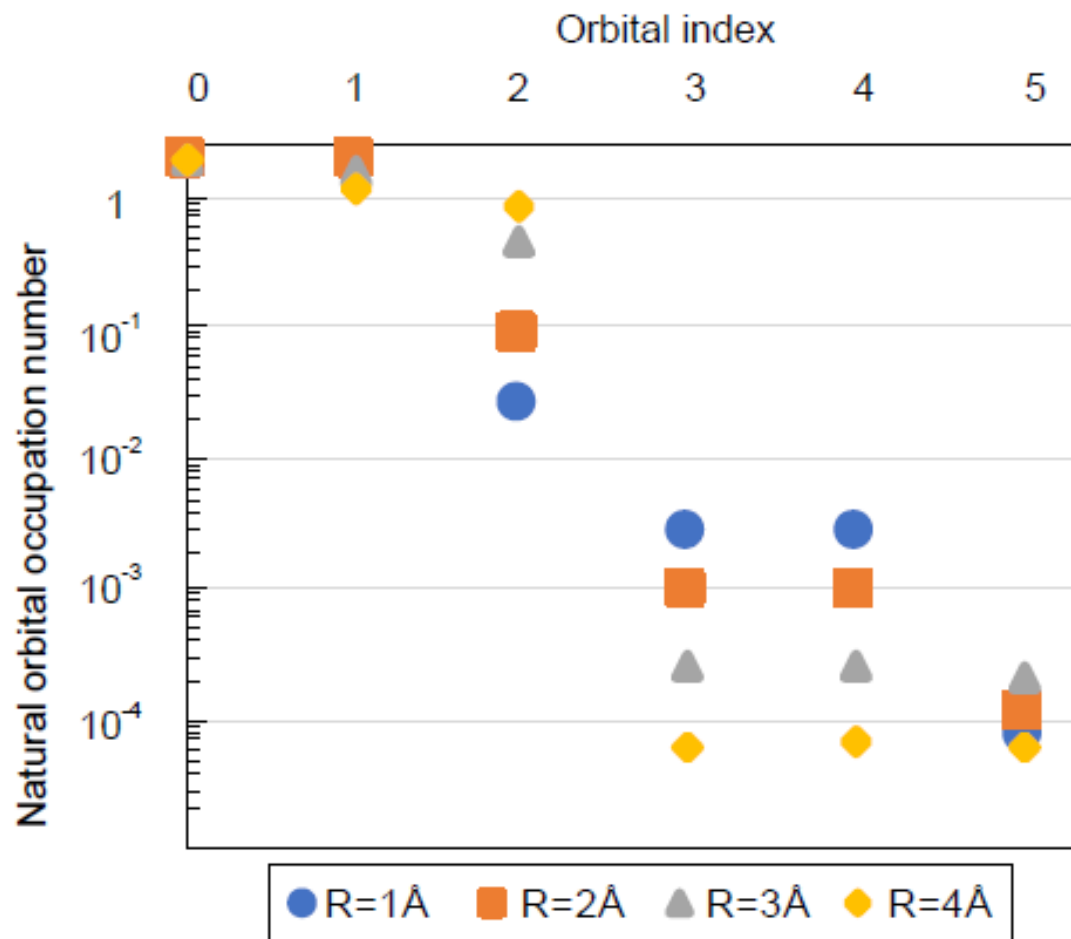


FIG. 14. Fitting of the two-dimensional quadratic function $E(\alpha, \beta) = m + (c\alpha - a)^2 + (d\beta - b)^2$ to the VQE points (red).

Распределение по уровням при различных R



Выводы

- Квантовые алгоритмы в теории должны существенно обгонять классические на больших размерностях
- Есть методы сведения гамильтонианов молекул к спиновым системам, но вид усложняется
- Любой множитель в гамильтониане - это операция с кубитом на схеме. Любая операция несет ошибки (технически)
- Большие системы – много операций – огромные ошибки
- Алгоритмы коррекции ошибок – уменьшение числа действующих кубитов

Средние слагаемые в гамильтониане

