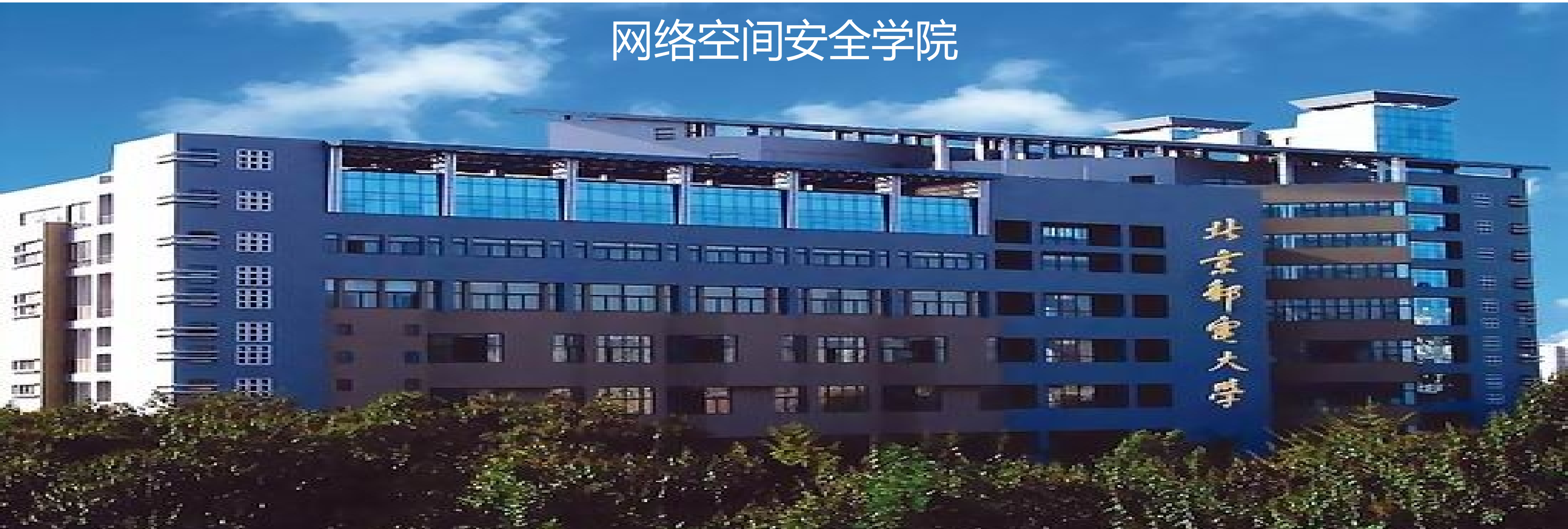
第5讲 变分量子算法

综述：Kishor Bharti et al, Noisy intermediate-scale quantum (NISQ) algorithms, arXiv:2101.08448, 2021

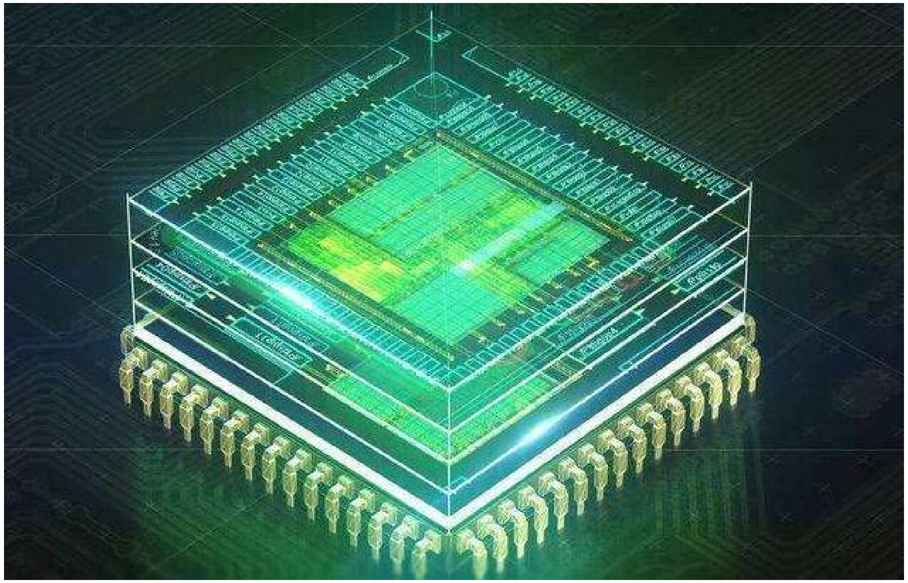
高 飞

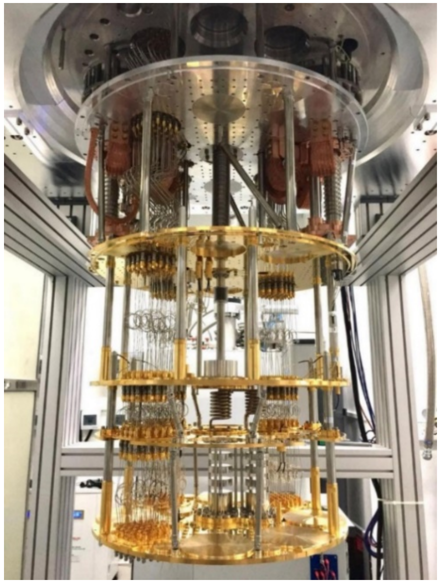
网络空间安全学院



大纲

- 变分量子算法
- 变分量子算法求解线性方程组
- 变分量子奇异值分解
- 变分量子算法的应用





背景

- 通用量子计算机近期难以实现
  - 近期设备无法运行：大数分解、数据库搜索、方程组求解[1-3]

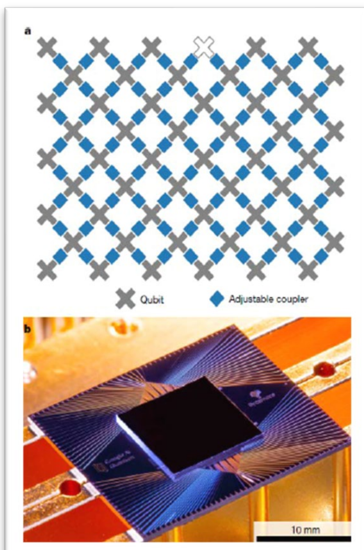
理 想
充足的量子比特数
任意深的量子线路

实 际
少数量子比特
浅层量子线路

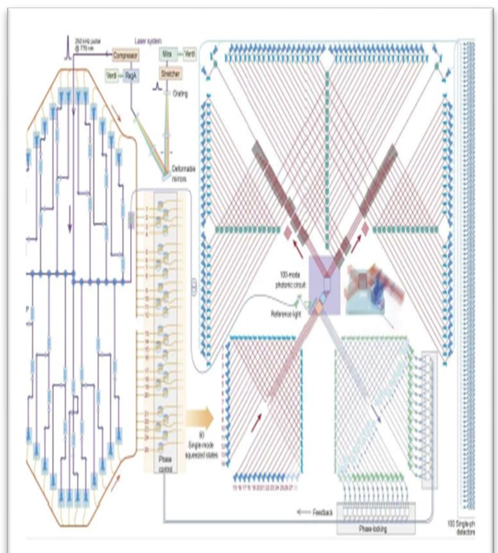
[1] P. W. Shor, in Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (1994) pp. 124–134.
[2] L. K. Grover, Phys. Rev. Lett. 79, 325 (1997). [3] A. W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd, Phys. Rev.Lett. 103, 150502 (2009).

背景

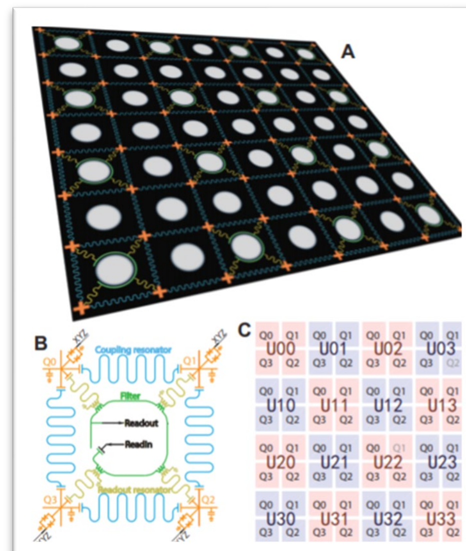
- ➢ 通用量子计算机近期难以实现
  - ❑ 近期设备无法运行：大数分解、数据库搜索、方程组求解[1-3]
- ➢ 含噪中型量子(Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ)设备
  - ❑ 特征：Qubit数少（几十到几百）、线路深度浅、有噪声
  - ❑ 能否用它展现量子优势？——随机线路采样、玻色采样等特殊领域已展现



(Google AI,Nature,2019)
随机线路采样, 54qubit
，Sycamore量子芯片



(J.W.Pan et al,Science,2020)
九章，玻色采样，
76qubit 光量子计算机

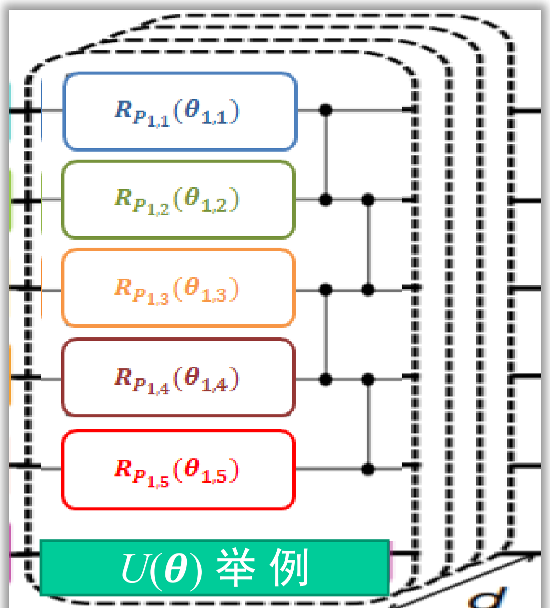


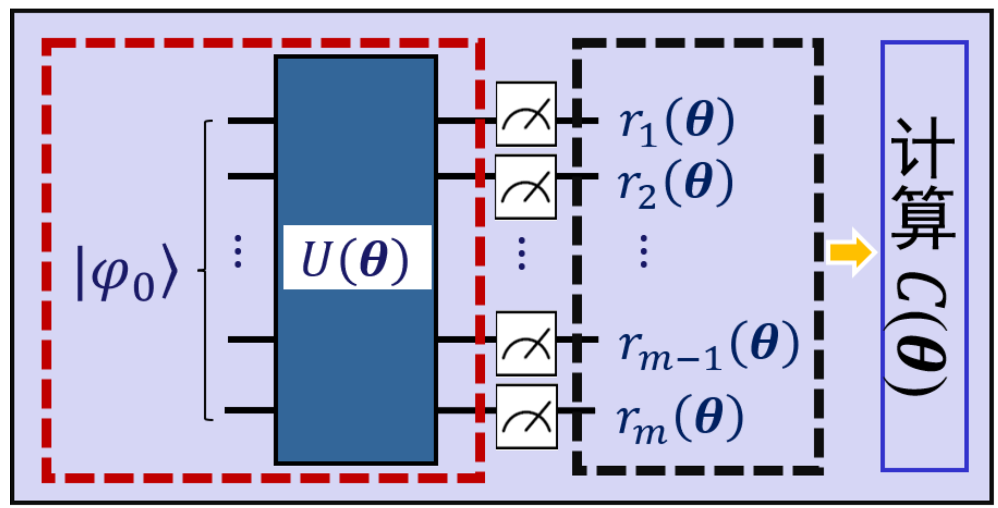
(J.W.Pan et al,Science,2021)
祖冲之号，量子漫步，
62qubit，超导量子计算机

变分量子算法
(Variational Quantum Algorithm, VQA)

VQA [1-4]：一种类似于神经网络、解决优化问题的启发式算法
NISQ设备的一种重要应用方法

- ❑ 含参量子线路：调整参数，会引起输出状态的改变
  - 量子态的表示能力：少数qubit、浅层，就能实现大的输出状态空间
- ❑ 计算并最小化代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$：指引参数的调整方向，向问题的解演化
  - 代价函数：衡量模型预测出来的值与真实值之间差异的函数





混合算法 | 量子：演化并输出测量结果 | 经典：计算代价函数及调参方向（如梯度）

[1] A. Peruzzo, J. McClean,et al, Nat. Commun. **5**, 4213 (2014).
[2] M. Cerezo , Andrew Arrasmith ,et al.,arXiv:2012.09265(2020).
[3] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, arXiv:1411.4028 (2014).
[4] McClean,Jarrod R.,et al.New Journal of Physics 18.2023023(2016).

变分量子算法
(Variational Quantum Algorithm, VQA)

VQA [1-4]：一种类似于神经网络、解决优化问题的启发式算法
NISQ设备的一种重要应用方法

- 含参量子线路：调整参数，会引起输出状态的改变
  - 量子态的表示能力：少数qubit、浅层，就能实现大的输出状态空间
- 计算并最小化代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$：指引参数的调整方向，向问题的解演化
  - 代价函数：衡量模型预测出来的值与真实值之间差异的函数
  - $C(\boldsymbol{\theta})$是$\boldsymbol{\theta}$的多元($\boldsymbol{\theta}$是多个参数的向量) 连续函数，可用梯度下降等方法优化
- VQA特点：可在NISQ设备实现，并可能产生量子优势
  - 噪声影响：求均值、优化、启发式等因素有望一定程度上抑制噪声影响；一般可用不同参数做多组实验，选取最小的一个$C(\boldsymbol{\theta})$
  - 量子优势：qubit多时，经典计算机无法模拟量子线路中的态演化

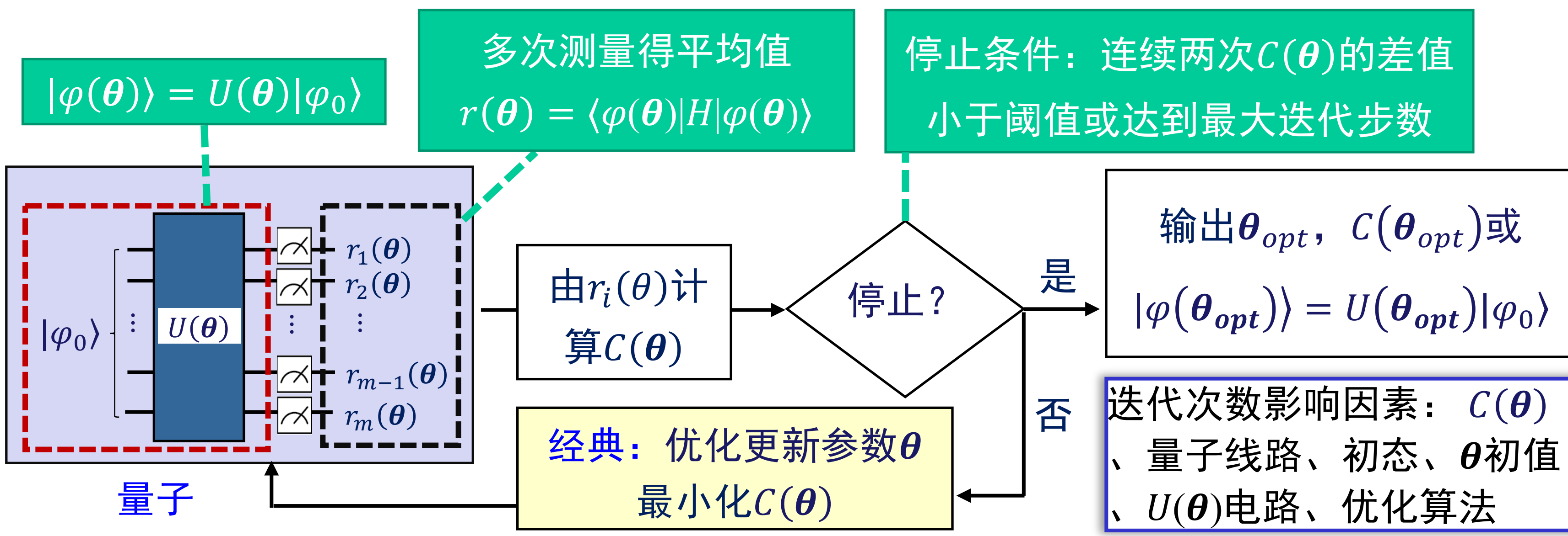
混合算法	量子：演化并输出测量结果	经典：计算代价函数及调参方向（如梯度）

[1] A. Peruzzo, J. McClean,et al, Nat. Commun. **5**, 4213 (2014).
[2] M. Cerezo , Andrew Arrasmith ,et al.,arXiv:2012.09265(2020).
[3] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, arXiv:1411.4028 (2014).
[4] McClean,Jarrod R.,et al.New Journal of Physics 18.2023023(2016).

VQA算法框架

- 核心：构造代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$，使其最小值（或对应的量子态）为问题的解
  - (1) 搭建浅层、含参酉门序列 $U(\boldsymbol{\theta})$：输入初态 $|\varphi_0\rangle$，输出$|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle = U(\boldsymbol{\theta})|\varphi_0\rangle$
  - (2) 求代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$：力学量的**均值**（或其函数），可用多次**简单测量**获得
  - (3) 采用经典优化器（比如梯度下降）来优化更新参数$\boldsymbol{\theta}$，以最小化$C(\boldsymbol{\theta})$
  - (4) 重复(2-3)过程，直到$C(\boldsymbol{\theta})$或迭代次数满足停止条件，此时输出$\boldsymbol{\theta}_{opt}$，得到$C(\boldsymbol{\theta}_{opt})$，对应量子态为 $|\varphi(\boldsymbol{\theta}_{opt})\rangle = U(\boldsymbol{\theta}_{opt})|\varphi_0\rangle$

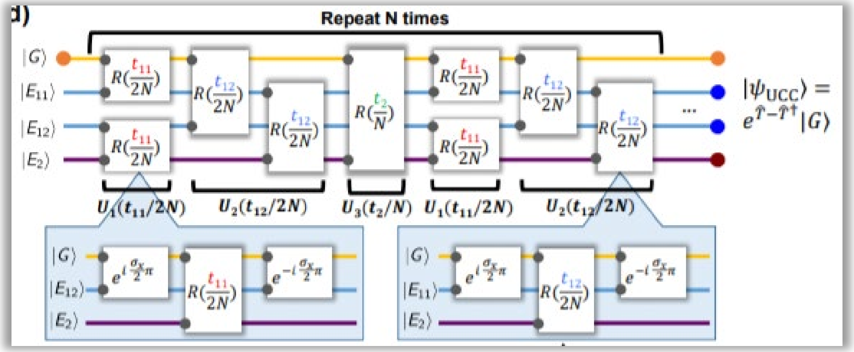
设计重点：量子线路 (更大的态空间)、**代价函数** (什么态是问题的解)

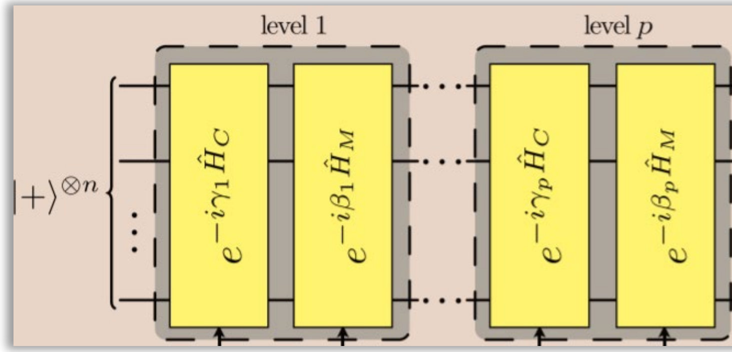


量子线路 (Ansatz) 的设计

- 目的：在qubit数、层数受限情况下，通过调参使输出可达（或足够接近）所求的量子态
  - 因为结构简单、层数浅、参数少且取值不连续，不可能输出任意态
    - 层数多、qubit多、参数多，都会增加实现难度
- Ansatz (德语)：拟设，“工具在工件上的初始放置”
  - 无统一设计标准：围绕目的，凭经验来尝试，并通过实践检验
    - 如QAOA：类比绝热演化而来，但又有很多“近似”的地方
  - 有一些已经经过验证的有效形式可以借鉴（下页）
  - 也可通过训练来优化（追求更大的梯度或更低的代价函数）

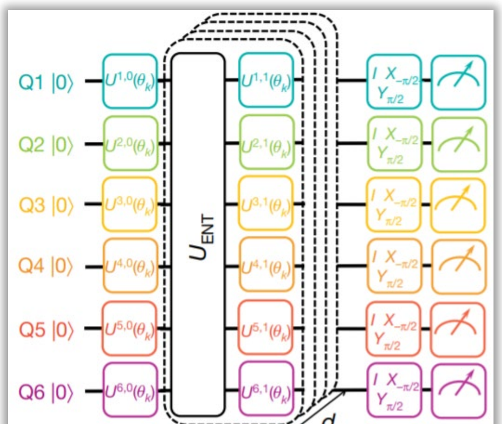
常见$U(\boldsymbol{\theta})$量子电路

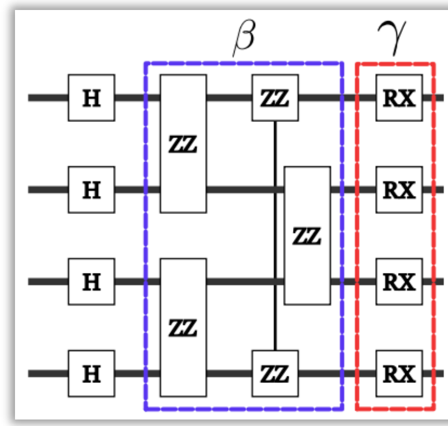




Unitary coupled [1-2] 应用：求分子基态与激发态
形式：$(\exp[-i\theta_1(T-T^\dagger)]\cdots\exp[-i\theta_l(T-T^\dagger)])^N$
T为费米子哈密顿量

QAOA [3-4] 应用：组合优化
形式：$\exp[-i\beta_p H_M]\exp[-i\gamma_p H_c]\cdots\exp[-i\beta_1 H_M]\exp[-i\gamma_1 H_c]$
H_c为目标哈密顿量，$H_M=\sum_{i=0}^{n} X_i$，p为线路层数





Hardware-efficient [5-6] 应用：机器学习
形式：$U(\theta_l)U_{ent}U(\theta_{l-1})\cdots U_{ent}U(\theta_1)$
$U(\theta_l)$（单比特门:$R_X(\theta_l)$）U_{ent}（两比特门:CNOT）

Hamiltonian Variational [7-8] 应用：量子模拟
形式：$\exp[-i\beta H_1]\exp[-i\gamma H_2]$，
目标哈密顿量 $H=H_1+H_2$

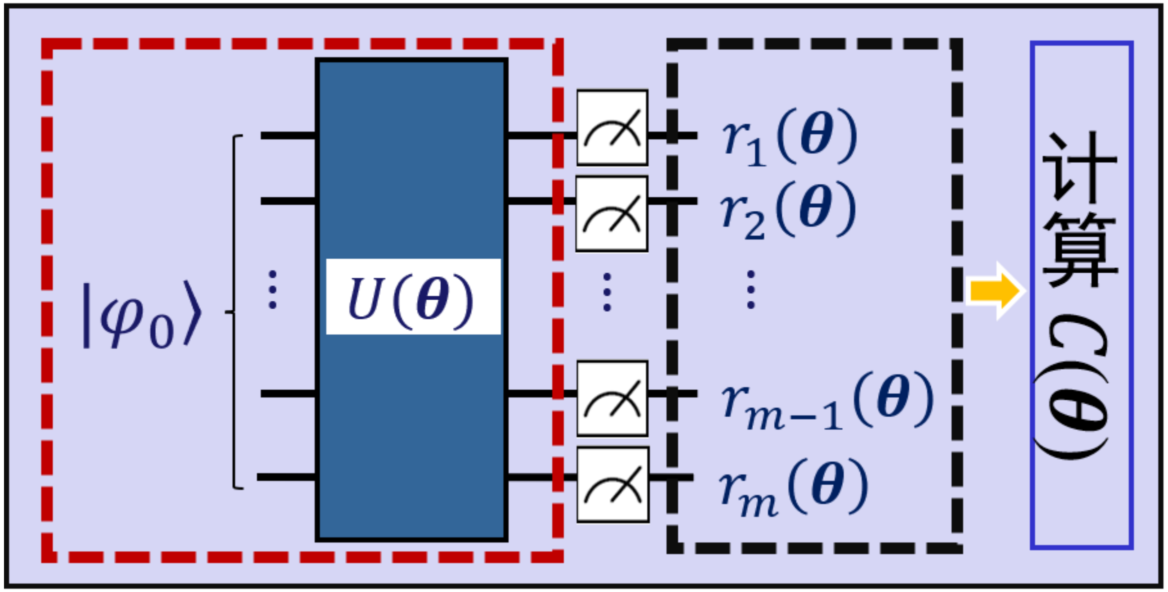
[1]A. Peruzzo, J. McClean, et al.Nat. Commun.4213 (2014). [2]Shen, Yangchao, et al.. *Physical Review A* 95.:2 .020501(2017). [3]Farhi E, Goldstone J, Gutmann S. arXiv preprint arXiv:1411.4028, (2014). [4]Vikstål, Pontus, et al. *Physical Review Applied* 14.3: 034009(2020). [5] Kandala, A. et al. Nature （2017). [6]Havlíček V, Córcoles A D, Temme K, et al.. Nature,, 567(7747): 209(2019). [7]Wiersema, Roeland, et al. *PRX Quantum* 1.2 : 020319(2020) [8]Wen Wei Ho and Timothy H Hsieh, SciPost.Phys 6,029(2019)

代价函数（可观测量）的设计

- 代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$的设计： 挂钩具体问题 (什么态是问题的解)
  - 优化目标一般为最值：使$C(\boldsymbol{\theta})$ 最小值 (或相应输出态) 为问题的解
    - 量子线路能给：对输出态测某观测量H的均值 $r(\boldsymbol{\theta}) = \langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|H|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
    - $C(\boldsymbol{\theta})$：是 $r(\boldsymbol{\theta})$ 的一个函数，一般直接取 $r(\boldsymbol{\theta})$

核心：如何设计可观测量H

$C(\boldsymbol{\theta})$ 取 $r(\boldsymbol{\theta})$ 时：给我搜“测H时均值最小”的态 (此时均值或态就是问题的解)



代价函数（可观测量）的设计

- 代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$的设计：挂钩具体问题 (什么态是问题的解)
  - ❑ 优化目标一般为最值：使$C(\boldsymbol{\theta})$ 最小值 (或相应输出态) 为问题的解
    - 量子线路能给：对输出态测某观测量H的均值 $r(\boldsymbol{\theta}) = \langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|H|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
    - $C(\boldsymbol{\theta})$：是 $r(\boldsymbol{\theta})$ 的一个函数，一般直接取 $r(\boldsymbol{\theta})$

核心：如何设计可观测量H

$C(\boldsymbol{\theta})$ 取 $r(\boldsymbol{\theta})$ 时：给我搜“测H时均值最小”的态 (此时均值或态就是问题的解)

如何确保“测H时均值最小”的态或该均值就是问题的解？

- ❑ 问题的解是数值时：设计H，使得“解是H 的最小特征值”
  - Why？观察$C(\boldsymbol{\theta})$，其最小值就是H 的最小特征值
- ❑ 解是量子态/向量：设计H，使得“解是H 的唯一基态”

  最小特征值对应的特征向量

  - Why？若电路输出态是H基态，测量结果$C(\boldsymbol{\theta})$为最小特征值；反之$C(\boldsymbol{\theta})$最小时，说明输出态是基态（即解）
  - 唯一：若最小特征值对应多个特征向量，则$C(\boldsymbol{\theta})$最小时$|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$不一定是解

代价函数（可观测量）的设计

- 代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$的设计： 挂钩具体问题 (什么态是问题的解)
  - 优化目标一般为最值：使$C(\boldsymbol{\theta})$ 最小值 (或相应输出态) 为问题的解
    - 量子线路能给：对输出态测某观测量H的均值 $r(\boldsymbol{\theta}) = \langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|H|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
    - $C(\boldsymbol{\theta})$：是 $r(\boldsymbol{\theta})$ 的一个函数，一般直接取 $r(\boldsymbol{\theta})$

核心：如何设计可观测量H

$C(\boldsymbol{\theta})$ 取 $r(\boldsymbol{\theta})$ 时：给我搜“测H时均值最小”的态 (此时均值或态就是问题的解)

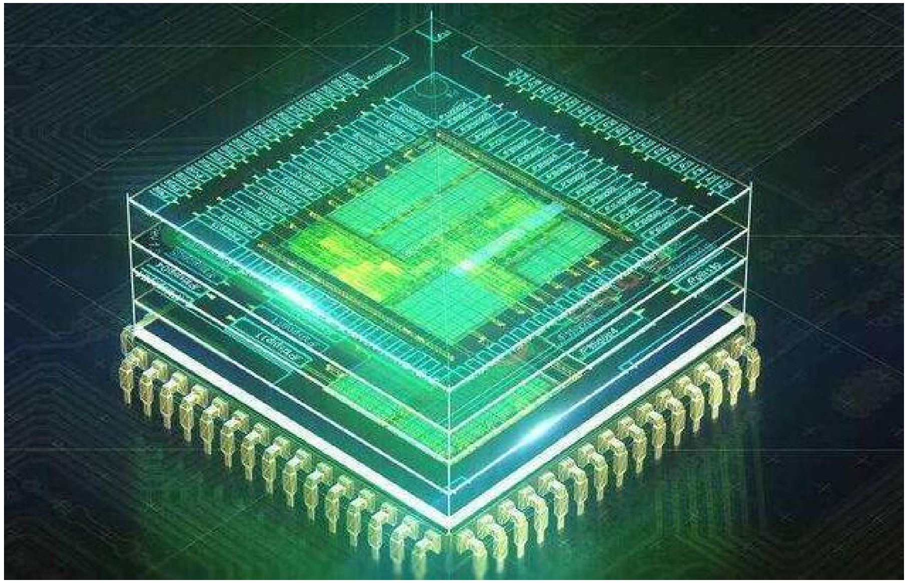
- 可观测量H的设计要求
  - 问题的解是H 的最小特征值或其对应的唯一特征向量（基态）
  - H可分解成一组简单算子的张量积之和（项数较少）——可实现
    - $r(\boldsymbol{\theta})$ = 各项均值之和（各项均值可通过测量得到）

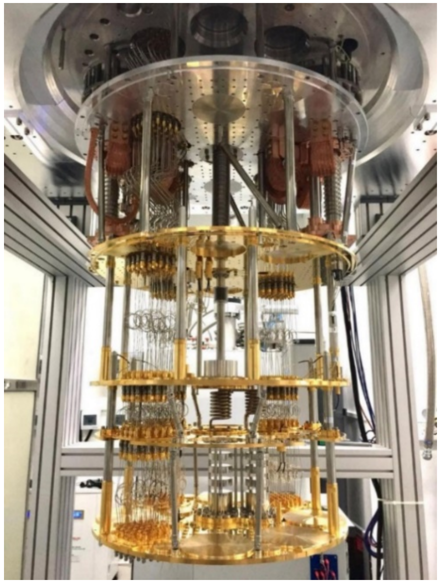
相关分类

- VQE (Variational Quantum Eigensolver)：用来求物理系统基态的VQA
- QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm)：用来求优化问题的VQA
- VQA：除了VQE、QAOA，还包括解决其他问题的算法，如方程组求解、飞机尾号分配等

大纲

- 变分量子算法
- 变分量子算法求解线性方程组
- 变分量子奇异值分解
- 变分量子算法的应用





VQA求解线性方程组[1]

- VQA求解线性方程组 $A|\boldsymbol{x}\rangle = |\boldsymbol{b}\rangle$

非厄米可扩充成厄米；可逆有唯一解

  - 假设：(1) $|\boldsymbol{b}\rangle$可被有效制备； (2) $A \in R^{n*n}$是厄米且可逆矩阵
  - 目标：构造代价函数$C(\boldsymbol{\theta})$，使其最小值时对应的量子态为问题的解
    - $C(\boldsymbol{\theta})$选择 $r(\boldsymbol{\theta}) = \langle \varphi(\boldsymbol{\theta})|H|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$，即找到某观测量$H$，使得解量子态

$$|\boldsymbol{x}\rangle = A^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle / \| A^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle \|$$

归一化系数

为H的唯一基态（最小特征值对应的特征向量）

    - 构造：$H = A^{\dagger}(I - |\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|)A$，$|\boldsymbol{x}\rangle$为$H$ 唯一基态

若电路输出态为$|\boldsymbol{x}\rangle$，测量结果为最小特征值；反之结果最小时说明是解

证明

(1) 半正定（特征值大于等于0）：令$C = (I - |\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|)A$，有 $H = C^{\dagger}C$，故H半正定

(2) $|\boldsymbol{x}\rangle$为基态，且对应特征值为0（最小）

$$H|\boldsymbol{x}\rangle = A^{\dagger}(I - |\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|)A\frac{\mathrm{A}^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle}{\|\mathrm{A}^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle\|} = \frac{\mathbf{1}}{\|\mathrm{A}^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle\|}A^{\dagger}(|\boldsymbol{b}\rangle - |\boldsymbol{b}\rangle) = 0|\boldsymbol{x}\rangle$$

(3) 唯一性：$|\boldsymbol{b}\rangle$是$I - |\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|$的0特征值唯一特征向量，意味着$|\boldsymbol{x}\rangle$为$H$的0特征值唯一特征向量

- 已构造$C(\boldsymbol{\theta})$和相应H，下面看H是否能分解成简单厄米算子张量积之和

[1]Bravo-Prieto C, LaRose R, et al. arXiv preprint arXiv:1909.05820,（2019).

分解H

- 已知代价函数$C(\boldsymbol{\theta})=\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|H|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$，将 $H=A^{\dagger}(I-|\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|)A$ 代入

$$C(\boldsymbol{\theta})=\left\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})\middle|A^{\dagger}A\middle|\varphi(\boldsymbol{\theta})\right\rangle-\left\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})\middle|A^{\dagger}|\boldsymbol{b}\rangle\langle\boldsymbol{b}|A\middle|\varphi(\boldsymbol{\theta})\right\rangle \xleftrightarrow{A^{\dagger}=A}$$

$$=\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|A^2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle-|\langle\boldsymbol{b}|A|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle|^2$$

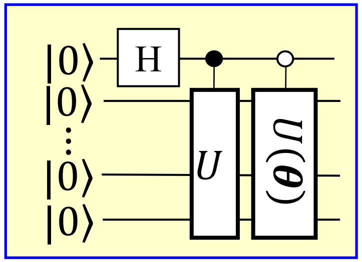
对$|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$测量力学量$A^2$即可　　通过测量高维系统来实现

对 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|\boldsymbol{b}\rangle+|1\rangle|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle)$ 测量力学量 $X\otimes A$

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

均值 $=2Re(\langle\boldsymbol{b}|A|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle)$

一般假设$|\boldsymbol{b}\rangle$易制备，此时上态易制备（右图）

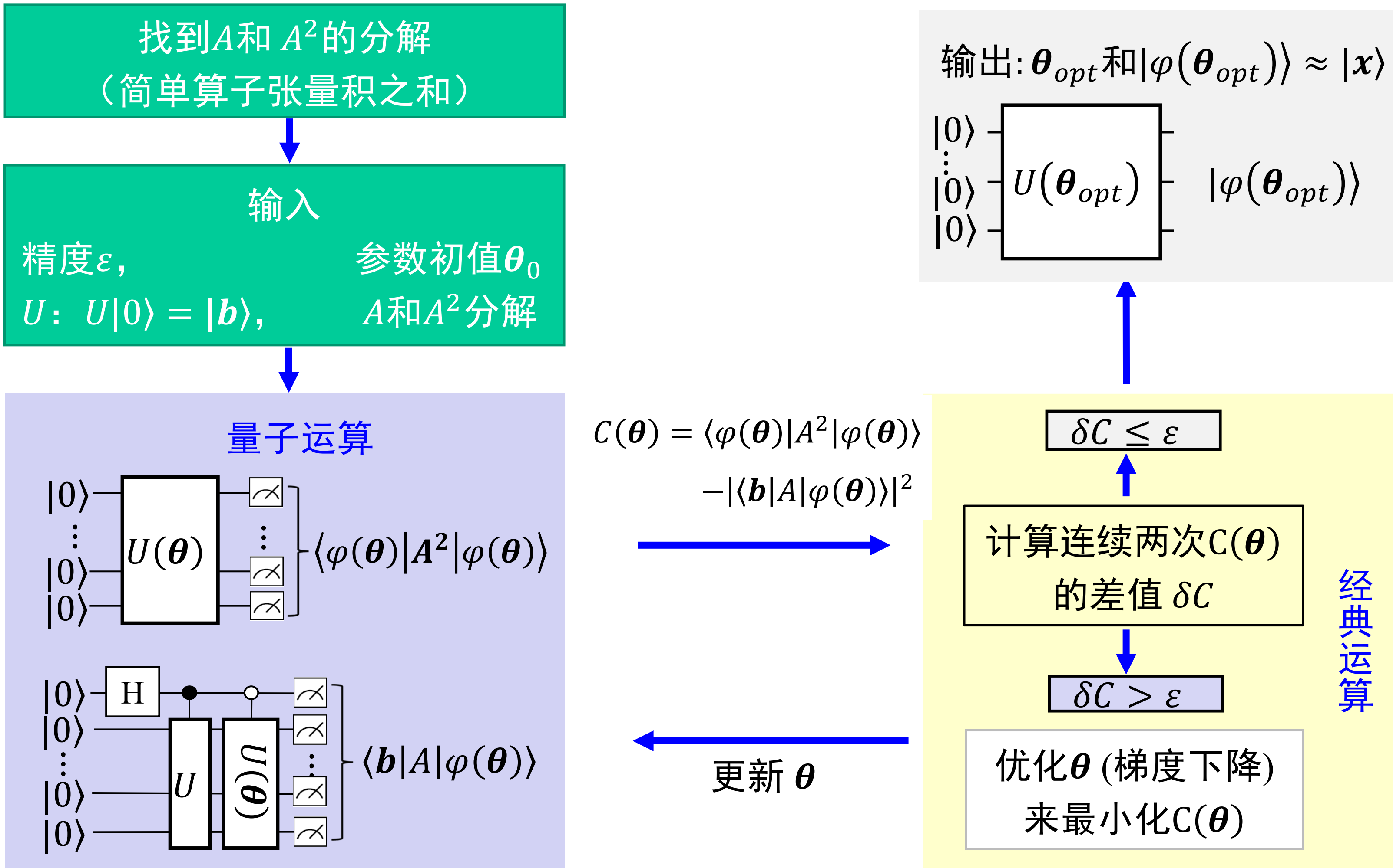


同理，对 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|\boldsymbol{b}\rangle+i|1\rangle|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle)$ 测 $X\otimes A$，均值$=-2Im(\langle\boldsymbol{b}|A|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle)$

找 H 的分解 转化到 找 A和A^2 的分解：poly(log$n$)项简单算子张量积之和

具体分解视问题中的A而定

算法流程


找到A和 A^2的分解
（简单算子张量积之和）
输入
精度ε，
参数初值$\boldsymbol{\theta}_0$
U： $U|0\rangle = |\boldsymbol{b}\rangle$，
A和A^2分解
量子运算
$|0\rangle$
$U(\boldsymbol{\theta})$
$\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|\boldsymbol{A}^2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
H
U
$U(\boldsymbol{\theta})$
$\langle\boldsymbol{b}|A|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
$C(\boldsymbol{\theta}) = \langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|A^2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$
$-|\langle\boldsymbol{b}|A|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle|^2$
更新 $\boldsymbol{\theta}$
输出: $\boldsymbol{\theta}_{opt}$和$|\varphi(\boldsymbol{\theta}_{opt})\rangle \approx |\boldsymbol{x}\rangle$
$U(\boldsymbol{\theta}_{opt})$
$|\varphi(\boldsymbol{\theta}_{opt})\rangle$
$\delta C \leq \varepsilon$
计算连续两次C($\boldsymbol{\theta}$)
的差值 δC
$\delta C > \varepsilon$
优化$\boldsymbol{\theta}$ (梯度下降)
来最小化C($\boldsymbol{\theta}$)
经典运算

例子

$A = I + 0.2X_1Z_2I_{3,4,5} + 0.2X_1I_{2,3,4,5}$，（32维矩阵，5 qubit） $|b\rangle = H_1H_2H_3H_4H_5|0\rangle^{\otimes 5}$

$A^2 = 1.08I + 0.4X_1 + 0.08Z_2 + 0.4X_1Z_2$

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，$X$和$Z$测量易实现

此时：$\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|A^2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle =$

$1.08\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|I|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.4\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|X_1|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.08\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|Z_2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.4\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|X_1Z_2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$

不测，等于1　　用X基测q1　　用Z基测q2　　分别用X基和Z基测q1和q2，结果乘积的均值

注1：$\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|X_1Z_2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$：对$|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$测$X_1 \otimes Z_2$力学量的平均值 (特征值加权平均)

注2：力学量$X_1 \otimes Z_2$的特征值等于X_1的特征值{1, -1} * Z_2的特征值{1, -1}

只{1, -1} 2个特征值，分别对应2个特征向量

注3：但$X_1 \otimes Z_2$的均值不等于各粒子测量均值的乘积！

例：用$X_1 \otimes X_2$测 $\frac{1}{2}|00\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|11\rangle$

注4：应用中，只能分别测两粒子，求结果乘积的均值；这里比较巧合，该测量也能顺便给出第2和3项的值

例子

$A = I + 0.2X_1Z_2I_{3,4,5} + 0.2X_1I_{2,3,4,5}$，（32维矩阵，5 qubit） $|b\rangle = H_1H_2H_3H_4H_5|0\rangle^{\otimes 5}$

$A^2 = 1.08I + 0.4X_1 + 0.08Z_2 + 0.4X_1Z_2$

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，$X$和$Z$测量易实现

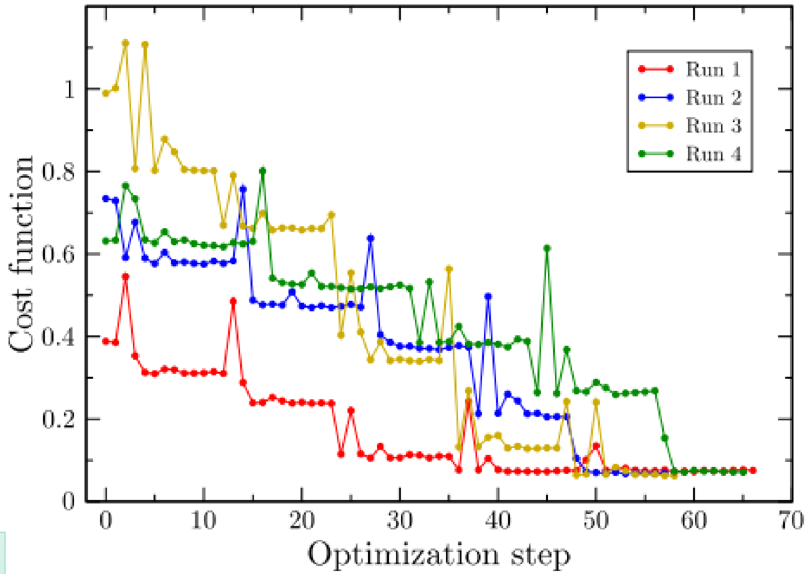
此时：$\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|A^2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle =$

$1.08\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|I|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.4\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|X_1|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.08\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|Z_2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle + 0.4\langle\varphi(\boldsymbol{\theta})|X_1Z_2|\varphi(\boldsymbol{\theta})\rangle$

不测，等于1　用X基测q1　用Z基测q2　分别用X基和Z基测q1和q2，结果乘积的均值

- **数值实验：**
  - 模拟环境：Rigetti's quantum 16Q Aspen-4 [1]
  - $U(\theta)$：选择Hardware-Efficient Ansatz

    单比特门为$R_y(\theta_i)$
  - 经典优化器：the Powell method [2]
- **文献[3-5]也做了类似的工作**

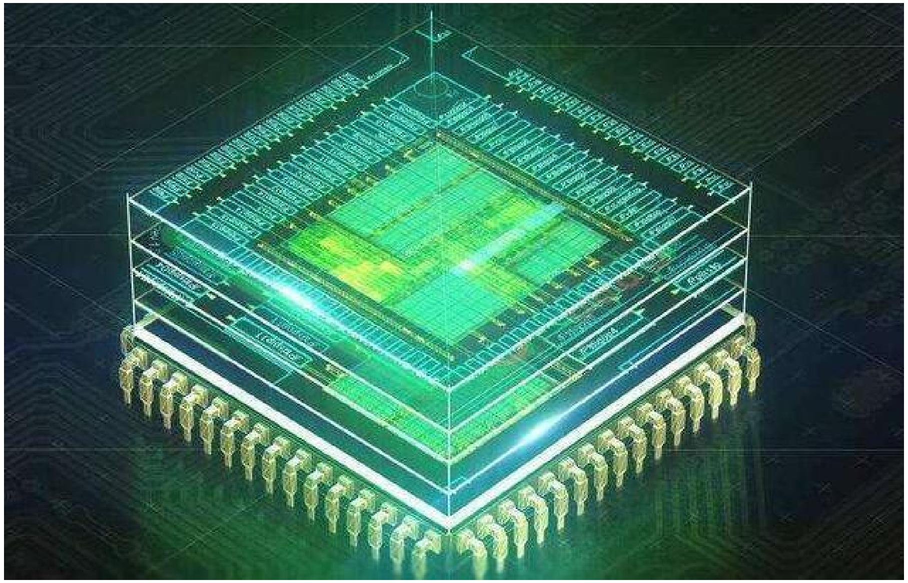


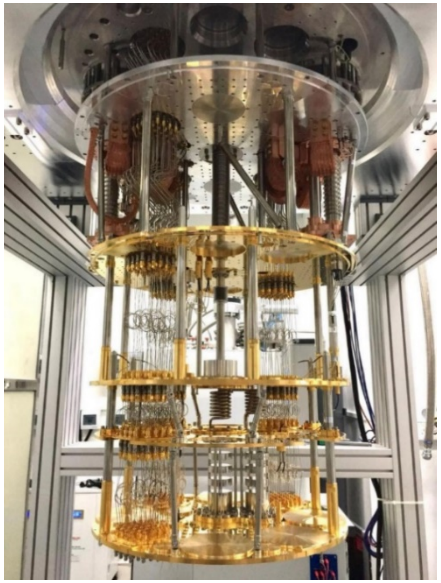
随着步数增加，$C(\boldsymbol{\theta})$趋近于0
（由于噪声不能达到0）

[1]Rigetti Computing: https://www.rigetti.com/qpu.
[2]An D, Lin L. arXiv preprint arXiv:1909.05500, (2019).
[3] An D, Lin L. arXiv preprint arXiv:1909.05500, (2019).
[4] Huang H Y, Bharti K, Rebentrost P. arXiv preprint arXiv:1909.07344,(2019)
[5]Xu X, Sun J, Endo S, et al. arXiv preprint arXiv:1909.03898,(2019).

大纲

- 变分量子算法
- 变分量子算法求解线性方程组
- 变分量子奇异值分解
- 变分量子算法的应用





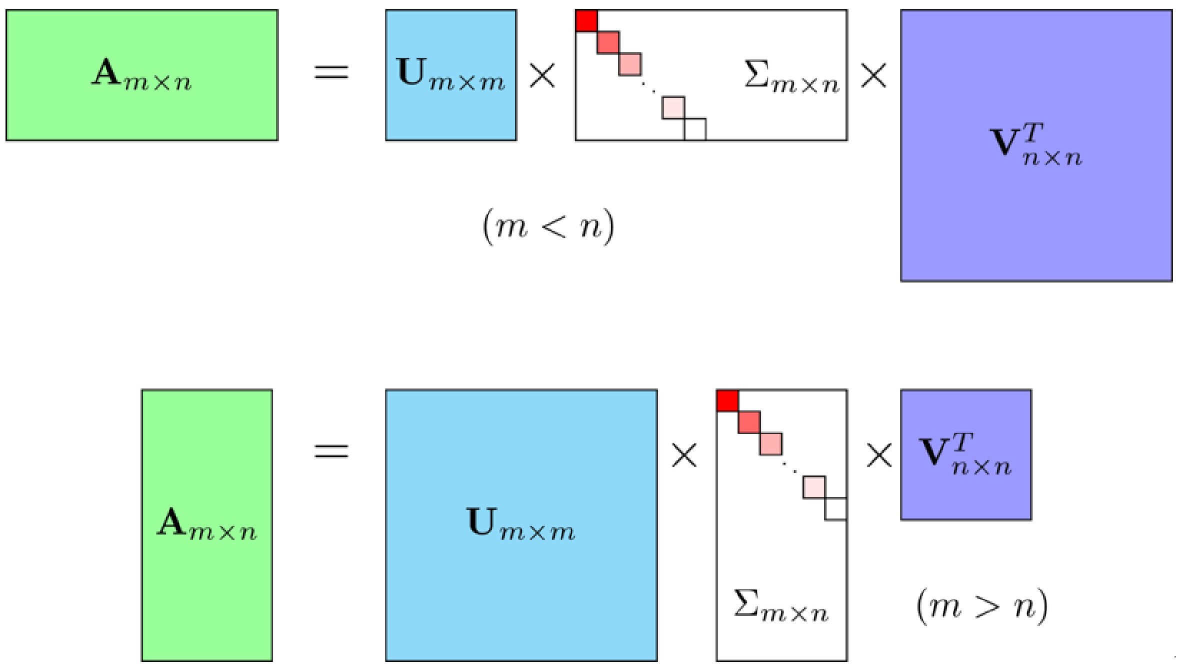
北京邮电大学 Beijing University of Posts and Telecommunications

矩阵的奇异值分解（SVD）

$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V_{n\times n}^{T}$$

U和V：方阵，酉

Σ：仅主对角线元素（A的奇异值）非0



A的奇异值= AA^T或 A^TA的特征值的算术平方根

两体量子态系数矩阵的SVD

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i=1}^{d_A}\sum_{j=1}^{d_B} c_{ij}|e_i\rangle_A|e_j\rangle_B$$

$|e_i\rangle$为计算基态

- 假设两体维度相同： $d_A = d_B$。根据施密特分解的存在性，存在酉变换

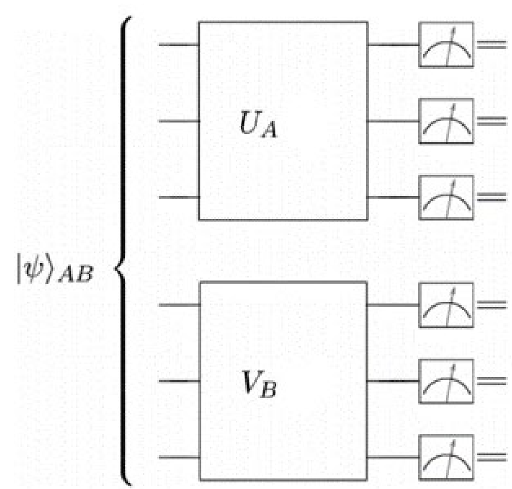
$$U_A \otimes V_B|\psi\rangle_{AB} = U_A \otimes V_B\left(\sum_{i=1}^{d_A}\sum_{j=1}^{d_B} c_{ij}|e_i\rangle_A|e_j\rangle_B\right) = \sum_{i=1}^{\chi}\lambda_i\, e^{i\alpha_i}|e_i\rangle_A|e_i\rangle_B$$

$\chi \leq \min(d_A, d_B)$：施密特秩

λ_i：施密特系数

$|e_{i(j)}\rangle$：计算基态

若能实现上述酉变换，则能得到系数矩阵$[c_{ij}]$的奇异值和左右奇异向量（对应的量子态，证明略），实现其SVD [1]



目标：二态相同

[1] Bravo-Prieto, C., D. García-Martín and J.I. Latorre, Quantum singular value decomposer. Physical review. A, 101(6):062310, 2020

北京邮电大学 Beijing University of Posts and Telecommunications

变分算法：代价函数的构造

- 目标：实现两个酉算子：
  - 前提：有多份 $|\psi\rangle_{AB}$

$$U_A \otimes V_B|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_i\, e^{i\alpha_i}|e_i\rangle_A|e_i\rangle_B$$

- 代价函数：子系统测量结果之间汉明距离的均值
  - 理由：当U_A和V_B成功实现时，在计算基下A和B的测量值一致

$$C \equiv \frac{1}{n}\sum_j d_H\left(M_j^A, M_j^B\right) = \sum_q \frac{1-\langle\sigma_z^{q,A}\sigma_z^{q,B}\rangle}{2}$$

d_H：汉明距离；q：子系统中不同qubit

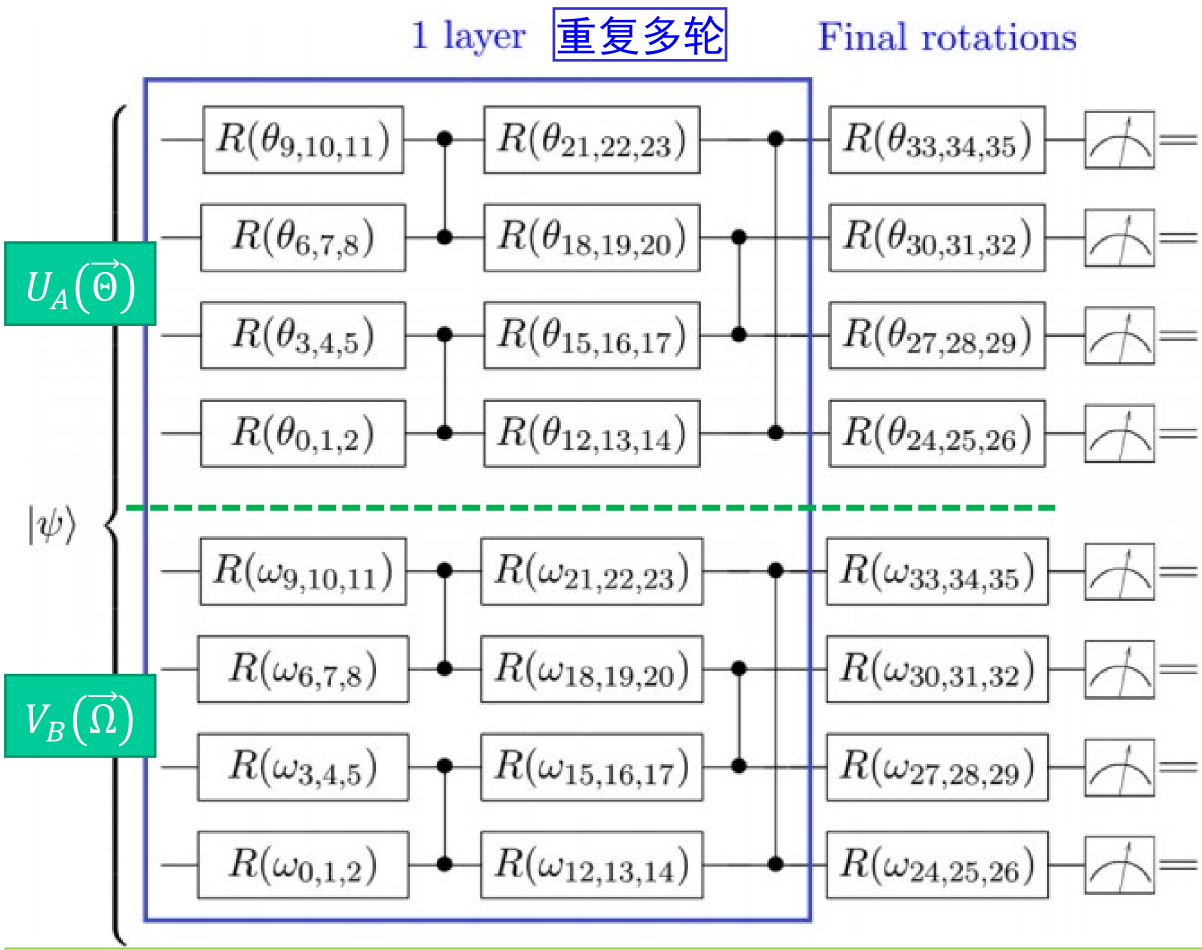
$M_j^{A(B)}$：子系统第j次测量结果(共测n次)

$$\langle\sigma_z^{q,A}\sigma_z^{q,B}\rangle = \langle\psi|_{AB} U_A^\dagger \otimes V_B^\dagger\left(\sigma_z^{q,A}\sigma_z^{q,B}\right)U_A \otimes V_B|\psi\rangle_{AB}$$

理解：将右式求均值放最前，每次测量两比特相同则整项为0，相反为1，求和是汉明距离

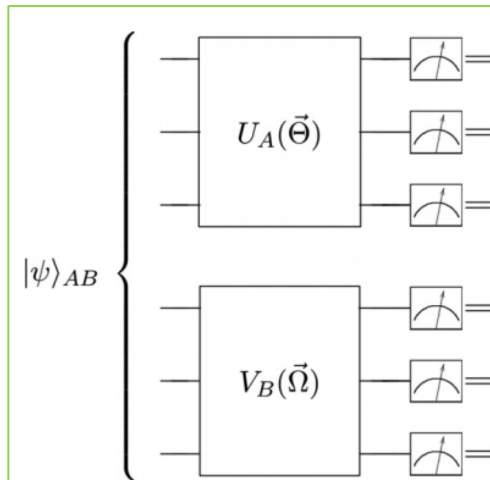
变分算法：ansatz的选择

Hardware-efficient ansatz：由CZ纠缠门、单比特旋转门构成，实现 U_A和 V_B



$$R(\theta_{\alpha,\beta,\gamma}) \equiv Rz(\theta_\alpha)Rx(\theta_\beta)Rz(\theta_\gamma)$$

使用powell方法对参数进行优化，使代价函数为0



$$|\psi\rangle_{AB}^{out} = U_A(\vec{\Theta}) \otimes V_B(\vec{\Omega})|\psi\rangle_{AB}^{in} = \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_i\, e^{i\alpha_i}|e_i\rangle_A|e_i\rangle_B$$

Powell方法：又叫共轭方向法

3.从当前点依次沿第 j 个方向在一定范围内搜索使得该方向上 f 值最小的点（可用求导或一维线搜索方法），得到步长λ_j，并移动到该点

假设允许误差$\varepsilon \geq 0$，并设参数 $k = 1$

1. 选定初始点$x^{(0)}$, n个线性无关方向 $d^{(1,1)}$, $d^{(1,2)}$,…,$d^{(1,n)}$,

2. $x^{(k,0)} = x^{(k-1)}$

3. 对于$j = 1,2,\dots,n$ 依次执行:

   (1)$\lambda_j = \underset{\lambda}{\operatorname{argmin}} f\left(x^{(k,j-1)} + \lambda d^{(k,j)}\right)$

   (2) $x^{(k,j)} = x^{(k,j-1)} + \lambda_j d^{(k,j)}$

4. $d^{(k,n+1)} = x^{(k,n)} - x^{(k,0)}$

   $\lambda_{n+1} = \underset{\lambda}{\operatorname{argmin}} f\left(x^{(k,n)} + \lambda d^{(k,n+1)}\right)$

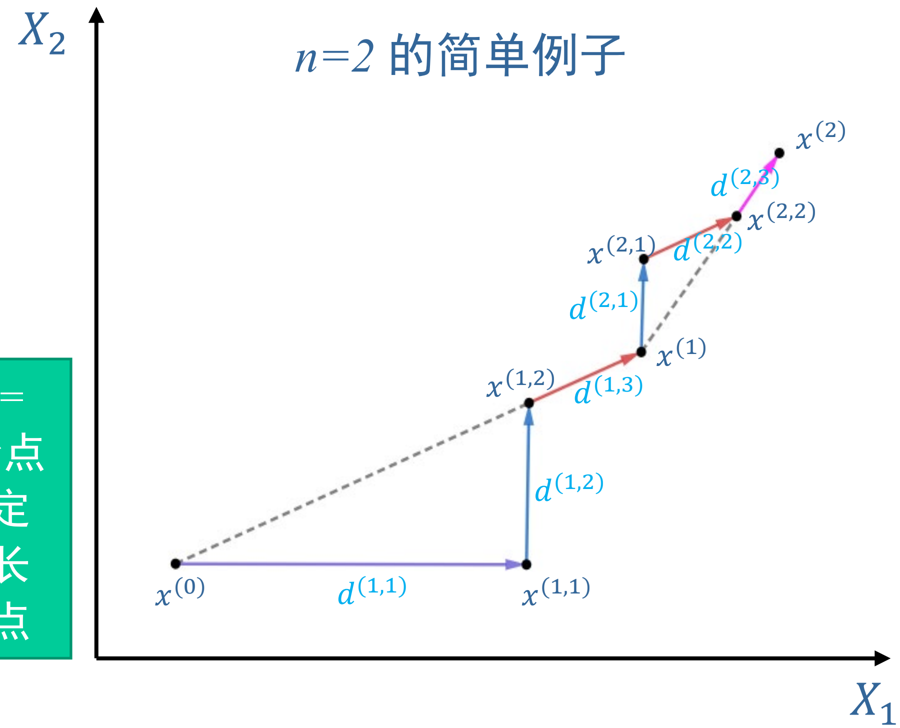
   $x^{(k)} = x^{(k,n)} + \lambda_{n+1} d^{(k,n+1)}$

4.增1新方向=当前点-初始点然后类似确定新方向的步长，并走到该点

如果$\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| < \varepsilon$，则停止，得点$x^{(k)}$；

否则，令 $k := k+1$, $d^{(k,j)} = d^{(k-1,j+1)} (j = 1,2,\dots,n)$; 转步骤2.

若达到误差范围，则停止；反之：放弃第一个方向，用后n个方向（从当前点）去重复跑第3-4步



优势：不需求导和梯度，无梯度消失问题

缺点：启发式算法，可能收敛慢、不收敛

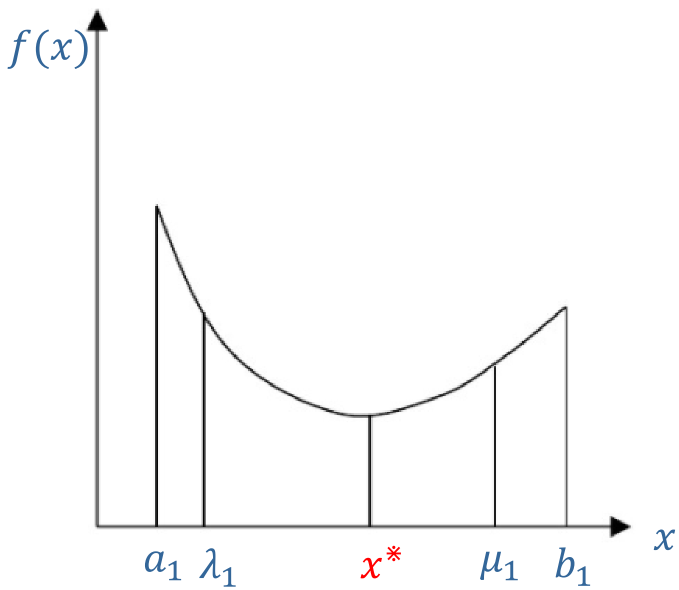
确定步长：非求导法——黄金分割法

$[a_1, b_1]$：一定范围的搜索区间

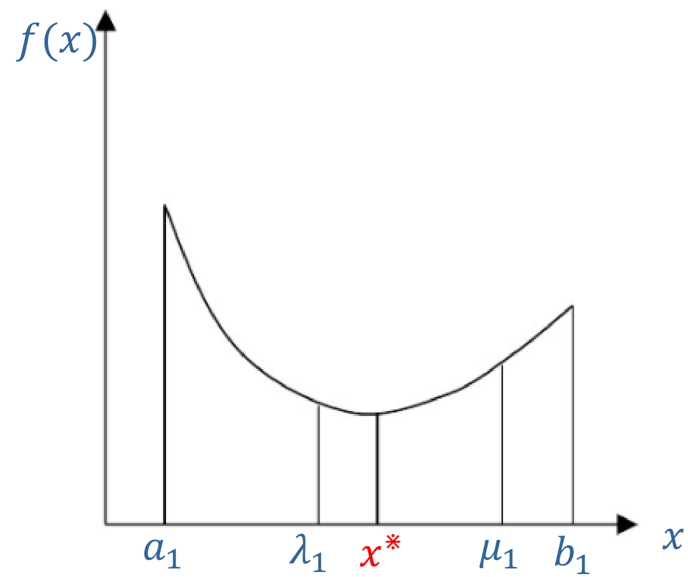
x^*：函数在该区间的极小值点

λ_1，μ_1：试探点（比例0.618）

停止条件：区间长度小于某值，此时在该区间内任取一点作为极小点的近似



若$f(\lambda_1) \geq f(\mu_1)$：认为极小值点在$[\lambda_1, b_1]$，在该区间循环



$f(\lambda_1) < f(\mu_1)$：认为极小值点在$[a_1, \mu_1]$，在该区间循环

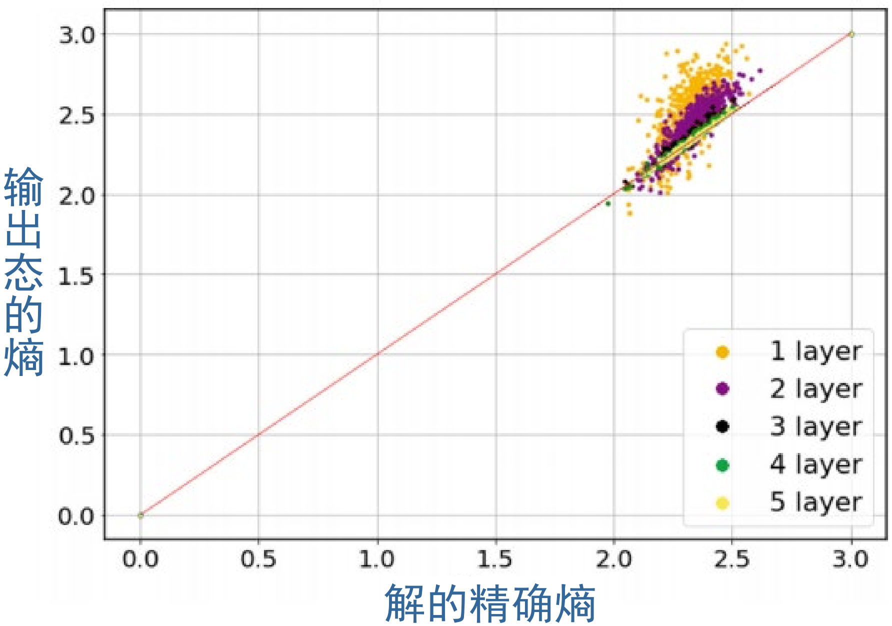
仿真结果分析

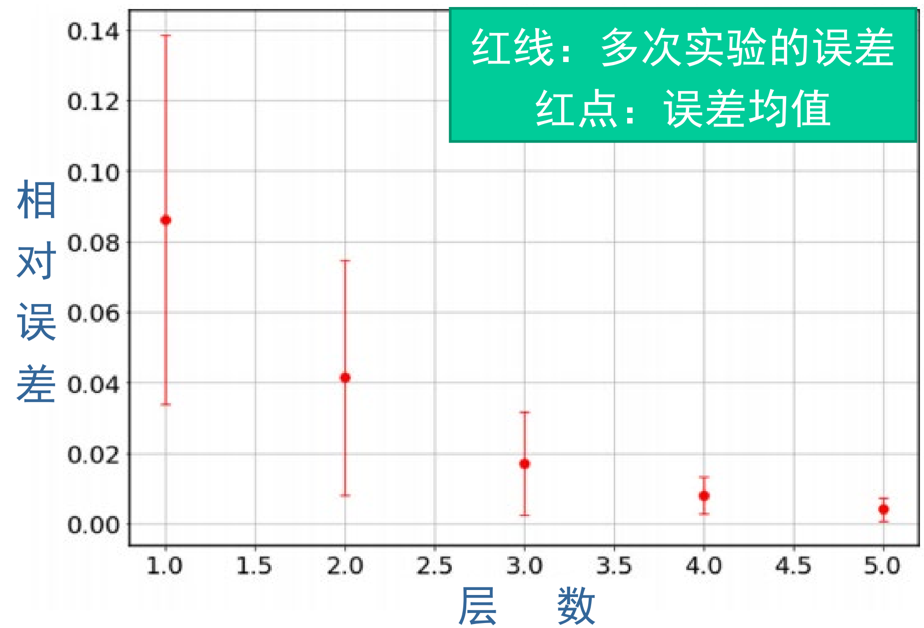
用随机态 $c_{ij}=a_{ij}+ib_{ij}$进行仿真，其中 a_{ij}和b_{ij}是 (-0.5, 0.5) 上的随机实数（满足归一化条件，两子系统各3 qubit）

以态的冯·诺依曼熵来刻画误差：

$$S=-\sum_{i=1}^{\chi}\lambda_i^2\log_2\lambda_i^2$$

输出： $\sum \lambda_i e^{i\alpha_i}|e_i\rangle_A|e_i\rangle_B$



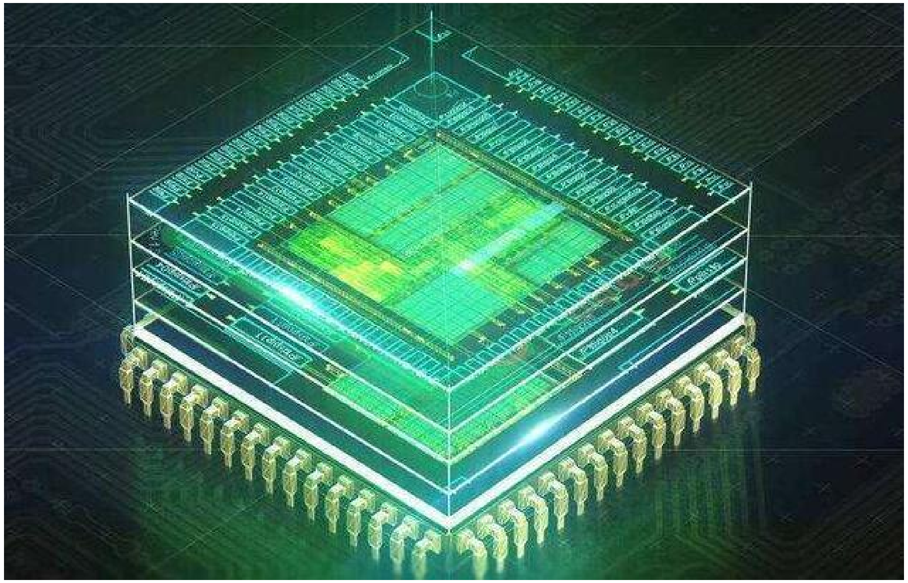


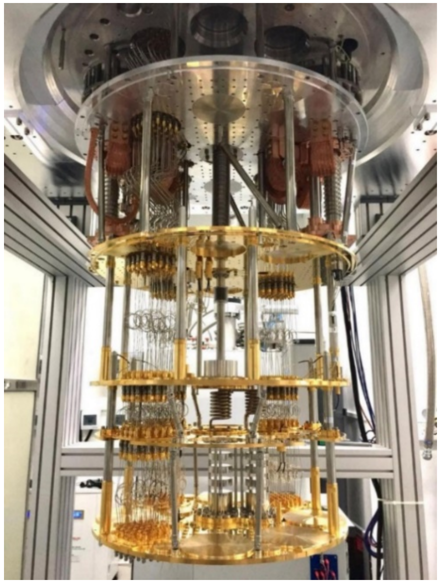
随着层数的增加，输出态的熵向精确熵收敛

随着层数的增加，输出态熵的相对误差逐渐减小

大纲

- 变分量子算法
- 变分量子算法求解线性方程组
- 变分量子奇异值分解
- 变分量子算法的应用





- 哈密顿量模拟
- 求解量子系统基态

- 机器学习/强化学习

- 最大割问题
- 顶点覆盖问题

- 整数分解
- 奇异值分解
- 方程组求解

➢ Ansatz优化1：量子结构搜索（Quantum Architecture Search, QAS）

1. Mateusz Ostaszewski1, Edward Grant, and Marcello Benedetti, Structure optimization for parameterized quantum circuits. Quantum, 2021
2. Zhimin He, Chuangtao Chen, Lvzhou, et al. Quantum Architecture Search with Meta-learning. arXiv, 2021
3. Mohammad Pirhooshyaran, Tam´as Terlaky. Quantum circuit design search. Quantum Machine Intelligence, 2021
4. Shi-Xin Zhang, Chang-Yu Hsieh, Shengyu Zhang, et al. Neural predictor based quantum architecture search. Machine Learning Science and Technology, 2021
5. Hanrui Wang, Yongshan Ding, Jiaqi Gu, et al. QuantumNAS: Noise-Adaptive Search for Robust Quantum Circuits. 2022 IEEE International Symposium on High-Performance Computer Architecture (HPCA). 2022
6. Yuxuan Du, Tao Huang, Shan You, et al. Quantum circuit architecture search for variational quantum algorithms. npj Quantum information. 2022
7. Kehuan Linghu, Yang Qian, Ruixia Wang, et al. Quantum circuit architecture search on a superconducting processor. arXiv. 2022
8. Massimiliano Incudini, Francesco Martini, and Alessandra Di Pierro. Structure Learning of Quantum Embeddings. arXiv. 2022

变分算法最新研究进展

➢ Ansatz优化2：绝热演化捷径（Shortcuts to Adiabaticity）——优化QAOA

1. Narendra N. Hegade ,Koushik Paul, Yongcheng Ding, et al. Shortcuts to Adiabaticity in Digitized Adiabatic Quantum Computing. Physical Review Applied, 2021
2. P. Chandarana , N. N. Hegade , K. Paul , F. Albarrán-Arriagada, et al. Digitized-counterdiabatic quantum approximate optimization algorithm. Physical Review Research, 2022
3. Yahui Chai , Yong-Jian Han, Yu-Chun Wu, et al. Shortcuts to the quantum approximate optimization algorithm. Physical Review A, 2022
4. Dan Sun, Pranav Chandarana, Zi-Hua Xin, et al. Optimizing Counterdiabaticity by Variational Quantum Circuits. arXiv. 2022
5. Jonathan Wurtz and Peter Love. Counterdiabaticity and the quantum approximate optimization algorithm. Quantum. 2022

➢ Ansatz优化3：其它

1. Linghua Zhu , Ho Lun Tang, George S. Barron, et al. Adaptive quantum approximate optimization algorithm for solving combinatorial problems on a quantum computer. Physical Review Research, 2022
2. Xiaoyuan Liu, Anthony Angone, et al. Layer VQE: A Variational Approach for Combinatorial Optimization on Noisy Quantum Computers. IEEE Transactions on Quantum Engineering, 2022
3. Hrushikesh Patil. Variational quantum linear solver with a dynamic ansatz. Physical Review A. 2022

➢ 数据编码——如何把经典数据编码到适合计算的量子态

1. Adrian Perez-Salinas, Alba Cervera-Lierta, Elies Gil-Fuster. Data re-uploading for a universal quantum classifier. Quantum. 2020
2. Manuela Weigold, Johanna Barzen, Frank Leymann, Marie Salm. Expanding Data Encoding Patterns For Quantum Algorithms. 2021 IEEE 18th International Conference on Software Architecture Companion (ICSA-C), 2021
3. Maria Schuld, Ryan Sweke, and Johannes Jakob Meyer. Effect of data encoding on the expressive power of variational quantum-machine-learning models. Physical Review A, 2021
4. Matthias C. Caro, Elies Gil-Fuster, Johannes Jakob Meyer, et al. Encoding-dependent generalization bounds for parametrized quantum circuits. Quantum, 2021
5. Sergio Altares-Lopez, Angela Ribeiro and Juan Jose García-Ripoll. Automatic design of quantum feature maps. Quantum Science and Technology. 2021
6. Guangxi Li, Ruilin Ye, Xuanqiang Zhao, et al. Concentration of Data Encoding in Parameterized Quantum Circuits. arXiv. 2022
7. Philip Easom-McCaldin , Ahmed Bouridane, et al. Efficient Quantum Image Classification Using Single Qubit Encoding. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2022
8. Liangliang Fan, Haozhen Situ. Compact data encoding for data re-uploading quantum classifier. Quantum Information Processing, 2022

谢 谢