

量子计算与量子模拟*

范桁^{1)2)†}

1) (中国科学院物理研究所, 固态量子信息与计算实验室, 北京 100190)

2) (中国科学院大学, 拓扑量子计算卓越创新中心, 北京 100190)

(2018年4月17日收到; 2018年4月30日收到修改稿)

量子计算和量子模拟在过去的几年里发展迅速, 今后涉及多量子比特的量子计算和量子模拟将是一个发展的重点. 本文回顾了该领域的主要进展, 包括量子多体模拟、量子计算、量子计算模拟器、量子计算云平台、量子软件等内容, 其中量子多体模拟又涵盖量子多体动力学、时间晶体及多体局域化、量子统计和量子化学等的模拟. 这些研究方向的回顾是基于对现阶段量子计算和量子模拟研究特点的考虑, 即量子比特数处于中等规模而量子操控精度还不具有大规模逻辑门实现的能力, 研究处于基础科研和实用化的过渡阶段, 因此综述的内容主要还是希望管窥今后的发展.

关键词: 量子计算, 量子模拟, 量子多体, 量子动力学**PACS:** 03.67.-a, 03.65.Ta, 03.67.Mn, 75.10.Pq**DOI:** 10.7498/aps.67.20180710

1 引言

过去的20多年, 量子信息、量子计算与量子模拟获得了长足的发展, 而在最近几年, 整个领域的发展又呈现出不同的特色, 人们更加关注含有多量子比特数的量子计算和量子模拟, 即在保证量子操作保真度的前提下, 力图提高量子比特的数目, 最近的一些实验所涉及的量子比特数目达到数十个, 已经接近经典计算机所能模拟的最多量子比特数, 进而有可能实现所谓的量子优势或者量子霸权. 但是另一方面, 各个实验平台距离实用化量子计算所需要的成千上万的量子比特数又有相当的距离, 量子逻辑门保真度距离容错性量子计算的阈值还有大幅提升的空间. 所以最近几年量子计算与量子模拟有其独有的特色, 即量子比特数目处于中等规模, 从十多个到数百个, 保真度较高, 比如对应错误率在0.1%—1%左右, 但是并没有达到大规模容错性量子计算的阈值, 暂时不能实现含有很多逻辑门

的量子计算任务. 本文回顾了最近多量子比特量子计算和量子模拟的发展, 同时对近期的研究课题做了展望, 希望能对现阶段量子计算和量子模拟的研究有所启示.

2 多体量子模拟

2.1 量子动力学模拟

利用人工可控量子系统来比对模拟宇宙与自然界中各种不同量子及经典现象, 并为此构建通用量子模拟器是Feynman^[1]提出的概念. 特别对于量子系统, 经典计算机由于规模和速度等限制常常并不能有效地模拟其性质, 而通用型量子模拟器则具有先天的优势; 另一方面通用型量子模拟器可以实现任意的量子态演化, 则和通用型量子计算机具有完全同样的功能. 从这一点而言, 量子计算机和量子模拟器实际是一个概念, 而强调了不同的使用侧重点, 量子计算机侧重其计算功能, 量子模拟器则侧重比对模拟. 但是, 现有的量子计算系统由于

* 国家重点研发计划 (批准号: 2016YFA0302104, 2016YFA0300600)、国家自然科学基金 (批准号: 91536108, 11774406) 和中国科学院先导培育项目 (批准号: XDPB08-3) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hf@iphy.ac.cn

退相干影响及操控精度等问题, 保真度并不理想, 量子计算实现侧重于几个量子比特的小规模比特数和原理演示, 距离实用化需求还有较大的距离. 但是相对而言, 量子模拟由于主要研究量子性质, 对操控和测量精度等要求不高, 所以已经接近较大规模的量子比特数. 最近, 哈佛大学^[2]和马里兰大学^[3]的课题组分别实现了多达50多个量子比特数的量子多体模拟. 哈佛大学Lukin课题组^[2]利用了中性铷 $87(^{87}\text{Rb})$ 冷原子系统, 系统哈密顿量写为

$$H = \sum_i \frac{\Omega_i}{2} \sigma_x^i - \sum_i \Delta_i n_i + \sum_{i<j} V_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

其中, 算子坐标定义在原子能级上, 而参数可实验调控. 它们实验研究了此系统的量子动力学性质, 这是一种典型的量子模拟方法, 即量子系统初态可以实验制备, 较为常见的方法是全部的量子比特都被制备为零态 $|0 \cdots 0\rangle$, 然后根据所研究的问题使得此初态按照特定的哈密顿量进行演化, 其中哈密顿量可以是固定的, 也可以对某些参数进行实验调控, 在特定的时间量子态会演化为具有一定性质的量子态, 通过对量子态的读出和分析从而实现一定量子过程的模拟. Lukin课题组利用里德伯型原子实现了哈密顿量(1)式中参数的程序化调控, 系统具有随距离6次方衰减的相互作用 V_{ij} , 相干操控的原子数达到51个. 实验中当原子数目为7时, 系统可以从初态演化到反铁磁态, 其占比为68%, 考虑到探测效率, 修正后的概率可以达到77%左右, 当系统扩大至51个原子时, 反铁磁态概率达到0.11%, 考虑到系统保真度随原子数目是指数衰减的, 此反铁磁态的实现结果已相当好.

量子模拟是研究量子动力学行为的理想方法, 自然界中量子系统的演化很难控制和改变, 所以不同参数下的量子动力学性质不能被系统地探知. 但是量子模拟利用人工可控量子系统, 不同的量子动力学可以通过调节参数实现并多次重复, 从而使得其性质可以从多个角度来探索, 比如对参数进行大范围扫描. Lukin课题组也实验展示了系统跨越量子相变点的量子淬火动力学行为, 演示了畴壁(domain-wall)密度的振荡行为, 和数值计算的结果完全符合.

马里兰大学Monroe课题组^[3]利用囚禁离子平台同样模拟了多体量子动力学. 此实验展示了具有53个量子比特的量子模拟器, 其系统哈密顿量

是横场伊辛模型, 可以写为

$$H = \sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x + B_z \sum_i \sigma_i^z, \quad (2)$$

其中, 算子定义在量子比特空间, 参数分别为相互作用和局域磁场. 相互作用随距离按照0.8—1左右的指数衰减; 局域磁场 B_z 对所有量子比特相同但可调, 当 B_z 取不同的数值时, 可以使得系统处于不同的量子相. 实验中初态为 $|0 \cdots 0\rangle$, 并进行通过相变点和不通过相变点的两种量子淬火形式, 随时间变化量子态完美的演示了量子动力学性质, 特别是当通过相变点时会具有动力学相变行为^[4], 实验通过测量平均自旋磁化率给出了量化结果.

2.2 时间晶体量子模拟

晶体结构一般是指空间特定方向晶格具有周期性性质, 时间晶体的概念首先由诺贝尔奖获得者Wilczek^[5]提出, 指在时间域可被探测的周期性行为, 但时间是连续的, 所以时间晶体伴随有时间域的对称破缺. 相关理论研究也将原有的概念进行了进一步的推广和修改^[6]. 时间晶体的实现最近有两个实验引起大家的关注, 分别由Monroe课题组^[7]和Lukin课题组^[8]完成. 下面对这些结果进行简单的回顾.

时间晶体可以在量子多体系统通过周期驱动来实现, Monroe课题组的周期驱动过程由下面几个哈密顿量分别进行描述^[7]:

$$H_1 = g(1 - \varepsilon) \sum_i \sigma_i^y \quad \text{time } t_1, \quad (3a)$$

$$H_2 = \sum_i J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x \quad \text{time } t_2, \quad (3b)$$

$$H_3 = \sum_i D_i \sigma_i^x \quad \text{time } t_3. \quad (3c)$$

在一个周期 $T = t_1 + t_2 + t_3$ 内, 系统按照时间顺序分别根据各自的哈密顿量进行演化, 系统初态仍然是直积态 $|0 \cdots 0\rangle$. 第一个哈密顿量将使得系统自旋发生反转, 对应于量子比特的比特反转操作; 第二个哈密顿量描述系统中各个自旋间具有相互作用; 第三个哈密顿量代表有局域无序的磁场. 系统按照上述三个过程重复周期演化. 系统本身是周期驱动的, 其哈密顿量周期为 T , 而量子态经过两个周期变为原来的态, 从而实现时间域的周期变化即时间晶体. Monroe课题组利用了10个铯离子所构

成的一维自旋链实验模拟了时间晶体, 其中单点磁化率被用来表征量子态的演化过程.

Lukin 课题组^[8]利用金刚石氮空位中心系统来实现多量子比特, 金刚石氮空位中心指金刚石中会有氮原子取代碳, 并和紧邻格点的空穴形成一个具有量子特性的电子态, 由于金刚石相对纯净的环境, 此量子态所实现的量子比特在室温就具有超长的相干时间, 可以作为量子比特的理想载体. 但是这种氮空位中心是随机产生的, 一般相互间距离较远且没有相互作用, 时间晶体的实现需要大量有相互作用的氮空位中心, 所以实验利用了氮空位中心浓度非常高的系综. 另外实验施加了非常强的特定方向的微波场, 使得系综中几乎各向同性的自旋海森伯相互作用变为一个方向的相互作用占主导地位, 这样多量子比特系统有效哈密顿量可以写为

$$H_{\text{eff}} = \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x + \sum_i \Omega_x \sigma_i^x, \quad (4)$$

其中, 自旋间相互作用 J_{ij} 随距离衰减, 另外系综中氮空位中心在空间是无序排列的, 自然地实现了相互作用无序. 实验中量子比特被初始化后全部旋转至 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的叠加态 $|+\cdots+\rangle$, 随后系统按照有效哈密顿量 (4) 式进行演化并随后进行相位反转操作, 这个操作是周期重复的, 以此实现周期驱动, 通过将自旋极化率数据进行傅里叶变换得到系统在周期驱动下的振荡频率, 从而确认时间晶体的实现.

时间晶体的实现有两个关键要求需要满足: 第一, 初态是直积态, 同时是相互作用哈密顿量的本征态, 实际也分别是比特反转操作或者相位反转操作以及局域场的本征态; 第二, 周期驱动过程中需要有强无序. 时间晶体的实现机制为系统尽可能地保证处于初态及其对应的比特反转或者相位反转态上, 但是同时必须有量子比特间相互作用, 初态是此相互作用哈密顿量的本征态, 这样可使得多量子比特能尽可能地保持同步演化, 防止少数量子比特的误差有积累效应. 系统无序局域场或无序相互作用有两个目的, 保证系统处于多体局域化量子相, 防止系统过快热化变为不具有任何对称破缺的热态, 同时避免少数量子比特的误差快速扩展至整个系统, 保证时间晶体的质量.

2.3 量子多体局域化模拟

局域化分为安德森局域化和多体局域化, 其中安德森局域化为大家所熟知, 而多体局域化在过去的十余年也受到了普遍的关注. 两种局域化的区别在于系统是否存在相互作用. 和局域化对应的现象为热化. 安德森局域化存在于无相互作用的多体系统, 称为局域态, 与之对应的为扩展态. 以固体系统为例, 局域态和扩展态在有限温度时都表现为金属特性, 但是在接近绝对零度时, 扩展态系统表现为金属特性, 而局域态系统表现为绝缘体特性. 多体局域态存在于有相互作用系统, 和安德森局域化不同的是由于相互作用的影响, 系统温度低于非零的临界温度时, 多体局域态系统就从金属转化为绝缘体. 这种现象对安德森局域只能在绝对零度发生. 从系统模型方面而言, 多体局域化系统的哈密顿量非可积, 保证系统并不对应于自由费米子模型或者具有无穷多守恒量, 而可积系统的局域化则对应于安德森局域. 多体局域态存在于有限温度, 所以一般要求系统处于高激发态, 而安德森局域则要求系统处于基态.

除了诸多的不同, 安德森局域和多体局域相对于热化又有很多的共同点. 经典系统的热化需要环境传递热量, 但是在孤立量子系统, 热化指系统从初态演化到具有特定性质的平衡态, 其特征表现为任意的子系统处于热态, 即其密度矩阵可以写为 $e^{-\beta H}$ 的热态形式, 其中 β 对应温度的倒数, 与之对应, 局域化则最大限度地保持初态的形式, 其波函数演化缓慢或者几乎不变, 系统表现为没有能量传递或者粒子输运. 在一般情况下, 系统将倾向于热化, 而要实现多体局域化则需要有强的无序局域场存在, 从而防止或者延缓热化的发生. 同时有理论指出, 孤立系统的热化对应于本征值热化假定, 即考察系统哈密顿量的任意一个非特殊本征态, 得到的子系统约化密度矩阵都是热态的形式, 那么孤立系统从一般的初态进行演化, 一定会达到热化. 热态的一个性质是其密度矩阵的冯·诺依曼熵满足体积率, 即其大小和量子比特数成正比. 简要总结, 热化满足本征值热化假定, 长时间演化所达到的定态是热态, 其冯·诺依曼熵满足体积率, 而局域态违反本征值热化假定, 系统保持初态的形式, 其冯·诺依曼熵不满足体积率. 由于我们考察的是孤立量子系统, 系统始终处于纯态形式, 子系统约化密度矩

阵的冯·诺依曼熵就是纠缠熵。

孤立量子系统的热化对理解统计力学的一些基本假定有帮助, 和经典系统的混沌存在深入的联系, 同时局域化则是热化的反面, 可反映在系统哈密顿量本身的特性方面. 系统热化的发生需要哈密顿量能谱分布较为均匀, 性质上表现为能级间距的分布满足魏格纳分布, 而局域化的发生需要能级间距满足泊松分布。

多体局域化、安德森局域化和热化这三种不同的物态可以由一个指标区分出来, 这个指标就是系统纠缠熵随时间的变化行为. 对热化现象, 纠缠熵快速增长至最大值并保持不变; 对安德森局域, 纠缠熵增长至一个较低的数值并长时间保持不变; 而对多体局域化, 纠缠熵保持长时间缓慢增长的特性, 具体表现为随时间呈对数增长. 这些性质反映了系统演化的特性, 多体局域化是系统局域无序场和粒子间相互作用竞争的结果, 所以纠缠熵随时间表现出由相互作用导致的生长现象和由局域无序场所导致的压制热化而纠缠熵增长速度非常缓慢这一结果。

量子模拟多体局域化在多个实验系统已经实现, 德国马普所 Bloch 课题组^[9]实验实现了一维费米子准无序光晶格的多体局域化, 其局域化强度用引入的非平衡度函数来量化, 即热化时粒子将处于平衡位置, 则非平衡度为零, 而粒子保持在非平衡的初态时, 其非平衡度较大. 实验发现随着无序强度增大, 非平衡度也随之增大, 验证了多体局域的实现. 同时, 欧洲另一课题组利用核磁共振系统的偶极关联核自旋观察到局域化与非局域化的转变^[10]. Bloch 课题组^[11]同时也在二维玻色子无序光晶格中展示了多体局域化的实现, 在这个实验中非平衡度和背离均方根两种度量被用来量化局域化程度, 初态被制备到高度非平衡态, 通过调节局域无序场强度来控制多体局域化和热化的产生. 马里兰大学 Monroe 课题组^[12]利用镱的离子阱系统采用程序化的随机无序局域场实现了多体局域化, 局域化程度用单粒子的磁化强度来量化, 其初态制备在高能量的反铁磁态 $|0101\dots\rangle$. 已知纠缠熵的时间演化可以很好地标定多体局域化, 但是约化密度矩阵的读取需要量子态层析 (state tomography) 法, 对实验测量技术和精度的要求非常高, 测量需要具有类似单光子分辨这样的技术, 前面回顾的这几个实验都没能确认这一证据。

最近, 浙江大学、中国科学院物理研究所及中国科学技术大学的相关课题组^[13]利用 10 量子比特的超导量子器件, 也成功地模拟了量子多体局域化. 由于超导器件本身的特殊设计, 使得量子比特间具有长程相互作用, 其哈密顿量不可积, 具备了实现多体局域化的条件; 每个量子比特的局域磁场可以程序化施加, 从而产生强度可调的无序局域场; 实验系统相干性足以保证实验的高精度完成, 采用量子态层析法得到了随时间演化的约化密度矩阵. 实验数据显示在强无序局域场下, 纠缠熵随时间呈对数增长, 即纠缠熵按照时间对数函数线性增长。

同样是利用超导量子比特, 谷歌的 Martinis 实验组^[14]利用成一维排列的 9 量子比特样品, 通过调节每个量子比特的失谐来实现局域无序场, 实验测量了系统的能谱, 从而发现得到的能级分布满足多体局域化所要求的泊松分布形式, 证明多体局域化得到实现。

2.4 热力学、统计力学、拓扑、场论等量子模拟

量子多体问题的研究中经常会涉及热力学、统计力学等的概念和方法, 特别是当涉及量子少体和多体系统、量子孤立系统的热力学演化、非平衡态物理等研究时, 由于量子系统良好的操控和相干特性、低噪音及可控噪音设计、精确的量子态读出都能使得我们可以高精度地检验热力学、统计力学及与量子科学结合方面的基本公式和原理. 我们前面回顾的局域化所对应的热化就是关于量子孤立系统的演化问题。

最近, 非平衡统计中的加津斯基 (Jarzynski) 等式在离子阱系统就可被实验验证^[15], 精确模拟噪音可以研究马尔可夫和非马尔可夫过程的互相转化, 实验在光子系统中实现^[16], 热力学中的可逆及不可逆过程在超导量子比特系统被实验演示^[17]。

同时也可以考虑对应模拟的形式, 将一些非物理可观测量对应为可物理探测量来研究, 比如统计物理中的李-杨零点分布于复平面而不可观测, 经过对应则可以在实验中实现并观测到^[18]。

量子多体系统会表现出拓扑特性, 量子模拟可以用来模拟拓扑物态, 也可以用来演示分数统计等特性, 比如任意子的编织性质被分别在光量子系统^[19]和超导量子比特系统模拟^[20]。

量子场论常应用于高能粒子物理, 量子计算机也可用来模拟量子场论. 最近利用离子阱系统, 奥地利 Blatt 课题组^[21]利用几个量子比特模拟了格点规范理论中真空量子涨落, 通过研究量子纠缠演化来模拟粒子反粒子的产生.

2.5 量子化学模拟

量子化学的基组计算方法将多原子分子的波函数表示为单原子的多轨道, 基组中的轨道数量正比于分子中的原子数目. 在利用量子比特系统来模拟波函数时, 可以简单地利用一个量子比特的 $|1\rangle$ 态和 $|0\rangle$ 态表示一个轨道的填充和非填充, 同时需要注意这个量子比特是一种费米子表示, 也可考虑在研究某些具体问题只局限于某些确定基组或者子空间, 从而减少对量子比特数的需求. 在模拟中, 可以利用量子相位估计法得到分子哈密顿量的能谱, 随着量子比特数的增加, 比如几百个量子比特, 能谱的精确性可以达到或者超越现有计算技术, 其中水分子的量子模拟被作为例子进行了系统的研究^[22], 并考虑利用光量子系统来模拟水分子最小基组的情况^[23].

考虑到量子计算机的知识并不为量子化学领域所熟知, 谷歌 Babbush 等课题组^[24]也提供了一种直接将量子化学基组计算方法和费米体系计算转化为量子计算机基本逻辑门操作的软件, 以期方便各领域的研究人员使用.

量子模拟在过去几年的进展非常之多, 这里只是回顾了部分内容, 前期发展也有相关综述可以参考^[25].

3 量子计算

建造量子计算机的主要目的之一是执行量子计算任务, 即实现量子算法的运行. 在过去的研究中, 人们提出了各种量子算法, 具有代表性的是肖尔 (Shor) 大数分解算法^[26]、Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) 解线性方程组算法^[27]、格罗夫尔 (Grover) 搜索^[28]、量子退火算法、玻色取样等, 这里简单回顾其中的进展.

解线性方程组 HHL 算法分别在光量子系统^[29]和核磁共振系统^[30]以及超导量子计算系统^[31]得以实现, 这些实验分别利用 4 个量子比特及逻辑门操作演示了二元一次方程组的求解, 证明

此算法的可行性. HHL 线性方程组算法的优势并不在于求解方程组本身, 而考虑对依赖解矢量所定义的量子态的某个观测量感兴趣的情况, 即我们并不需要明确知道解矢量本身, 而只是对某个算子的期望值感兴趣, HHL 算法会具有量子优势. 可以期望, 当我们能精确地测控更多量子比特数时, 应该可以运行包含更多变量的 HHL 算法.

量子肖尔算法的实验演示具有挑战性, 在过去的十多年里也有一系列的进展, 肖尔算法关于 15 的分解最早在核磁共振系统实现^[32], 实验中利用了 7 个核自旋量子比特, 其中 4 个量子比特用来编码数字 15, 3 个量子比特作为周期探测. 肖尔算法后续又在光量子系统^[33]和离子阱系统等利用各种稍有不同方案分别实现^[34], 其中离子阱系统实验虽然只用了 5 个量子比特, 但是一个量子比特被重复使用从而减少了对量子比特总数的要求, 中国科学技术大学杜江峰课题组利用绝热量子计算方法在核磁共振系统成功演示了 143 的分解^[35]和 35 的分解^[36].

量子算法中格罗夫尔搜索也曾在多种实验系统实现^[37,38].

量子退火算法主要在 D-Wave 公司的超导量子模拟器运行和测试. D-Wave 公司最近几年已经出品了从 D-Wave, D-Wave II 到 D-Wave 2000Q 等不断升级的量子退火机, 最新机型具有 2000 多量子位, 其运行模式可以用系统哈密顿量来描述^[39]:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + \sum_i h_i \sigma_i^z, \quad (5)$$

其中量子比特间的相互作用按照其硬件 8 个一组进行耦合, 而每组中的 8 个量子比特分为两小组, 每小组中 4 个量子比特和另外的 4 个两两相互耦合, 而局域可控磁场和耦合方向一致也是在 z 方向, 虽然这个哈密顿实际是经典伊辛模型的形式, 但是由于其初态可以制备为叠加态形式 $|+\cdots+\rangle$, 所以无疑是可以按照量子模式运行的. 但是在量子比特数达到 100 多个量子比特时, 还需要确认量子退火算法在其运行过程中并不会变为热态而失去量子效应^[40].

量子退火机可以被用来研究优化问题, 因为其哈密顿量的基态对应某个优化问题的解, 其运行模式是从初态 $|+\cdots+\rangle$ 按照哈密顿量进行演化到某个经典态, 而哈密顿量参数根据所需要优化的问题来设计调控, 例如希格斯 (Higgs) 的优化问题就可

以用量子退火机来解决^[41]。但是最关键的问题是, 具有百量级到千量级量子比特数的这种中等规模量子位的量子退火机是否具有超越经典计算机的优势, 正如瑞士 Troyer 课题组指出的, 这个问题实际很难明确定义^[42], 即使考虑到量子比特数增长的趋势, 应该说现有 D-Wave 量子退火机是否具有量子优势仍然没有确定性结论^[42,43]。

玻色取样算法对应求矩阵积和式 (permanent) 的值, 即矩阵行列式中的减号全部替换为加号, 玻色取样的实验实现竞争也非常激烈^[44-46], 先期的三个实验几乎同时宣布和发表, 最近潘建伟课题组的进展也引起了广泛关注^[47], 实验中利用 5 光子 9 模式的干涉效应来实现玻色取样的演示。

量子计算主要有两个发展方向: 第一是设计更多的量子算法, 使得量子计算机能被广泛使用并起到人类生活不可或缺的作用; 第二是建造含有更多量子比特的通用量子计算机, 需要攻坚的目标有: 可扩展的量子比特器件制备、长退相干时间、更多量子比特的高保真度相干控制及逻辑门实现。

4 数字式量子计算机模拟器及量子计算云平台

量子计算机的实现有很多种方案, 不同方案各有优劣, 但是面临的共同问题除了扩展性所导致的量子比特数目限制, 还有相干时间和逻辑门操作精度问题, 错误将导致逻辑门实现数目不多, 精度有限。另一方面, 量子计算机的所有运行规律是已知的, 实际上可以利用经典计算机定义量子计算机的运行, 从而用软件实现量子计算的虚拟机。简单地说, 我们可以利用经典计算机建成一个量子计算机的模拟器, 其运行完全遵照量子计算机的规律, 可称其为量子计算虚拟机, 或者数字式量子计算机模拟器。这方面的研究刚刚起步, 关于虚拟机数据和性能的结果有限, 发表的研究论文不多, 这里只是进行粗略的概述。

IBM 的量子体验网站提供了超导量子计算云平台^[48], 作为超导量子计算的模拟辅助工具, 此平台也提供了两种数字式量子模拟器, 分别具有 20 个量子比特和 32 个量子比特, 其中 20 个量子比特的模拟机具有跳转的控制语句功能 (即计算机 if 语句), 而利用高性能服务器平台建设的 32 个量子比特模拟器没有此功能, 另外, 模拟器只是对公众提

供少于 100 个逻辑门的操作。量子计算需要有单发 (single-shot) 测量的功能, 这是量子算法的基本需求, 比如应用广泛的量子隐形传态就需要单发测量及反馈操作功能, 量子测量结果可以用多次单发测量的统计平均得到, 或者模拟器能给出测量概率数值。

我们课题组提供了具有 34 个以上量子比特的量子计算虚拟机云平台 (QtVM)^[49], 具有跳转控制功能、单发测量功能、循环语句控制、基于单发测量的反馈操作等, 运行量子汇编语言, 量子逻辑门数量原则上没有限制, 20 量子比特时每天可以运行约三百万到一千万门数量, 是一种全功能的通用量子计算机数字模拟器。

中国本源量子提供基于半导体量子点的量子计算云平台 and 超导量子计算云平台^[50], 也提供了具有 32 个量子比特的数字式量子计算模拟器, 近期已经升级为具有 64 个量子比特的模拟功能, 可以给出末态的概率。

瑞士 Troyer 课题组^[51]也提供了云量子计算虚拟机和量子汇编语言运行。

量子计算虚拟机运行速度是一个重要指标, 但是常常由于测试时服务器还有其他进程而有较大差别, 得到的测试数据并不完全可信, 一般可以采取在不同时间段分别运行 5 次而取其中最少用时, 但数据间有时也有数量级的差别。我们在中国科学院物理研究所的测试数据为 20 量子比特, 100 单比特旋转门和 100 个受控非门, 100 次单发测量运行时间为 2 s 左右, 而 34 个量子比特用时 14.8 h。此系统还可以运行更多的量子比特, 35 个量子比特 100 逻辑门用时少于 5 h。由于 IBM 只提供少于 100 门操作, 我们测试的数据显示完成同样任务, 其最少用时仍然是我们的 4 倍多。应该注意的是利用经典计算机模拟量子计算机有很明显的指数增长效应, 比如多一个量子比特则运行时间倍增, 而门数量、测量次数等一般也有同样的现象。

现阶段, 数字式量子计算机模拟器相比于物理量子比特量子计算机的突出优势是其功能齐全, 逻辑门次数原则上没有限制, 因此是理想的量子算法和量子模拟测试平台。但是, 随着量子比特数的增长则需要呈指数增长的经典计算机资源, 导致数字式全功能的通用量子计算机最大只能模拟大约不超过 50 个量子比特。如果降低通用功能要求, 则能模拟的量子比特数会更多, 这方面也是有意义的课

题;而探索既能保证可信性、又能实现大规模量子系统模拟的方法,例如蒙特卡罗^[52]、张量网络态等技术^[53],一直都是重要的科学研究领域。

潘建伟课题组^[54]和清华大学龙桂鲁课题组^[55]也分别提供了超导量子计算机云平台和核磁共振量子计算云平台供科研人员及大众测试。

5 量子软件及量子机器学习

如同经典计算机具有功能多样的软件,量子计算机的人机交互也需要量子软件,从而实现把各种任务转化为量子计算机能运行的量子逻辑门操作和测量读出,如果和经典系统类比,量子软件也可以说是量子计算机的灵魂。可以期望和经典计算机一样,量子计算机最高端是高级语言,高级语言被编译为量子计算机可执行的逻辑门操作、量子信息的传输等,比如表现为量子汇编语言,但是具体在量子硬件方面则还需要量子态控制和量子纠错等技术^[56]。

由于机器学习和人工智能的巨大成功和发展潜力,量子机器学习^[57]也被认为具有重要的应用前景,量子机器学习将致力于设计出特色量子软件,以期利用线性方程组求解的HHL量子算法、D-Wave量子计算机的优化处理和玻尔兹曼机、量子向量机和量子形式的基础线性代数程序(Basic Linear Algebra Subprograms)等技术实现基于机器学习方法的量子加速。

如果我们着眼于量子软件,则发现其应具有赋值、循环等基本功能,同时也应该包含中段的测量读出并反馈操作等功能,所以量子汇编语言并不能简单地完全由通用量子逻辑门组成,也应具有测量反馈语句、中段测量结果处理等功能需要经典计算机完成。从这一点来看,量子计算机不应该理解为只是完全按照量子力学原理运行的计算机,而应该想象为具有量子功能器件,但其操控、优化、中间测量结果处理、经典信息存储等系列任务仍然由经典计算机完成,是一种现有经典计算机的升级。

但是也有量子相干反馈控制方案指出,量子计算也可以不需要中段的经典信息和控制等的介入而实现全量子相干操作^[58],从而避免经典信息处理时有可能引发的指数增长计算资源的需求问题。

量子软件是一个开放性课题,其发展还处于较为初级的阶段,应该兼具实现量子算法,起到联

通底层量子器件与上层面向大众实际应用的桥梁作用。

6 讨论与展望

量子计算和量子模拟等发展迅速,重要结果和相关文献繁多,本文主要内容是作者课题组近期重点关注的研究方向,出发点是为今后的研究打好基础,所以不免在选题方面有所偏好,另一方面我们也希望尽量能对相关内容做一个全景式的综述,涵盖一些重要进展,希望能对读者有所帮助。

量子计算与量子模拟最近一两年呈现出爆发性发展的趋势,整个领域的关注点也具有新的特色,可以总结为下面4点:第一,研究趋向于中等规模量子比特数的科学问题和技术突破;第二,不局限于特定量子计算物理实现系统,而是更关注具有普适性的多量子比特量子计算和量子模拟问题;第三,关注点从原来的纯粹原理性演示过渡到具有真正实用价值并超越经典计算机的问题;第四,更注重量子计算机各种功能的高效集成和更高的自动化。

总之,量子计算的发展已经进入到一个新的历史阶段,挑战和机遇并存,进入量子计算这一令人激动的研究领域不再需要先掌握全面系统的量子计算知识,而是结合量子多体凝聚态系统、量子场论与统计、高能物理、量子化学,机器学习、大数据处理优化等方面的专门知识,辅助以量子计算基本原理,就可能在量子计算领域做出创新性成果。这一方面反映出量子计算基本理论趋于完善,另一方面量子计算和各学科的融合才刚刚起步,未来的发展前景远大。

而量子计算机的建成则科学性和工程性并存,一方面原理上没有不可克服的困难,另一方面技术和工程上又具有很大的不确定性,需要在相干时间和操控精度等方面有系列突破才能建成量子计算原型机。

感谢中国科学院物理研究所向涛研究员、潘新宇研究员、王磊研究员、孟子杨研究员、赵士平研究员、郑东宁研究员、金贻荣副研究员,浙江大学王浩华教授,中国科学技术大学朱晓波教授,北京大学穆良柱教授、何琼毅教授以及胡明亮、胡雪元、许凯、陈锦俊、彭益、葛自勇、曾昱、张煜然、王正安、刘尚、叶柄天、王贺明、王雯、王峻、韩兆宇等就相关课题所进行的多次深入讨论,感谢诸多合作者的帮助。

参考文献

- [1] Feynman R P 1982 *Int. J. Theor. Phys.* **21** 467
- [2] Bernie H, Schwartz S, Keesling A, Levine H, Omran A, Pichler H, Choi S, Zibrov A S, Endres M, Greiner M, Vuletić V, Lukin M D 2017 *Nature* **551** 579
- [3] Zhang J, Pagano G, Hess P W, Kyprianidi A, Becker P, Kaplan H, Gorshkov A V, Gong Z X, Monroe C 2017 *Nature* **551** 601
- [4] Heyl M, Polkovnikov A, Kehrein S 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 135704
- [5] Wilczek F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 250402
- [6] Yao N Y, Potter A C, Potimiche I D, Vishwanath A 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 030401
- [7] Zhang J, Hess P W, Kyprianidis A, Becker P, Lee A, Smith J, Pagano G, Potirniche I D, Potter A C, Vishwanath A, Yao N Y, Monroe C 2017 *Nature* **543** 217
- [8] Choi S, Choi J, Landig R, Kucsko G, Zhou H, Isoya J, Jelezko F, Onoda S, Sumiya H, Khemani V, Keyserlingk C, Yao N Y, Demler E, Lukin M D 2017 *Nature* **543** 221
- [9] Schreiber M, Hodgman S S, Bordia P, Lüschen H P, Fischer M H, Vosk R, Altman E, Schneider U, Bloch I 2015 *Science* **349** 842
- [10] Alvarez G A, Suter D, Kaiser R M 2015 *Science* **349** 846
- [11] Choi J Y, Hild S, Zeiher J, Schauß P, Rubio-Abadal A, Yefsah T, Khemani V, Huse D A, Bloch I, Gross C 2016 *Science* **352** 1547
- [12] Smith J, Richerme P, Neyenhuis B, Hess P W, Hauke P, Heyl M, Huse M A, Monroe C 2016 *Nat. Phys.* **12** 907
- [13] Xu K, Chen J J, Zeng Y, Zhang Y R, Song C, Liu W, Guo Q, Zhang P, Xu D, Deng H, Huang K, Wang H, Zhu X, Zheng D, Fan H 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 050507
- [14] Roushan P, Neill C, Tangpanitanon J, Bastidas V M, Megrant A, Barends R, Chen Y, Chen Z, Chiaro B, Dunsworth A, Fowler A, Foxen B, Giustina M, Jeffrey E, Kelly J, Lucero E, Mutus J, Neeley M, Quintana C, Sank D, Vainsencher A, Wenner J, White T, Neven H, Angelakis D G, Martinis J 2017 *Science* **358** 1175
- [15] An S, Zhang J N, Um M, Lü D, Lu Y, Zhan J, Yin Z Q, Quan H T, Kim K 2015 *Nat. Phys.* **11** 193
- [16] Liu B H, Li L, Huang Y F, Li C F, Guo G C, Laine E M, Breuer H P, Piilo J 2011 *Nat. Phys.* **7** 931
- [17] Guo X Y, Peng Y, Peng C N, Deng H, Jin Y R, Tang C, Zhu X B, Zheng D, Fan H 2017 *arXiv:171010234 [quant-ph]*
- [18] Peng X H, Zhou H, Wei B B, Cui J, Du J, Liu R B 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 010601
- [19] Lu C Y, Gao W B, Gühne O, Zhou X Q, Chen Z B, Pan J W 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 030502
- [20] Zhong Y P, Xu D, Wang P, Song C, Guo Q J, Liu W X, Xu K, Xia B X, Lu C Y, Han S, Pan J W, Wang H 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 110501
- [21] Martinez E A, Muschik C A, Schindler P, Nigg D, Erhard A, Heyl M, Hauke P, Dalmonte M, Monz T, Zoller P, Blatt R 2016 *Nature* **534** 516
- [22] Aspuru-Guzik A, Dutoi A D, Love P J, Head-Gordon M 2005 *Science* **309** 1704
- [23] Lanyon B P, Whitfield J D, Gillett G G, Goggin M E, Almeida M P, Kassal I, Biamonte J D, Mohseni M, Powell B J, Barbieri M, Aspuru-Guzik A, White A G 2010 *Nat. Chem.* **2** 106
- [24] McClean J R, Kivlichan I D, Sung K J, Steiger D S, Cao Y, Dai C, Fried E S, Gidney C, Gimby B, Häner T, Hardikar T, Havlíček V, Huang C, Jiang Z, Neeley M, O'Brien T, Ozfidan I, Radin M D, Romero J, Rubin N, Sawaya N P D, Setia K, Sim S, Steudtner M, Sun W, Zhang F, Babbush R 2017 *arXiv: 171007629 [quant-ph]*
- [25] Georgescu I M, Ashhab S, Nori F 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 153
- [26] Shor P 1997 *SIAM J. Comput.* **26** 1484
- [27] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 150502
- [28] Grover L K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 325
- [29] Cai X D, Weedbrook C, Su Z E, Chen M C, Gu M, Zhu M J, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 230501
- [30] Pan J, Cao Y, Yao X, Li Z, Ju C, Chen H, Peng X, Kais S, Du J 2014 *Phys. Rev. A* **89** 022313
- [31] Zheng Y R, Song C, Chen M C, Xia B, Liu W, Guo Q J, Zhang L, Xu D, Deng H, Huang K, Wu Y, Yan Z, Zheng D, Lu L, Pan J W, Wang H, Lu C Y, Zhu X 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 210504
- [32] Vandersypen L M K, Steffen M, Breyta G, Yannoni C S, Mark H, Sherwood M H, Chuang I L 2001 *Nature* **414** 883
- [33] Lu C Y, Browne D E, Yang T, Pan J W 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 250504
- [34] Monz T, Nigg D, Martinez E A, Brandl M F, Schindler P, Rines R, Wang S X, Chuang I L, Blatt R 2016 *Science* **351** 1068
- [35] Xu N Y, Zhu J, Lu D, Zhou X, Peng X, Du J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 130501
- [36] Xu K B, Xie T, Li Z, Xu X, Wang M, Ye X, Kong F, Geng G, Duan C, Shi F, Du J 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 130504
- [37] Jones J L, Mosca M, Hansen R H 1998 *Nature* **393** 344
- [38] Figgat C, Maslov D, Landsman K A, Linke N M, Debnath S, Monroe C 2017 *Nat. Commun.* **8** 1918
- [39] Johnson M W, Amin M H, Gildert S, Lanting T, Hamze F, Dickson N, Harris R, Berkley A J, Johansson J, Bunyk P, Chapple E M, Enderud C, Hilton J P, Karimi K, Ladizinsky E, Ladizinsky N, Oh T, Perminov I, Rich C, Thom M C, Tolkacheva E, Truncik C J, Uchaikin S, Wang J, Wilson B, Rose G 2011 *Nature* **473** 194
- [40] Boixo S, Rønnow T, Isakov S V, Wang Z, Wecker D, Lidar D A, Martinis J M, Troyer M 2014 *Nat. Phys.* **10** 218
- [41] Mott A, Job J, Vlimant J R, Lidar D, Spiropulu M 2017 *Nature* **550** 375
- [42] Rønnow T F, Wang Z, Job J, Boixo S, Isakov S V, Wecker D, Martinis J M, Lidar D A, Troyer M 2014 *Science* **345** 420
- [43] Heim B, Rønnow T F, Isakov S V, Troyer M 2015 *Science* **348** 215

- [44] Broome M A, Fedrizzi A, Rahimi-Keshari S, Dove J, Aaronson S, Ralph T C, White A G 2013 *Science* **339** 794
- [45] Spring J B, Metcalf B J, Humphreys P C, Kolthammer W S, Jin X M, Barbieri M, Datta A, Thomas-Peter N, Langford N K, Kundys D, Gates J C, Smith B J, Smith P G R, Walmsley I A 2013 *Science* **339** 798
- [46] Tillmann M, Dakić B, Heilmann R, Nolte S, Szameit A, Walther P 2013 *Nat. Photon.* **7** 540
- [47] Wang H, He Y, Li Y H, Su Z E, Li B, Huang H L, Ding X, Chen M C, Liu C, Qin J, Li J P, He Y M, Schneider C, Kamp M, Peng C Z, Höfling S, Lu C Y, Pan J W 2017 *Nat. Photon.* **11** 361
- [48] IMB Q Experience, <http://quantumexperience.ng.bluemix.net/qx/experience>
- [49] Institute of Physics of CAS, Fan group, QtVM, <http://q.iphy.ac.cn>
- [50] OriginQC, www.qubonline.cn
- [51] Station Q Zurich, <http://www.compphys.ethz.ch/research/station-q-zurich.html>
- [52] Shao H, Qin Y Q, Capponi S, Chesi S, Meng Z Y, Sandvik A W 2017 *Phys. Rev. X* **7** 041072
- [53] Liao H J, Xie Z Y, Chen J, Liu Z Y, Xie H D, Huang R Z, Normand B, Xiang T 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 137202
- [54] Alibaba Superconducting Quantum Computer Online, <http://quantumcomputer.ac.cn>
- [55] Tsinghua University, Long group, NMRCLOUDQ, <http://nmrcloudq.com/zh-hans/>
- [56] Chong F T, Franklin D, Martonosi M 2017 *Nature* **549** 180
- [57] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, Rebentrost P, Wiebe N, Lloyd S 2017 *Nature* **549** 195
- [58] Lloyd S 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022108

Quantum computation and quantum simulation*

Fan Heng^{1)2)†}

1) (*Solid State Quantum Information and Computation Laboratory, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

2) (*Center for Excellence in Topological Quantum Computation, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(Received 17 April 2018; revised manuscript received 30 April 2018)

Abstract

In past few years, quantum computation and quantum simulation have been developed rapidly. The research on quantum computation and quantum simulation involving medium scale number of qubits will have a development priority. In this paper, we review recent developments in those directions. The review will include quantum simulation of many-body system, quantum computation, digital quantum simulators and cloud quantum computation platforms, and quantum software. The quantum simulation of many-body system will include the simulation of quantum dynamics, time crystal and many-body localization, quantum statistical physics and quantum chemistry. The review of those results is based on our consideration to the current characteristics of quantum computation and quantum simulation. Specifically, the number of available qubits is on a medium scale from dozens to several hundreds, the fidelity of the quantum logic gate is not high enough for several thousand of operations. In this sense, the present research is at the stage from fundamental explorations to practical applications. With these in mind, we hope that this review can be helpful for the future study in quantum computation and quantum simulation.

Keywords: quantum computation, quantum simulation, quantum many-body, quantum dynamics

PACS: 03.67.-a, 03.65.Ta, 03.67.Mn, 75.10.Pq

DOI: [10.7498/aps.67.20180710](https://doi.org/10.7498/aps.67.20180710)

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2016YFA0302104, 2016YFA0300600), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 91536108, 11774406), and the Key Research Program of the Chinese Academy of Sciences (Grant No. XDPB08-3).

† Corresponding author. E-mail: hfan@iphy.ac.cn