

Вариационный квантовый алгоритм для малоразмерных систем в базисе Паули

Д.О. Голов, Н.А. Петров, А.Н. Цирулев

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»
170002, Россия, Тверская область, Тверь, Садовый пер. 35
tsirulev.an@tversu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.343

Аннотация: В последнее десятилетие вариационные квантовые алгоритмы реализованы на современных квантовых вычислителях и успешно решают практические задачи оптимизации, квантовой химии и машинного обучения. В работе предложен новый вариационный квантовый алгоритм по схеме Монте-Карло, использующий случайный выбор генераторов унитарного преобразования с оптимизацией целевого функционала посредством алгоритма отжига или Метрополиса-Гастингса. Состояния квантовой системы в форме оператора плотности и ее модельный гамильтониан представлены разложениями в базисе Паули. В алгоритме зависимость состояния системы от варьируемых параметров заменена случайным выбором генератора Паули, определяющего унитарное преобразование состояния. Эффективность алгоритма отжига непосредственно связана с равновероятным выбором перехода от одного состояния к другому, поэтому в работе используется компромиссный вариант равномерного распределения выборки операторов из группы $SU(2)^n$ – прямого произведения групп $SU(2)$, где n – число кубитов в системе. Случайный выбор однокубитного оператора по мере Хаара на $SU(2)$ выполняется в координатах Хопфа на многообразии группы (трехмерной сфере). Результаты тестирования алгоритма показывают, что он может быть эффективен для малоразмерных систем.

Ключевые слова: *вариационный квантовый алгоритм, алгоритм отжига, унитарное преобразование, базис Паули, разложение гамильтониана, равномерное распределение случайной величины на трехмерной сфере, координаты Хопфа.*

1. Введение

На современном этапе развития технологий вариационные квантовые алгоритмы представляют единственный класс квантовых алгоритмов, реализованный на квантовых процессорах и при этом имеющий явное практическое значение. Они широко применяются в реальных расчетах квантовой химии, квантового машинного обучения, в задачах квадратичной оптимизации и многих других областях. Для выполнения вариационного квантового алгоритма реальная система моделируется малоразмерной системой кубитов со специально подобранным эффективным гамильтонианом, который проще гамильтониана реальной системы, но отражает некоторые ее характеристики, существенные в данной задаче [1]. Такой подход является универсальным и лежит в основе проектирования современных квантовых процессоров [2, 3], в которых квантовое вычисление сводится к применению некоторой квантовой схемы к начальному состоянию

системы кубитов с последующим измерением результата. Как правило, выбор системы кубитов и гамильтониана не представляет сложности в задачах машинного обучения и квадратичной оптимизации. Однако для фермионных систем квантовой химии, т.е. атомов и молекул, реальный гамильтониан выражается через операторы рождения и уничтожения в схеме вторичного квантования, упрощается посредством игнорирования взаимодействий малой интенсивности и пространственной части гамильтониана, а затем преобразованием Йордана-Вигнера [4] выражается через операторы Паули. С точки зрения доступных технологий, моделирующая система кубитов должна быть малоразмерной как в отношении числа кубитов, так и разреженности матрицы гамильтониана.

В данной работе предлагается новый вариационный квантовый алгоритм, сочетающий квантовую вычислительную часть с методом Монте-Карло, в частности, с методом отжига (возможны и другие варианты) как эвристического метода оптимизации. Во втором разделе рассматривается общая схема вариационных квантовых алгоритмов на примере основного состояния системы, связанного с минимумом функционала энергии. В третьем разделе даны описание алгоритма и результат тестирования данного алгоритма на модельном гамильтониане. В заключении дан набросок обоснования сходимости алгоритма.

В работе применяется система единиц, в которой постоянная Планка, скорость света и постоянная Больцмана равны единице: $\hbar = c = k_B = 1$. Тогда единственной размерной единицей является единица длины, причем энергия и температура измеряются в обратных единицах длины. При этом единица длины остается неопределенной, поскольку все соотношения в описании алгоритма масштабно инвариантны.

2. Вариационные квантовые алгоритмы

В квантовой теории вариационные алгоритмы являются или чисто классическими, или гибридными [5, 6]. В обоих случаях часть алгоритма, осуществляющая минимизацию некоторого функционала – обычно функционала энергии – выполняется на классическом компьютере. Классический вариационный алгоритм (алгоритм Ритца) для квантовой системы с гамильтонианом H (вообще говоря, H может быть произвольной наблюдаемой) имеет целью найти, точно или с хорошим приближением, глобальный минимум функционала

$$E(x) = \frac{\langle u(x) | H | u(x) \rangle}{\langle u(x) | u(x) \rangle}, \quad x = (x_1, \dots, x_p), \quad (1)$$

отвечающего основному состоянию системы, а также ближайшие к нему локальные минимумы, которые определяют энергии низших возбужденных состояний. Варьирование параметров x , с применением

классических пошаговых методов оптимизации с классическим же вычислением его значения на каждом шаге, в идеальном случае приводит к глобальному минимуму $E(x)$. Для простых систем успешность алгоритма зависит только от удачного выбора начального вектора состояния $|u(x)\rangle$. Но в многочастичных системах, моделируемых достаточно большим числом кубитов и соответствующих параметров, вычислительная сложность увеличивается не только за счет увеличения числа параметров в задаче оптимизации, но также и за счет вычисления значений $\langle u(x)|H|u(x)\rangle$. В вариационных квантовых алгоритмах последняя часть сложности исчезает, поскольку квантовый процессор вычисляет значения функционала (1) существенно быстрее, чем классический компьютер; оптимизация всегда выполняется на классическом компьютере.

Пусть квантовая система состоит из n кубитов. Базис Паули гильбертова пространства линейных операторов состоит из 4^n тензорных произведений

$$\sigma_K = \sigma_{ij\dots k} = \sigma_i \otimes \sigma_j \dots \otimes \sigma_k, \quad (2)$$

где K – десятичное представление строки $ij\dots k$ ($i, j, \dots k \in \{0, 1, 2, 3\}$) длины n . Базис Паули подробно рассмотрен в работах [7,8]. Отметим важные свойства данного базиса: (i) коэффициенты разложения произвольного эрмитова оператора в базисе Паули вещественны, а базисные элементы одновременно эрмитовы и унитарны; (ii) генераторы Паули, т.е. антиэрмитовы операторы вида $i\sigma_K$, образуют базис в алгебре Ли $su(2^n)$ группы $SU(2^n)$, действующей в гильбертовом пространстве квантовой системы; (iii) композиция операторов Паули является, с точностью до множителя $\{\pm 1, \pm i\}$, оператором Паули (например, $\sigma_{321}\sigma_{232} = -\sigma_{130}$); (iv) два оператора Паули вида (2) или коммутируют, или антикоммутируют.

Унитарное преобразование $U(t)$, которое переводит начальное состояние системы в основное, всегда можно эффективно реализовать с помощью вентилях, доступных на конкретном квантовом оборудовании, но более предпочтительно использование универсальных представлений, независимых от оборудования. Обычно выбирают представление вида:

$$U(t) = \prod_{K \in S} \exp(-it_K \sigma_K), \quad (3)$$

где S – подмножество множества натуральных чисел от 1 до $4^n - 1$, определяющее, какие именно базисные операторы входят в показатели экспонент. Различные вариационные квантовые алгоритмы, использующие такое представление унитарного преобразования, характеризуются, в первую очередь, выбором подмножества S , а кроме того, порядком расположения экспонент в произведении. В данной работе мы используем не вектор состояния системы, а оператор плотности $\rho(t)$, который также

естественно разлагается в базисе Паули, как и гамильтониан. В этом случае функционал энергии $E(x)$ принимает вид:

$$E(t) = \text{Tr}[\rho(t)H], \quad (4)$$

причем оператор плотности $\rho(t)$ преобразуется под действием унитарного преобразования $U_K = \exp(-it_K \sigma_K)$ по закону:

$$\rho(t) \rightarrow U_K \rho(t) U_K^\dagger. \quad (5)$$

Практическая генерация начального состояния в системе кубитов осуществляется посредством n однокубитных операторов Адамара и не представляет никакой технической сложности. Выполнение унитарного преобразования вида $\exp(-it_K \sigma_K)$ может быть осуществлено различными способами, например, с помощью метода связанного кластера кубитов [9]. В качестве начального состояния стандартно выбирается суперпозиция равномерно распределенных базисных состояний вычислительного базиса, для которой оператор плотности (чистого состояния) имеет вид:

$$\rho_s = \frac{1}{N} \sum_{k,l=0}^{N-1} |k\rangle \langle l| = \frac{1}{N} \sum_{K \in \{0,3\}^n} \sigma_K, \quad (6)$$

где $N = 2^n$, а операторы Паули σ_K содержат тензорные произведения только двух однокубитных операторов σ_0 и σ_3 .

3. Описание алгоритма

В данной работе предлагается вариационный квантовый алгоритм по схеме Монте-Карло, использующий случайный выбор генераторов Паули унитарного преобразования с оптимизацией целевого функционала посредством алгоритма отжига или алгоритма Метрополиса-Гастингса. В самом общем случае эффективность алгоритма отжига непосредственно связана с равновероятным выбором перехода от одной конфигурации системы к другой, а в данном случае – от одного состояния к другому. Случайный выбор унитарного преобразования, согласованный с мерой Хаара на группе $SU(2^n)$, требует очень больших вычислительных ресурсов и трудно реализуем в современных квантовых схемах. В нашем подходе отдельно для каждого кубита осуществляется случайный выбор генератора преобразования. Точнее, выбор генератора согласован с формой унитарного преобразования (3) и инвариантной относительно левых и правых сдвигов мерой Хаара на прямом произведении n экземпляров группы $SU(2)$.

Произвольный унитарный однокубитный оператор имеет вид:

$$g(a) = a_0 \sigma_0 + ia_1 \sigma_1 + ia_2 \sigma_2 + ia_3 \sigma_3,$$

где параметры $a = (a_0, a_1, a_2, a_3)$ вещественны: это точки трехмерной сферы $a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1$ – многообразия группы $SU(2)$ – объема $2\pi^2$. Мера Хаара

на $SU(2)$ имеет наиболее удобный вид в координатах Хопфа (этот результат мы получили прямым перебором различных координатных систем), поскольку в этом случае равномерно распределенную случайную величину можно определить явными формулами:

$$\begin{aligned}a_0 &= \cos(2\pi y)\sqrt{1-x}, \\a_1 &= \cos(2\pi z)\sqrt{x}, \\a_2 &= \sin(2\pi z)\sqrt{x}, \\a_3 &= \sin(2\pi y)\sqrt{1-x},\end{aligned}$$

где случайные величины x, y, z равномерно распределены на отрезке $[0, 1]$. Такое представление существенно сокращает время вычислений по сравнению с использованием неявных формул. Отметим, что:

$$\begin{aligned}g(a) &= \exp(it\sigma(s)) = \cos(t)\sigma_0 + i\sin(t)\sigma(s), \quad \sigma(s) = s_1\sigma_1 + s_2\sigma_2 + s_3\sigma_3, \\s &= (s_1, s_2, s_3), \quad s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = 1, \quad a_0 = \cos(t), \quad a_k = s_k \sin(t), \quad k = 1, 2, 3.\end{aligned}$$

В основе алгоритма лежит случайный выбор генераторов Паули $\sigma(s)$ для унитарного преобразования:

$$U(t_K) = \exp(-it_K\sigma(s^{(1)})\dots\sigma(s^{(n)})) = \cos(t_K)\sigma_{0\dots 0} + i\sin(t_K)\sigma(s^{(1)})\dots\sigma(s^{(n)}),$$

которое преобразует состояние квантовой системы. Кривая $U(t_K)$ на группе $SU(2)^n$ определяет кривую $\rho(t_K)$ в пространстве операторов плотности действием операторов на начальное (предыдущее) состояние. Изменением параметра $t_K \in [0, 2\pi]$ необходимо найти новое минимальное значение энергии $E(t_K)$ вдоль кривой $\rho(t_K)$ (и соответствующее преобразование из $SU(2)^n$) стартуя от прежнего состояния, соответствующего значению $t_K = 0$. Для обоснования алгоритма важно, что эта кривая инвариантна относительно левых и правых сдвигов также и на группе $SU(2)^n$, поскольку группа $SU(2)^n$ является ее подгруппой.

Алгоритмическое выполнение преобразований (5) основывается на легко проверяемых соотношениях:

$$\exp(-it\sigma_K)\sigma_L\exp(it\sigma_K) = \sigma_L, \text{ если } [\sigma_K, \sigma_L] = 0,$$

$$\exp(-it\sigma_K)\sigma_L\exp(it\sigma_K) = \cos(2t)\sigma_L - i\sin(2t)\sigma_K\sigma_L, \text{ если } \{\sigma_K, \sigma_L\} = 0,$$

так что преобразование (5) сводится к последовательности композиций базисных операторов Паули. Отметим также, во-первых, что в формуле (4) ненулевой след имеют только слагаемые, пропорциональные $\sigma_{0\dots 0}$, поэтому вычисление значения энергии тривиально также и при классической реализации алгоритма. Во-вторых, при унитарных преобразованиях начальное состояние (6) и все последующие сохраняют набор базисных операторов (состоящих только из произведений σ_0 и σ_3), но

коэффициенты будут уже отличны от $1/N$.

Тестирование данного алгоритма выполнено на простейшей модели с гамильтонианом [10,11] вида

$$H = \frac{1}{12}(\sigma_{003} + \sigma_{030} + \sigma_{300} + \sigma_{113} + \sigma_{131} + \sigma_{311} + \sigma_{223} + \sigma_{232} + \sigma_{322} - 3\sigma_{333}),$$

для которого энергия основного состояния равна -1 (вычисляется точно). Результат достигается с точностью 10^{-2} при 42 итерациях с использованием стандартного классического алгоритма отжига [12].

4. Заключение

Предложенный в данной работе алгоритм отличается от других вариационных алгоритмов, во-первых, рандомизацией подхода; другими словами, он относится к методам Монте-Карло и является глубокой адаптацией вычислительного метода отжига к проблеме минимизации функционала энергии при условии вычисления значений энергии на квантовом процессоре и квантовом изменении состояния системы посредством унитарного преобразования. Обоснование алгоритма с чисто математической (помимо эмпирической) точки зрения заключается в том, что экспоненциальное отображение алгебры Ли $su(2^n)$ группы $SU(2^n)$ на многообразие группы сюръективно, поэтому всегда существует зависящий от параметра унитарный оператор, переводящий начальное состояние в любое другое состояние. Более того, этот оператор определяет на многообразии группы $SU(2^n)$ левоинвариантную кривую, которая получается посредством левого сдвига соответствующей однопараметрической подгруппы (т.е. экспоненты от некоторого генератора Паули). Во-вторых, использование оператора плотности вместо вектора состояния является новым элементом, который упрощает вычисления, поскольку композиция операторов Паули может быть вычислена сравнительно легко.

Библиографический список:

1. **Peruzzo, A.** A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor / A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt et al. // *Nature Communications*. – 2014. – V. 5. – Art. № 4213. – 7 p. DOI: 10.1038/ncomms5213.
2. **Китаев, А.** Классические и квантовые вычисления / А. Китаев, А. Шень, Ю. Вялый. – М.: МЦМНО, 1999. – 192 с.
3. **Нильсен, М.** Квантовые вычисления и квантовая информация / М. Нильсен, И. Чанг Пер.; пер. с англ. М.Н. Вялого, П.М. Островского. – М.: Мир, 2006. – 824 с.
4. **Ryabinkin, I.G.** Method: a systematic approach to quantum chemistry on a quantum computer / I.G. Ryabinkin, T.-C. Yen, S.N. Genin, A.F. Izmaylov // *Journal of Chemical Theory and Computation*. – 2018. – V. 14. – I. 12. – P. 6317-6326. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00932.
5. **McClean, J.R.** The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms / J.R. McClean, J. Romero, R. Babbush, A. Aspuru-Guzik // *New Journal of Physics*. – 2016. – V. 18. – Art. № 023023. – 22 p. DOI: 10.1088/1367-2630/18/2/023023.
6. **Chitambar, E.** Quantum resource theories / E. Chitambar, G. Gour // *Reviews of Modern Physics*. – 2019. – V. 91. – I. 2. – P. 025001-1-025001-48. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.

7. Tsirulev, A.N. A geometric view on quantum tensor networks / A.N. Tsirulev // *European Physical Journal Web of Conferences*. – 2020. – V. 226. – Art. № 02022. – 4 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.
8. Nikonov, V.V. Pauli basis formalism in quantum computations / V.V. Nikonov, A.N. Tsirulev // *Mathematical modelling and geometry*. – 2020. – V. 8. – № 3. – P. 1-14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.
9. Taube, A.G. New perspectives on unitary coupled-cluster theory / A.G. Taube, R.J. Bartlett // *International Journal of Quantum Chemistry*. – 2006. – V. 106. – I. 15. – P. 3393-3401. DOI: 10.1002/qua.21198.
10. Андре, Э. Моделирование запутанных состояний в кластерах кубитов / Э. Андре, А.Н. Цирулев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2022. – Вып. 14. – С. 342-351. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342.
11. Андре, Э. Модель трехкубитного кластера в термостате / Э. Андре, А.Н. Цирулев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2023. – Вып. 15. – С. 223-230. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.223.
12. Ingber, L. Simulated annealing: practice versus theory / L. Ingber // *Mathematical and Computer Modelling*. – 1993. – V. 18. – I. 11. – P. 29-57. DOI: 10.1016/0895-7177(93)90204-C.

References:

1. Peruzzo A., McClean J., Shadbolt P. et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature Communications*, 2014, vol. 5, art. no. 4213, 7 p. DOI: 10.1038/ncomms5213.
2. Kitaev A.Y., Shen A.H., Vyalii M.N. *Classical and quantum computation*, Graduate Studies in Mathematics. Providence, Rhode Island, American Mathematical Society, 2002, vol. 47, 272 p. DOI: 10.1090/gsm/047.
3. Nielsen M.A., Chuang I.L. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge, Cambridge University Press, 2001, 814 p.
4. Ryabinkin I.G., Yen T.-C., Genin S.N., Izmaylov A.F. Method: a systematic approach to quantum chemistry on a quantum computer, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2018, vol. 14, issue 12, pp. 6317-6326. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00932.
5. McClean J.R., Romero J., Babbush R., Aspuru-Guzik A. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New Journal of Physics*, 2016, vol. 18, art. no. 023023, 22 p. DOI: 10.1088/1367-2630/18/2/023023.
6. Chitambar E., Gour G. Quantum resource theories, *Reviews of Modern Physics*, 2019, vol. 91, issue 2, pp. 025001-1-025001-48. DOI: 10.1103/RevModPhys.91.025001.
7. Tsirulev A.N. A geometric view on quantum tensor networks, *European Physical Journal Web of Conferences*, 2020, vol. 226, art. № 02022, 4 p. DOI: 10.1051/epjconf/202022602022.
8. Nikonov V.V., Tsirulev A.N. Pauli basis formalism in quantum computations, *Mathematical modelling and geometry*, 2020, vol. 8, no. 3, pp. 1-14. DOI: 10.26456/mmg/2020-831.
9. Taube A.G., Bartlett R.J. New perspectives on unitary coupled-cluster theory, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2006, vol. 106, issue 15, pp. 3393-3401. DOI: 10.1002/qua.21198.
10. Andre E., Tsirulev A.N. Modelirovanie zaputannykh sostoyanij v klasterakh kubitov [Modeling of entangled states in qubit clusters], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2022, issue 14, pp. 342-351. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.342. (In Russian).
11. Andre E., Tsirulev A.N. Model trehkuibitnogo klastera v termocstate [Model of a three-qubit cluster in a thermal bath], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2023, issue 15, pp. 223-230. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.15.223. (In Russian).
12. Ingber L. Simulated annealing: practice versus theory, // *Mathematical and Computer Modelling*, 1993, vol. 18, issue 11, pp. 29-57. DOI: 10.1016/0895-7177(93)90204-C.

Short Communication

Variational quantum algorithm for low-dimensional systems in the Pauli basis

D.O. Golov, N.A. Petrov, A.N. Tsirulev
Tver State University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.343

Abstract: In the last decade, variational quantum algorithms implemented on modern quantum computers have successfully solved practical problems of optimization, quantum chemistry, and machine learning. We propose new variational quantum algorithm based on a Monte Carlo scheme that uses a random selection of the generators for a unitary transformation, and also uses optimization

of the objective functional employing the annealing or Metropolis-Hastings algorithm. The states of the quantum system in the form of a density operator and its model Hamiltonian are represented by expansions in the Pauli basis. In the algorithm, the state of the system is changed by means of a random choice of the Pauli generator that determines the unitary transformation of the state. The efficiency of the annealing algorithm directly depends on the equiprobable choice of the transition from one state to the second, so the work uses a compromise version of the uniform distribution of operators on the $SU(2^n)$ group – the direct product of the $SU(2)$ group, where n is the number of qubits in the system. The random choice of a single-qubit operator (consistent with the Haar measure on $SU(2)$) is implemented in Hopf coordinates on the group manifold (the three-sphere). The results of testing the algorithm show that it can be effective for low-dimensional systems. *Keywords: variational quantum algorithm, annealing algorithm, unitary transformation, Pauli basis, Hamiltonian expansion, uniform distribution of a random variable on a three-dimensional sphere, Hopf coordinates.*

Голов Дмитрий Олегович – аспирант 1 курса кафедры общей математики и математической физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Петров Никита Андреевич – аспирант 1 курса кафедры общей математики и математической физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Цирулев Александр Николаевич – д.ф.-м.н., профессор кафедры общей математики и математической физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Dmitriy O. Golov – 1st year PhD student of the General Mathematics and Mathematical Physics Department, Tver State University

Nikita A. Petrov – 1st year PhD student of the General Mathematics and Mathematical Physics Department, Tver State University

Alexander N. Tsirulev – Dr. Sc., Professor of the Department of General Mathematics and Mathematical Physics, Tver State University

Поступила в редакцию/received: 11.08.2024; после рецензирования/revised: 09.09.2024; принята/accepted 12.09.2024.