Deep VQE Note

Noriaki Shimada

October 14, 2020

まえがき

Deep Variational Quantum Eigensolver: a divide-and-conquer method for solving a larger problem with smaller size quantum computers [1] を理解するためのノートです。

Contents

1 Deep VQE

ハミルトニアン全体を部分系 i に分割する。部分系だけのハミルトニアンを $\mathcal{H}_i$、部分系 i と j の相互作用を V_{ij} と表記すると、全体のハミルトニアン $\mathcal{H}$ は

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i + \sum_{i,j} V_{ij} \tag{1}$$

と表すことが出来る。部分系の数を N、部分系内の量子ビット数を n とすると合計の量子ビット数 M は $M = nN$ になる。M が小さければ一度に $\mathcal{H}$ 全体のエネルギーを計算することが出来るが、大きい場合はこの論文で提案されている手法を用いてハミルトニアンを分割して計算する必要がある。先に手順をまとめると以下のようになる。

1. 部分系のハミルトニアン $\mathcal{H}_i$ を VQE で計算し基底状態 $|\psi_0^{(i)}\rangle$ を求める。。
2. 相互作用に含まれる演算子を用いて新しい正規直行基底 $\{|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\}_{k=1}^K$ を用意する。(K は相互作用の演算子の個数+1 だけ必要。)
3. 上記の基底を量子ビットに対応させる。部分系 i で k 個の基底がある場合必要な量子ビット数は $\lceil \log_2 K \rceil$ 個になる。系全体では $N\lceil \log_2 K \rceil$ になる。
4. 上記の量子ビットにかかる係数を計算する。($\mathcal{H}_i^{\mathrm{eff}}, V_{ij}^{\mathrm{eff}}$ の計算)
5. 今まで別々だった部分系 i と j を統合して 1 つのハミルトニアンと考えて VQE を実行する。後は最初に戻り手順を分割数分だけ繰り返す。

上記の処理について順番に解説していく。まずは部分系の $\mathcal{H}$ をそれぞれ VQE で独立に計算して基底状態を求める。

$$|\psi_0^{(i)}\rangle = U_i(\theta^{(i),*})\,|0^n\rangle \tag{2}$$

この $|\psi_0^{(i)}\rangle$ を局所基底状態 (local ground state) と呼ぶ。$U_i(\theta^{(i)}$ は部分系 i の基底状態を求める時に使用した量子変分回路で $\theta^{(i),*}$ は基底状態を獲得した時の回路のパラメータを表す。

$$\theta^{(i),*} \equiv \arg\min_\theta \langle 0^n|U_i(\theta^{(i)})^\dagger \mathcal{H}_i U_i(\theta^{(i)})|0^n\rangle \tag{3}$$

次に K 次元の局所基底 $\{|\psi_k^{(i)}\rangle\}_{k=1}^K$ を構成する。部分系 i に対する相互作用項に含まれる演算子 $W_k^{(i)}$ を用いて次の様に定義する。

$$|\psi_k^{(i)}\rangle \equiv W_k^{(i)}\,|\psi_0^{(i)}\rangle \tag{4}$$

ただし、$W_1^{(i)}$ は恒等演算子とする。部分系間の相互作用が

$$V_{ij} = \sum_k v_k W_k^{(i)} W_k^{(j)} \tag{5}$$

で与えられるとする。$k = 1$ は種類に対するインデックスでありビットの番号を表しているのではないことに注意する。例えば $k = 1$ で

$$W_k^{(i)} W_k^{(j)} = X_1^{(i)} Y_2^{(j)} \tag{6}$$

の場合、部分系 i ではパウリ演算子 X が 1 ビット目に、部分系 j ではパウリ演算子 Y が 2 ビット目に作用することを意味している。局所基底の積ではれる状態、

$$\sum_k v_k \left(W_k^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle \right) \left(W_k^{(j)} |\psi_0^{(j)}\rangle \right) = V_{ij} |\psi_0^{(i)}\rangle |\psi_0^{(j)}\rangle \tag{7}$$

局所基底の内積は $W_k^{(i)\ \dagger} W_k^{(i)}$ の期待値を計算すればよい。

$$\langle \psi_k^{(i)} | \psi_l^{(i)} \rangle = \langle \psi_0^{(i)} | W_k^{(i)\ \dagger} W_k^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle \tag{8}$$

$$= \langle 0^n | U_i(\theta^{(i),*})^\dagger W_k^{(i)\ \dagger} W_k^{(i)} U_i(\theta^{(i),*}) | 0^n \rangle \tag{9}$$

$W_k^{(i)\ \dagger} W_k^{(i)}$ は有限個の得るミート演算子の線形和に分解できる。これにより直接的な観測を一切せずに内積を計算することが出来る。この内積を用いて正規直行基底を構成することが出来る。グラムシュミットの直行化法より、

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \frac{1}{C} \left(|\psi_k^{(i)}\rangle - \sum_{l<k} \langle \tilde{\psi}_l^{(i)} | \psi_k^{(i)} \rangle |\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle \right) \tag{10}$$

から求めることが出来る。C は規格化定数である。$\{\langle \psi_k^{(i)} | \psi_l^{(i)} \rangle\}$ を計算すれば上記の正規直行基底が計算できる。一般化すると、

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \sum_{k'=1}^{K} P_{kk'}^{(i)} |\psi_{k'}^{(i)}\rangle \tag{11}$$

$$P_{kl}^{(i)} = P^{(i)}(\{\langle \psi_l^{(i)} | \psi_k^{(i)} \rangle\}) = P^{(i)}(\langle \psi_0^{(i)} | W_k^{(i)\ \dagger} W_l^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle) \tag{12}$$

と表すことができる。$P_{kk'}$ は $\{\langle \psi_k^{(i)} | \psi_l^{(i)} \rangle\}$ から計算することが出来る。この正規直行基底を単に局所基底と呼ぶことにする。この新しい局所基底を用いてハミルトニアンを書き換える。書き換えた後の有効ハミルトニアンの行列要素は

$$(\mathcal{H}_i^{\mathrm{eff}})_{kl} = \langle \tilde{\psi}_k^{(i)} | \mathcal{H}_i | \tilde{\psi}_l^{(i)} \rangle \tag{13}$$

$$= \sum_{k',l'} \langle \psi_{k'}^{(i)} | P_{kk'}^{(i)*} \mathcal{H}_i P_{ll'}^{(i)} | \psi_{l'}^{(i)} \rangle \tag{14}$$

$$= \sum_{k',l'} P_{kk'}^{(i)*} \langle \psi_0^{(i)} | W_{k'}^{(i)\ \dagger} \mathcal{H}_i W_{l'}^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle P_{ll'}^{(i)} \tag{15}$$

となる。

$$(\bar{\mathcal{H}}_i^{\mathrm{eff}})_{kl} = \langle \psi_k^{(i)} | \mathcal{H}_i | \psi_l^{(i)} \rangle \tag{16}$$

$$= \langle \psi_0^{(i)} | W_k^{(i)\ \dagger} \mathcal{H}_i W_l^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle \tag{17}$$

を用いて表すと (15) は

$$(\mathcal{H}_i^{\mathrm{eff}})_{kl} = \left(P^{(i)*} \bar{\mathcal{H}}_i^{\mathrm{eff}} P^{(i)T} \right)_{kl} \tag{18}$$

と表すことが出来る。演算子として表すと、

$$(\mathcal{H}_i^{\rm eff})_{kl}\,|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}| \tag{19}$$

となる。(12), (15) より計算すべき物理量は次の演算子

$$\{W_k^{(i)\,\dagger}W_l^{(i)}\},\{W_k^{(i)\,\dagger}\mathcal{H}_iW_l^{(i)}\} \tag{20}$$

の $|\psi_0^{(i)}\rangle$ による期待値である。相互作用についても考えていく。相互作用の有効ハミルトニアンは

$$(V_{ij}^{\rm eff})_{kk'll'}=\langle\tilde{\psi}_k^{(i)}|\,\langle\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}|\,V_{ij}\,|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle\,|\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}\rangle \tag{21}$$

となる。演算子として表すと、

$$(V_{ij}^{\rm eff})_{kk'll'}\,|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}|\otimes|\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}| \tag{22}$$

である。

$$V_{ij}=\sum_\nu v_\nu W_\nu^{(i)}\otimes W_\nu^{(j)} \tag{23}$$

なので、

$$(V_{ij}^{\rm eff})_{kk'll'}=\sum_\nu v_\nu\,\langle\tilde{\psi}_k^{(i)}|W_\nu^{(i)}|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}|W_\nu^{(j)}|\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}\rangle \tag{24}$$

とそれぞれの部分系の期待値に分解できる。(15) と同様に、

$$\langle\tilde{\psi}_k^{(i)}|W_\nu^{(i)}|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle=\sum_{k',l'}P_{kk'}^{(i)*}\,\langle\psi_0^{(i)}|W_{k'}^{(i)\,\dagger}W_\nu^{(i)}W_{l'}^{(i)}|\psi_0^{(i)}\rangle\,P_{ll'}^{(i)} \tag{25}$$

$$=\left(P^{(i)*}\bar{W}_\nu^{(i),\rm eff}P^{(i)T}\right)_{kl} \tag{26}$$

$$(\bar{W}_\nu^{(i),\rm eff})_{kl}\equiv\langle\psi_k^{(i)}|W_\nu^{(i)}|\psi_l^{(i)}\rangle=\langle\psi_0^{(i)}|W_k^{(i)\,\dagger}W_\nu^{(i)}W_l^{(i)}|\psi_0^{(i)}\rangle \tag{27}$$

と展開できるので、

$$(V_{ij}^{\rm eff})_{kk'll'}=\sum_\nu v_\nu\left(P^{(i)*}\bar{W}_\nu^{(i),\rm eff}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_\nu^{(j),\rm eff}P^{(j)T}\right)_{k'l'} \tag{28}$$

と表すことが出来る。以上より

$$\{W_k^{(i)\,\dagger}W_\mu^{(i)}W_l^{(i)}\} \tag{29}$$

の $|\psi_0^{(i)}\rangle$ による期待値を計算すれば良い。以上より

$$\mathcal{H}_i^{\text{eff}} = \sum_{kl} (\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{kl} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle \langle\tilde{\psi}_l^{(i)}| \tag{30}$$

$$V_{ij}^{\text{eff}} = \sum_{kk'll'} (V_{ij}^{\text{eff}})_{kk'll'} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle \langle\tilde{\psi}_l^{(i)}| \otimes |\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}\rangle \langle\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}| \tag{31}$$

と定義すれば有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \sum_i \mathcal{H}_i^{\text{eff}} + \sum_{ij} V_{ij}^{\text{eff}} \tag{32}$$

となる。i, j の数は今までと同じで各部分系の次元は削減されている。この有効ハミルトニアンを得るには $O(\text{poly}(M)K^2N)$ 回の量子コンピューターによる計算を実行する必要がある。は $\otimes_{i=1}^N |\tilde{\psi}_0^{(i)}\rangle$ でハミルトニアンの期待値を計算した

$$\mathcal{H}_{00}^{\text{eff}} = \sum_i (\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{00} + \sum_{i,j} (V_{ij}^{\text{eff}})_{0000} \tag{33}$$

がエネルギーの出発点となる。

続いては上記の有効ハミルトニアンを解くステップに移る。各部分系を解いて得られた局所基底の次元は K である。これを量子ビットを用いて表現するには $\lceil \log_2 K \rceil$ 個のビットが必要になる。もともとは n 個のビットを用いていたので $n \to \lceil \log_2 K \rceil$ 個に量子ビット数が削減できたことになる。全体で必要な量子ビット数は $m = N\lceil \log_2 K \rceil$ 個となり $M = nN$ から削減することが出来た。2^m 次元のヒルベルト空間の K^N 次元の部分空間に作用する変分回路を $V(\phi)$ とする。最適化すべきエネルギーは

$$\langle 0^m | V(\phi)^\dagger \mathcal{H}^{\text{eff}} V(\phi) | 0^m \rangle \tag{34}$$

となる。

上記の処理では VQE 計算は 2 回しか実行していないようにみえるが、実際にはこの処理を 1 セットとして問題を実機で扱えるサイズ単位に問題を分割して計算していく必要がある。まず第 1 段階では部分系間の相互作用を無視したハミルトニアンについて考える。このハミルトニアンは $l^{(1)} \times l^{(1)}$ の格子から構成されているとする。このハミルトニアンを VQE で解いて得られる局所基底の次元は $O(log_2 l^{(1)})$ である。この局所基底を用いて有効ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(1)}$ を作成する。この $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(1)}$ は最初に無視していた部分系間の相互作用 (有効相互作用) を取り入れる。

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(1)}(i,j) = \mathcal{H}_i^{\text{eff}} + \mathcal{H}_j^{\text{eff}} + V_{ij}^{\text{eff}} \tag{35}$$

これを新たな部分系として、この新たな部分系間の作用する有効相互作用 $\{W_{k,\text{eff}}^{(1)}\}$ を定義する。この相互作用を用いて次の新たな局所基底を作成する。第 2 段階では $l^{(2)} \times l^{(2)}$ の格子について考える。単位格子あたり $O(log_2 l^{(1)})$ の量子ビットが必要になるので、系全体では $O((l^{(2)})^2 log_2 l^{(1)})$ となる。次の局所基底を作成する際は、最初の相互作用 $W_k^{(0)}$ と $\{W_{k,\text{eff}}^{(1)}\}$ を足したものを考える必要がある？

2 Numerical Simulation

4 量子ビットのハイゼンベルグ反強磁性モデルについて考える。

$$\mathcal{H}_i = \sum_{(\mu,\nu)} (X_\mu^{(i)} X_\nu^{(i)} + Y_\mu^{(i)} Y_\nu^{(i)} + Z_\mu^{(i)} Z_\nu^{(i)}) \tag{36}$$

$$= \sum_{(\mu,\nu)} \sum_{A=X,y,Z} A_\mu^{(i)} A_\nu^{(i)} \tag{37}$$

$E = \{(0,1),(1,2),(2,3),(3,0),(0,2)\}$ である。部分系間の相互作用は 1 次元方向につながる以下の形をしている。

$$V_{01} = \sum_{A=X,Y,Z} (A_0^{(i)} A_2^{(j)} + A_2^{(i)} A_0^{(j)}) \tag{38}$$

$\mathcal{H}_i$ の基底状態を $|\psi_0^{(i)}\rangle$ とすると局所基底は

$$\{|\psi_0^{(i)}\rangle, A_0^{(i)}|\psi_0^{(i)}\rangle, A_2^{(i)}|\psi_0^{(i)}\rangle\} \tag{39}$$

である。これは全部で 7 個ある。有効ハミルトニアンを構成するには

3 実装

3.1 有効ハミルトニアンの実装

1 回目の VQE を実行した後の有効ハミルトニアンの実装について考える。得られた局所基底を量子ビットに対応させる必要がある。例えば $K = 7$ の場合、3 量子ビットを使って

$$|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle = |000\rangle \tag{40}$$
$$|\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle = |001\rangle \tag{41}$$
$$|\tilde{\psi}_3^{(i)}\rangle = |010\rangle \tag{42}$$
$$|\tilde{\psi}_4^{(i)}\rangle = |011\rangle \tag{43}$$
$$|\tilde{\psi}_5^{(i)}\rangle = |100\rangle \tag{44}$$
$$|\tilde{\psi}_6^{(i)}\rangle = |101\rangle \tag{45}$$
$$|\tilde{\psi}_7^{(i)}\rangle = |110\rangle \tag{46}$$

と定義する。有効ハミルトニアンの行列要素は前章の方法で計算すれば良いが同時にこの量子ビットに作用する演算子も構成する必要がある。最初のハミルトニアンに含まれていた演算子は前の量子ビットに対して定義されていたもので新しい基底に対応する量子ビットとは異なることに注意する必要がある。有効ハミルトニアンの行列要素は

$$(\mathcal{H}_i^{\mathrm{eff}})_{kl} = \langle\tilde{\psi}_k^{(i)}|\mathcal{H}_i|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle \tag{47}$$

であった。演算子も含めて表すと、

$$(\mathcal{H}_i^{\mathrm{eff}})_{kl}\,|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}| \tag{48}$$

となる。$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\,\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}|$ が新しい量子ビットに作用する演算子である。これを量子ゲートで表現していく。以下の演算子を量子ゲートを用いて表していく。

$$|0\rangle\langle 0|\,,|0\rangle\langle 1|\,,|1\rangle\langle 0|\,,|1\rangle\langle 1| \tag{49}$$

Z ゲートは

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \tag{50}$$

と表すことが出来る。恒等演算子 I が

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \tag{51}$$

であるので、

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(I+Z) \tag{52}$$

$$|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(I-Z) \tag{53}$$

と表すことが出来る。続いて X ゲートは

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \tag{54}$$

であり、XZ ゲートを計算してみると、

$$XZ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{55}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{56}$$

$$= |1\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1| \tag{57}$$

なので

$$|0\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(X - XZ) \tag{58}$$

$$|1\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(X + XZ) \tag{59}$$

と表すことが出来る。まとめると、

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(I+Z) \tag{60}$$

$$|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(I-Z) \tag{61}$$

$$|0\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(X - XZ) \tag{62}$$

$$|1\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(X + XZ) \tag{63}$$

となる。これらを用いると例えば、

$$|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_2^{(i)}| = |000\rangle\langle 001| = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 1| \tag{64}$$

$$= \frac{1}{2}(I_0 + Z_0) \otimes \frac{1}{2}(I_1 + Z_1) \otimes \frac{1}{2}(X_2 - X_2 Z_2) \tag{65}$$

と表すことが出来る。1 量子ビットの遷移演算子の項数分だけの要素を持つリストを作成してそれぞれかけていく。

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}[I, Z] \tag{66}$$
$$|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}[I, -Z] \tag{67}$$
$$|0\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}[X, -XZ] \tag{68}$$
$$|1\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}[X, XZ] \tag{69}$$

と表記すると、

$$\begin{aligned}
|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_2^{(i)}| &= |000\rangle\langle 001| && (70)\\
&= \frac{1}{8}[I_0, Z_0]\cdot[I_1, Z_1]\cdot[X_2, -X_2Z_2] && (71)\\
&= \frac{1}{8}[I_0I_1, Z_1, Z_0, Z_0Z_1]\cdot[X_2, -X_2Z_2] && (72)\\
&= \frac{1}{8}[X_2, -X_2Z_2, Z_1X_2, -Z_1X_2Z_2, Z_0X_2, -Z_0X_2Z_2, Z_0Z_1X_2, -Z_0Z_1X_2Z_2] && (73)\\
&= \frac{1}{8}[X_2, iY_2, Z_1X_2, iZ_1Y_2, Z_0X_2, iZ_0Y_2, Z_0Z_1X_2, iZ_0Z_1Y_2] && (74)
\end{aligned}$$

と表すことが出来る。同様に

$$\begin{aligned}
|\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}| &= |001\rangle\langle 000| && (75)\\
&= \frac{1}{8}[I_0, Z_0]\cdot[I_1, Z_1]\cdot[X_2, X_2Z_2] && (76)\\
&= \frac{1}{8}[I_0I_1, Z_1, Z_0, Z_0Z_1]\cdot[X_2, X_2Z_2] && (77)\\
&= \frac{1}{8}[X_2, X_2Z_2, Z_1X_2, Z_1X_2Z_2, Z_0X_2, Z_0X_2Z_2, Z_0Z_1X_2, Z_0Z_1X_2Z_2] && (78)\\
&= \frac{1}{8}[X_2, -iY_2, Z_1X_2, -iZ_1Y_2, Z_0X_2, -iZ_0Y_2, Z_0Z_1X_2, -iZ_0Z_1Y_2] && (79)
\end{aligned}$$

となる。これより、

$$(|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_2^{(i)}|)^\dagger = |\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}| \tag{80}$$

であることも確かめられる。

相互作用の有効ハミルトニアンは

$$(V_{ij}^{\mathrm{eff}})_{kk'll'}\,|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}|\otimes|\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}\rangle\langle\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}| \tag{81}$$

と表すことができる。相互作用を具体的に書き下すと、

$$(V_{ij}^{\mathrm{eff}})_{kk'll'} = \sum_{\nu} v_\nu \left(P^{(i)*}\bar{W}_\nu^{(i),\mathrm{eff}}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_\nu^{(j),\mathrm{eff}}P^{(j)T}\right)_{k'l'} \tag{82}$$

$$= \sum_{W=X,Y,Z}\left[\left(P^{(i)*}\bar{W}_0^{(i),\mathrm{eff}}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_2^{(j),\mathrm{eff}}P^{(j)T}\right)_{k'l'} + \left(P^{(i)*}\bar{W}_2^{(i),\mathrm{eff}}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_0^{(j),\mathrm{eff}}P^{(j)T}\right)_{k'l'}\right] \tag{83}$$

$$(\bar{W}_\nu^{(i),\mathrm{eff}})_{kl} \equiv \langle\psi_k^{(i)}|W_\nu^{(i)}|\psi_l^{(i)}\rangle = \langle\psi_0^{(i)}|W_k^{(i)\ \dagger}W_\nu^{(i)}W_l^{(i)}|\psi_0^{(i)}\rangle \tag{84}$$

量子ビットの番号はそれぞれの部分系を起点につけられたものとする。演算子まで含めると、

$$\left(\left(P^{(i)*}\bar{W}_0^{(i),\mathrm{eff}}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_2^{(j),\mathrm{eff}}P^{(j)T}\right)_{k'l'} + \left(P^{(i)*}\bar{W}_2^{(i),\mathrm{eff}}P^{(i)T}\right)_{kl}\left(P^{(j)*}\bar{W}_0^{(j),\mathrm{eff}}P^{(j)T}\right)_{k'l'}\right)|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\,|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle \otimes \langle\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}|\,\langle\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}| \tag{85}$$

3.2 P の実装

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \frac{1}{C}\left(|\psi_k^{(i)}\rangle - \sum_{l<k}\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}|\psi_k^{(i)}\rangle\,|\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle\right) \tag{86}$$

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \sum_{k'=1}^{K} P_{kk'}^{(i)}\,|\psi_{k'}^{(i)}\rangle \tag{87}$$

$K = 3$ で考えてみる。$P_1 = (p_{11}, p_{12}, p_{13})$ として、各成分の値は $|\psi_k^{(i)}\rangle$ の係数とする。$P_1 = (p_{11}, p_{12}, p_{13})$ はベクトルではなく単なるリストであることに注意する。$k = 1$ の場合、

$$|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_1}\,|\psi_1^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_1}(1,0,0) \tag{88}$$

規格化定数は

$$\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_1^2}\,\langle\psi_1^{(i)}|\psi_1^{(i)}\rangle = 1 \tag{89}$$

から求める。$k = 2$ の場合、

$$|\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_2}\left(|\psi_2^{(i)}\rangle - \langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle\,|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle\right) \tag{90}$$

$|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle$ は前の結果を使える。$\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle$ を計算する必要がある。これは次のように計算できる。

$$\begin{aligned}\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle &= \frac{1}{C_1}(1,0,0)\cdot(\langle\psi_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle, \langle\psi_2^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle, \langle\psi_3^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle) &(91)\\ &= \frac{1}{C_1}\langle\psi_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle &(92)\end{aligned}$$

$\langle\psi_i^{(i)}|\psi_j^{(i)}\rangle \neq \delta_{ij}$ であることに注意する。 よって、

$$|\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_2}(-\frac{1}{C_1^2}\langle\psi_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle, 1, 0) \tag{93}$$

となる。$k=3$ に向けて $\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle, \langle\tilde{\psi}_2^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle$ をあらかじめ計算しておく。

$$\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_1}\langle\psi_1^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle \tag{94}$$

$$\langle\tilde{\psi}_2^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_2}\left(-\frac{1}{C_1^2}\langle\psi_1^{(i)}|\psi_2^{(i)}\rangle\langle\psi_1^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle + \langle\psi_2^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle\right) \tag{95}$$

となる。$k=3$ の場合、

$$|\tilde{\psi}_3^{(i)}\rangle = \frac{1}{C_3}\left(|\psi_3^{(i)}\rangle - \langle\tilde{\psi}_1^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle - \langle\tilde{\psi}_2^{(i)}|\psi_3^{(i)}\rangle|\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle\right) \tag{96}$$

となり、上記の値を代入していけば求めることが出来る。実装すべき点は

- $k=1$ は単純に構成できる。(規格化定数も求める。)
- $k>1$ では $j<k$ なる j に対して $\langle\tilde{\psi}_j^{(i)}|\psi_k^{(i)}\rangle$ をあらかじめ計算する。
- 上で求めた値を $|\tilde{\psi}_j^{(i)}\rangle$ 全体にかけて $j<k$ なる j に対してリストのそれぞれの成分を足し合わせていく。
- 上で求めたリストを用いて $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle$ に対する係数が求まる。最後に規格化定数を求める。
- 上記を繰り返す。

References

[1] Deep Variational Quantum Eigensolver: a divide-and-conquer method for solving a larger problem with smaller size quantum computers