

代码功能

基于昇思 MindQuantum，利用 VQA 求解一维薛定谔方程

方案描述

VQA(Variational quantum algorithm)是一种可在近期含噪量子设备上实现的量子、经典混合算法,在量子计算机上我们需要搭建一个浅层的含参酉电路 $U(\lambda)$ 实现相关量子态的制备,而经典计算机主要是利用量子计算机传递的关于 $C(\lambda)$ 的信息调整门序列参数 λ ,使 $C(\lambda)$ 最小化。详细过程描述如下:

(1) 搭建浅层、含参酉门序列 $U(\lambda)$, 输入初态 $|\psi_0\rangle$, 经过含参酉电路后量子态为 $|\psi(\lambda)\rangle = U(\lambda)|\psi_0\rangle$;

(2)计算代价函数 $C(\lambda)$;

(3)若 $C(\lambda)$ 或迭代次数满足停止条件, 输出 λ_{opt} , 得到 $C(\lambda_{opt})$, 对应量子态为 $|\psi(\lambda_{opt})\rangle = U(\lambda_{opt})|\psi_0\rangle$, 否则, 采用经典优化器(比如梯度下降)来优化更新参数 λ , 以最小化 $C(\lambda)$;

(4)重复(2-3)过程, 直到 $C(\lambda)$ 或迭代次数满足停止条件;

在本项目中我们基于文献[1], 利用变分量子算法求解一维薛定谔方程, 基本方案描述如下:

$$\left[\frac{-1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + g|f(x)|^2 \right] f(x) = Ef(x) \quad (1)$$

其中 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上是一个单一的实值函数, 满足归一化条件 $\int_a^b |f(x)|^2 dx = 1$ 以及周期边界条件: $f_0 = f_N$ 。其中 g 代表非线性强度, $V(x)$ 是基本函数, 代码实现中假设 $V(x) = s_1 \sin(k_1 x) + s_2 \sin(k_2 x)$ 并且 $k_2 = \frac{2k_1}{1+\sqrt{5}}$ 。

现对(1)式左侧进行积分得到(2):

$$\int_a^b f^*(x) \left[\frac{-1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) + g|f(x)|^2 \right] f(x) dx = K + P + I \quad (2)$$

对(1)式右侧积分得到：

$$\int_a^b f^*(x) E f(x) dx = E * \int_a^b |f(x)|^2 dx = E \quad (3)$$

根据 (1) 式可知： $E = K + P + I$ ，其中： $K = \frac{-1}{2} \int_a^b f^*(x) \frac{d^2 f}{dx^2} dx$ ， $P = \int_a^b f^*(x) V(x) f(x) dx$ ， $I = g \int_a^b f^*(x) |f(x)|^2 f(x) dx$ 。

现将区间 $[a, b]$ 离散化，划分为 $N = 2^n$ 个等间距的网格点，间距 $h_N = \frac{b-a}{N}$ ， $x_k = a + k * \frac{b-a}{N}$ ，其中 $k = 0, 1 \dots N-1$ ，通过推导可知：

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx = h_N * \sum_{k=0}^{N-1} |f_k|^2 = 1 \quad (4)$$

令 $\psi_k = \sqrt{h_N} f_k$ ，则有： $\sum_{k=0}^{N-1} |\psi_k|^2 = 1$ ，且根据 K 、 P 、 I 的表达式推导得到：

$$\llbracket K \rrbracket = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_N^2} \sum_{k=0}^{N-1} \psi_k^* (\psi_{k+1} - 2\psi_k + \psi_{k-1}), \quad (5.1)$$

$$\llbracket P \rrbracket = \sum_{k=0}^{N-1} [\psi_k^* V(x_k) \psi_k], \quad (5.2)$$

$$\llbracket I \rrbracket = \frac{1}{2} \frac{g}{h_N} \sum_{k=0}^{N-1} |\psi_k|^4, \quad (5.3)$$

上述三者分别代表了动能、势能、相互作用能，三者之和等于 E 。现定义代价函数如下，通过最小化代价函数 C 可以找到(1)的基态，即找到使得 C 最小的 $f(x)$ 。

$$C = \llbracket K \rrbracket_c + \llbracket P \rrbracket_c + \llbracket I \rrbracket_c \quad (6)$$

其中 $\llbracket K \rrbracket_c$ ， $\llbracket P \rrbracket_c$ ， $\llbracket I \rrbracket_c$ 代表平均值。

现在问题的关键在于如何获取 ψ_k 的信息，通过前文内容可知 $\sum_{k=0}^{N-1} |\psi_k|^2 = 1$ ，且下标 k 是独一无二的，现将十进制下标 k 转化为二进制比特串 $binary(k)$ ，可得到 $|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \psi_k |binary(k)\rangle$ ，从而将 ψ_k 编码到量子态中。我们要利用 VQA 求解(1)，问题关键是通过含参酉序列 $U(\lambda)$ 实现量子态 $|\psi(\lambda)\rangle$ 的制备，并且通过参数优化使得代价函数 $C(\lambda)$ 最小化，从而找到使得 C 最小的 $|\psi(\lambda)\rangle$ ，根据 $\psi_k = \sqrt{h_N} f_k$ 即可推出 $f(x_k)$ 和 x_k 的对应关系，实现(1)的求解。

代码内相关函数说明

1. `create_ansatz_circuit(n, layer)`

参数：量子比特数 n , $ansatz$ 层数 $layer$;

功能：搭建含参酉电路 $U(\lambda)$, 实现量子态的制备 $\psi(\lambda) = U(\lambda)|0\rangle$;

返回：含参酉电路 $ansatz_p$;

2. $get_info_state(n, layer, ansatz_data)$

参数：一维数组 $ansatz_data$, 为含参酉电路赋值, $layer$: $ansatz$ 层数

功能：获取 $\psi(\lambda)$ 中的系数 ψ_k

返回：字典 $info$, 存储十进制 k 和系数 ψ_k 之间的对应关系;

3. $calculate_I(n, layer, ansatz_data, info)$

参数：字典 $info$, 存储十进制 k 和系数 ψ_k 之间的对应关系

功能：计算 $Interaction\ energies$

返回：能量值 $result_I$, $float$ 类型

4. $calculate_K(n, layer, ansatz_data, info)$

参数：意义同上, 略

功能：计算 $Kinetic\ energies$

返回：能量值 $result_K$, $float$ 类型

5. $calculate_P(n, layer, ansatz_data, info)$

参数：意义同上, 略

功能：计算 $Potential\ energies$

返回：能量值 $result_P$, $float$ 类型

6. $cost_function(n, layer, ansatz_data)$

参数：意义同上, 略

功能：计算代价函数值, 上述三个能量值之和

返回：代价函数值 $function_value$, $float$ 类型

7. $global\ training(n, p)$

参数：量子比特数 n 以及 $ansatz$ 总层数 p

功能：一次性搭建 p 层 $ansatz$ 电路，并且实现参数随机初始化、调用 $scipy$ 内的 $minimize$ 函数进行参数优化，

返回：迭代停止时的参数 $ansatz_data$ 以及 $function_value$

8. $layerwise\ training(n, p)$

参数：意义同上，略

功能：逐层搭建 $ansatz$ 电路，直至电路层数为 p ，同时实现参数优化

返回：电路为 p 层时，代价函数收敛时对应的参数 $ansatz_data$ 以及 $function_value$

9. $train_parameters(layer, counts, ansatz_data)$

参数： $ansatz_data$ 为电路层数为 $layer - 1$ 层时，代价函数收敛时对应的参数，其中 $1 \leq layer \leq p$;

功能：实现前 $layer - 1$ 层参数的赋值以及第 $layer$ 层参数的随机初始化，利用 $scipy$ 内 $minimize$ 函数实现全体参数的优化

返回：电路为 $layer$ 层，代价函数收敛时对应的参数 $ansatz_data$ 以及 $function_value$

Fixing strategy思想介绍

$Fixing\ strategy$ 策略编码在 $train_parameters(layer, counts, ansatz_data)$ 以及 $layerwise_training(n, p)$ 中，下面为 $Fixing\ strategy$ 的基本思想：

假设搭建 p 层 $ansatz$ 电路， $layer$ 代表当前 $ansatz$ 层数，每层 $ansatz$ 电路有 m 个参数

(1) $layer = 1$, $\vec{\lambda} = (\vec{\lambda}_1) = (\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_m)$, 随机初始化 $\vec{\lambda}$, $\lambda_{1 \dots m} \in [0, 2\pi]$, 优化 $\vec{\lambda}$, 得到优化结果 $loss$;

(2) 重复(1) $counts$ 次, 得到 $counts$ 个 $loss$, 将 $\min(loss)$ 对应的优化之后的参数记为 $\vec{\lambda}_1^*$;

(3) $layer = 2$, $\vec{\lambda} = (\vec{\lambda}_1^*, \vec{\lambda}_2)$, 其中 $\vec{\lambda}_2$ 随机初始化, 优化 $\vec{\lambda}$, 得到优化结果 $loss$;

(4)重复(3) $counts$ 次, 得到 $counts$ 个 $loss$, 将 $\min(loss)$ 对应的优化之后的参数记为 $(\vec{\lambda}_1^{**}, \vec{\lambda}_2^*)$;

(5) $layer = 3$, $(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) = (\vec{\lambda}_1^{**}, \vec{\lambda}_2^*, \vec{\lambda}_3)$, 其中 $\vec{\lambda}_3$ 随机初始化, 优化 $\vec{\lambda}$, 得到优化结果 $loss$;

(6)重复(5) $counts$ 次, 得到 $counts$ 个 $loss$, 将 $\min(loss)$ 对应的优化之后的参数记为 $(\vec{\lambda}_1^{***}, \vec{\lambda}_2^{**}, \vec{\lambda}_3^*)$;

(7)重复上述过程, 直到 $layer = p \dots \dots$

参考文献

- [1] Lubasch, M., Joo, J., Moinier, P., Kiffner, M., & Jaksch, D. (2020). Variational quantum algorithms for nonlinear problems. Physical Review A, 101(1).
- [2] Lee, X, et al. "Parameters Fixing Strategy for Quantum Approximate Optimization Algorithm." IEEE International Conference on QCE(2021).