

Simulation of Quantum Computation

some classic simulation strategies

陈科

Faculty of Artificial Intelligence
Nanchang University

Linked 量子系统研讨班
2022 年 12 月 7 日

目录

- 1 StateVector and Density Matrices: The Schrödinger Formalism (薛定谔形式)
- 2 Feynman Formalism (费曼形式)
- 3 Stabilizer Formalism: The Heisenberg Formalism (海森堡形式)
- 4 Tensor Networks (张量网络)
- 5 Decision Diagram (决策图)

The Schrödinger Formalism

The Schrödinger formalism represents **quantum states** by their **wave-functions**, while **unitary operators** modify these states.

定义: Wave-functions

A wave function in quantum physics is **a mathematical description of the quantum state** of an isolated quantum system. The wave function is a **complex-valued probability amplitude**, and the probabilities for **the possible results of measurements** made on the system can be derived from it.

例

The state of such a particle is completely described by its wave function,

$$\psi(x, t) \quad (1)$$

where x is position and t is time. This is a complex-valued function of two real variables x and t .

Wave-functions to Vectors

At a particular instant of time, all values of the wave function $\Psi(x, t)$ are components of a vector. There are uncountably infinitely many of them and **integration** is used in place of summation. In Bra-ket notation, this vector is written

$$|\Psi(t)\rangle = \int \Psi(x, t)|x\rangle dx \quad (2)$$

and is referred to as a "quantum state vector", or simply "quantum state". Advantages of an abstract vector space:

- All **the powerful tools of linear algebra** can be used to manipulate and understand wave functions.
- The idea that quantum states are vectors in an abstract vector space is **completely general in all aspects of quantum mechanics and quantum field theory**.

StateVector and Density Matrices - Naive Approach

Postulate of quantum mechanics 1

Quantum states are represented as vectors in a Hilbert space.

量子态可以通过状态向量表示，操作可以通过酉算符表示，操作的核心是矩阵相乘。下面给出一个状态向量表示的例子。

例

如下是两个量子比特的状态向量：

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} \quad (3)$$

其中 α_i 为向量中的元素， $|\alpha_i|^2$ 对应测量为 $|i\rangle$ 的概率。

StateVector and Density Matrices Simulator

定义: Density matrix

The density matrix language provides a convenient means for **describing quantum systems whose state is not completely known**. More precisely, suppose a quantum system is in one of a number of states $|\psi_i\rangle$, where i is an index, with respective probabilities p_i . We shall call $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ an ensemble of pure states. The density matrix for the system is defined by the equation:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (4)$$

例

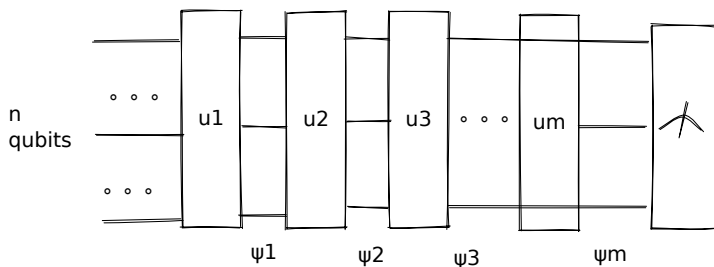
如下为一个混合态, 有 $1/2$ 概率为 $|0\rangle$, $1/2$ 概率为 $|1\rangle$, 密度矩阵为:

$$\rho = \frac{1}{2} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle \langle 1| \quad (5)$$

注意, 状态向量是无法表示混合态的, 只能表示纯态。

StateVector Simulation

我们分析下图的量子电路来理解量子模拟过程以及复杂度。



$$|\psi_m\rangle = u_m \dots u_2 u_1 |\psi_0\rangle \quad (6)$$

其中 $|\psi_i\rangle = u_i |\psi_{i-1}\rangle$ 为 2^n 维向量 $\times 2^n$ 维矩阵。

- 存储量子态所需内存: (2^n)
- 运算时间: $O(m \cdot 2^n)$

虽然这种经典的薛定谔形式模拟复杂度高，但其通过 array 进行简单实现，并且易使用 GPU 或者并行计算进行加速。

Unentangled StateVector Simulation

我们下面考虑一种特殊的情况下的状态向量模拟：
假设下述量子态 ψ 非纠缠：

$$|\psi_m\rangle = |q_1\rangle \otimes |q_2\rangle \otimes \dots \otimes |q_n\rangle \quad (7)$$

即算子为局部算子（即只作用单量子比特门）。

$$u_i = |I\rangle \otimes |I\rangle \otimes \dots \otimes u \otimes \dots \otimes |I\rangle \quad (8)$$

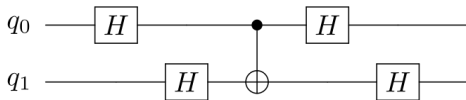
- 其中 ψ 为张量积态，只需要存储 2^n 个系数，而非 2^n 。
- 只更新作用单量子门的局部比特，即每层更新的 qubit 数量一般为常数，即运行时间为 $O(m)$ 。

模拟非纠缠态是非常有效的，但是实际中大部分量子态都是处于多体纠缠态，并且几乎全部的量子算法也需要用到纠缠态。

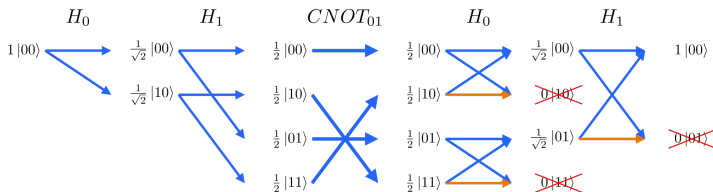
Feynman-Path Example

费曼形式在不计算中间量子态，直接计算某个量子态的概率，在内存方面取得一定的优化。

假设我们需要模拟下面电路：



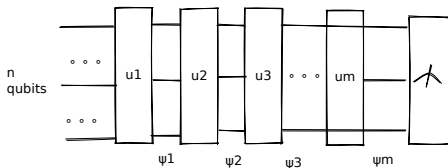
通过费曼路径积分模拟过程，如下所示：



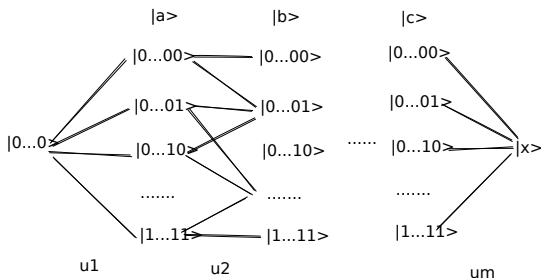
我们需要计算 $|00\rangle$ 的概率，通过费曼路径积分模拟，我们可以得到 1。计算其余状态得到的概率均为 0。

Feynman-Path

对于下面电路，假设初始状态均为 0，最终某量子态 $|x\rangle$ 对应振幅为：
 $\langle x | u_m \dots u_2 u_1 | 0 \dots 0 \rangle$



我们画出其费曼路径积分图：



其中 $|a\rangle$ 、 $|b\rangle$ 、 $|c\rangle$ 对应叠加态下的某个非叠加量子态。假设 $|a\rangle, |b\rangle$ 之间存在路径（即通过 u_2 后， $|a\rangle$ 有概率得到 $|b\rangle$ ），其中 a, b 对应振幅为 α_{a1} 、 α_{b2} 。则

$$\alpha_{b2} = \alpha_{a1} \cdot \langle a|u_2|b\rangle \quad (9)$$

我们假设存在某个函数 $f(b, j)$ ，可以求得第 j 步之后 $|b\rangle$ 对应的振幅。对于最终 $|x\rangle$ 所对应的振幅 $\alpha_{xm} = f(x, m)$ ，其中 $f(x, m)$ 的递归写法如下：

$$f(x, m) = \sum_{c \in \{0,1\}^n} \langle c|u_m|x\rangle f(c, m-1) \quad (10)$$

- 内存分析：通过树结构构建，需要储存路径的 $nm \log m$ 个复数。
- 假设 u_i 为 2-qubit 门的话，将最多产生 4 条路径，总共需要调用 m 次，因此时间复杂度上限为 4^m 。总的时间成本大概 $O(m2^{n(m-1)})$ 。

The Heisenberg Formalism (海森堡形式)

The Heisenberg Formalism

在海森堡形式中，量子系统的演进可以描述为随时间跟踪算子。

假设我们考虑一个算子是 observable A ，在薛定谔形式，我们通过最终状态向量共轭相乘 ($\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$) 来计算可观察值的期望值。相比于薛定谔形式随时间改变状态向量，海森堡形式是等效形式，只不过其中状态向量保持恒定在初始值 $|\psi\rangle = |\psi(0)\rangle$ ，但算符随时间演化 $\langle A \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | A(t) | \psi(0) \rangle$ 。

换句话说，我们可以通过其时间相关算子 $A(t)$ 来追踪量子系统的演化：

$$A(0) \rightarrow_{time} A(t) = U^\dagger A(0) U \quad (11)$$

基于 Stabilizer Formalism(稳定形式) 的经典模拟器对于量子计算的海森堡形式。

Stabilizer Formalism

Stabilizer Formalism 能够对一类受限制的量子电路进行有效的模拟。

- 受限制：为稳定型电路（也就是我们知道的 Clifford 电路）。
- 有效：空间和时间复杂度都为 $O(\text{poly}(n))$ 。

stabilizer gate

A quantum gate is a stabilizer gate if it is generated from the Clifford group $S = \langle CNOT, H, S \rangle$. In other words, it is a product of $g \in S$.

stabilizer state

A state is a stabilizer state if it can be prepared from $|00\dots 0\rangle$ using stabilizer gates.

例

比如，泡利门都属于稳定门： $X = HZH$, $Y = iXZ$, $Z = SS$. 单量子比特稳定态有： $|0\rangle, |1\rangle, |+\rangle, |-\rangle$,

Stabilizer Formalism

stabilizer circuit

A quantum circuit is a stabilizer circuit if it is made of stabilizer gates applied on input state $|00\dots 0\rangle$, and measurements in the computational basis.

stabilized

$|\psi\rangle$ is stabilized by a quantum circuit U and U is a stabilizer of $|\psi\rangle$, if $U|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

例

下面给出一些常用的稳定关系：

- I stabilizes everything. $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$
- X stabilizes $|+\rangle$. $X|+\rangle = |+\rangle$
- $-Z$ stabilizes $|1\rangle$. $-Z|1\rangle = |1\rangle$
- $X \otimes I$ stabilizes $|+\rangle \otimes |0\rangle, |+\rangle \otimes |+\rangle$

Stabilizer Formalism

我们能够通过 Stabilizer(稳定器), 去**唯一表达**一个量子态。

Stabilizers

假设我们有一个量子态为 $|\psi\rangle$, 其中 $X \otimes I = XI$ 能够使其稳定, 但是 XI 稳定了多个状态, 状态也不仅仅被一个稳定器稳定。但我们希望找到一个集合 S , 使得 $s \in S$, 任意 s 都能稳定其状态时, 状态能够被 S 唯一确定。

例

比如 $|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |0\rangle$, 集合为 $\{II, XI, IZ, XZ\}$ 。注意 II 稳定任何的两比特态, XZ 是由 XI 和 ZI 相乘而来的。所以本质上, 为了唯一地表示我们的 $|+\rangle \otimes |0\rangle$ 状态, 我们只需要跟踪两个稳定器 XI 和 IZ 。即我们可以通过 XI 和 IZ 组成的生成集来唯一表示量子态。

Stabilizer Formalism Simulation

下面举例，量子电路是如何进行模拟的：

例

存在电路： $|+\rangle \otimes |0\rangle \xrightarrow{I \otimes H} |+\rangle \otimes |+\rangle$ 。观察到稳定器集合为： $\{II, XI, IZ, XZ\} \xrightarrow{I \otimes H} \{II, XI, IX, XX\}$ 。其中生成集 $\{XI, IZ\} \xrightarrow{I \otimes H} \{XI, IX\}$

生成集 S 确定的状态 $|\psi_S\rangle$ ， $|\psi_S\rangle \rightarrow U|\psi_S\rangle$ ，由于 $U|\psi_S\rangle = Ug|\psi_S\rangle = UgU^\dagger(U|\psi_S\rangle)$ ，即新的生成集为 $S' = UgU^\dagger$ 。

Gottesman-Knill

Gottesman-Knill 定理表明了 Clifford 线路可以被经典计算机在多项式复杂度内有效模拟。

我们通常会理解，“量子优越性是由于量子态可以相干叠加、qubits 可以发生纠缠”等。现在我们看到，Clifford 线路也可以产生叠加态、纠缠态，但 Clifford 线路并没有相对于经典线路的优越性。这说明量子优越性若存在，也应该存在于 Clifford 线路所能产生的这类纠缠之外。

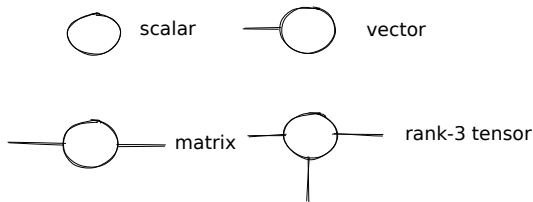
Tensor Networks theory

Tensors

张量是复数的多维数组。张量的秩是指标的个数。

Index contraction(索引收缩)

index contraction(索引收缩) 是一组张量的重复索引的所有可能值的总和 (本质是: 向量的内积)。比如两个二维张量收缩一个指标, 就是矩阵相乘。

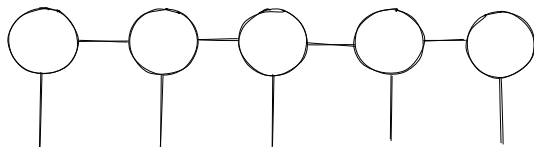


秩 0 张量为标量 (\times), 秩 1 张量为向量 (v), 秩 2 张量为矩阵 (A).

Tensor Networks theory

Tensors Network

张量网络 (Tensor Network, TN) 是一组张量的集合，其中部分或全部的索引按照某种模式收缩。

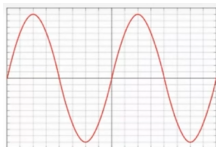


如上图，张量之间的边通常被称为 bond (键) 或 ancillary indices (辅助指标)，其可能取值的个数称为 bond dimension (键维度)，最大 bond dimension 常用 D 表示。它们代表了量子态 $|\psi\rangle$ 中多体纠缠的结构，bond dimension 是波函数中量子关联数量的定量度量。

Why Tensor Networks?

张量网络能够帮我们找到数据的结构。我们可以理解数学方法，通过张量网络的形式来找到这些数据的某些结构。

假设我们有 10^6 个数据，但其实它是一个正弦曲线，事实上，我们仅仅只需要两个参数即可确定图像。

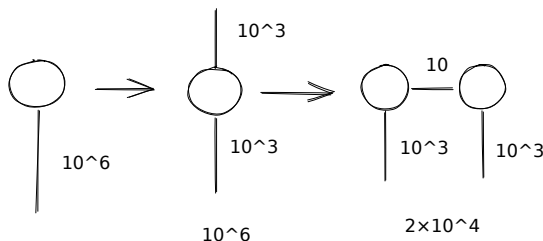


```
[ 0.000, 0.100, 0.199, 0.296, 0.389, 0.479, 0.565, 0.644, 0.717, 0.783,  
 0.841, 0.891, 0.932, 0.964, 0.985, 0.997, 1.000, 0.992, 0.974, 0.946,  
 0.909, 0.863, 0.808, 0.746, 0.675, 0.598, 0.516, 0.427, 0.335, 0.239,  
 0.141, 0.042, -0.058, -0.158, -0.256, -0.351, -0.443, -0.530, -0.612,  
 .....  
 -0.688, -0.757, -0.818, -0.872, -0.916, -0.952, -0.978, -0.994, -1.000,  
 -0.996, -0.982, -0.959, -0.926, -0.883, -0.832, -0.773, -0.706, -0.631,  
 -0.551, -0.465, -0.374, -0.279, -0.182, -0.083, 0.017, 0.117, 0.215,  
 0.312, 0.405, 0.494, 0.578, 0.657, 0.729, 0.794, 0.850, 0.899, 0.938 ]
```

10^6 data points in a vector

Why Tensor Networks?

如下图，对于 10^6 数据，我们既可以通过一维张量表示，也可以通过二维张量表示。如果一个矩阵写成两个瘦的矩阵的乘积，找到低秩的结构，能够降低储存复杂度，付出代价是需要缩并的计算。



MPS

MPS 可能是 TN 态最著名的例子，对应于一维张量阵列的 TN 态。主要分为两类，第一类是具有开放边界条件的 MPS (数学家有时称之为 Tensor Train 分解)，第二类是具有周期边界条件的 MPS。

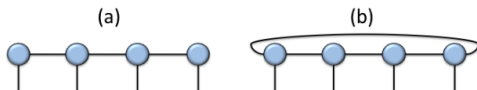


Figure 11: (color online) (a) 4-site MPS with open boundary conditions; (b) 4-site MPS with periodic boundary conditions.

下面介绍两个 MPS 比较重要的性质：

- 正则性质：对于具有开放边界条件的 MPS，给定一个量子态 $|\rangle$ ，有一个非常方便的张量选择称为 MPS [13、14] 的正则形式。
- MPS 是有限相关：MPS 的关联函数总是随分离距离呈指数衰减。

Canonical forms of MPS

Canonical forms

对于给定的具有开边界条件 (无论是对于有限系统还是无限系统) 的 MPS, 我们说它是其正则形式 [14], 如果对于每个键索引, 该索引对应于 $|\rangle$ 在该索引上的 Schmidt 分解中的 Schmidt 向量的索引号, 即:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^D \lambda_{\alpha} |\Phi_{\alpha}^L\rangle \otimes |\Phi_{\alpha}^R\rangle \quad (12)$$

式中: λ_{α} 为按降阶 ($\lambda_1 \lambda_2 \cdots 0$) 排序的施密特系数, 施密特向量构成正交正态集, 即 $\langle \Psi_{\alpha}^L | \Psi_{\alpha}^L \rangle = \langle \Psi_{\alpha}^R | \Psi_{\alpha}^R \rangle = \delta_{\alpha\alpha}$ 。对于 N 个 sites(节点) 的有限体系 [13], 上述条件对应于波函数系数的分解:

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = \Gamma_{\alpha_1}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[1]} \Gamma_{\alpha_1 \alpha_2}^{[2]i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[2]} \Gamma_{\alpha_2 \alpha_3}^{[3]i_3} \lambda_{\alpha_3}^{[3]} \dots \lambda_{\alpha_{N-1}}^{[N-1]} \Gamma_{\alpha_{N-1}}^{[N]i_N} \quad (13)$$

Canonical forms of MPS - Proof

证明.

如果我们在位点 1 和剩余的 $N - 1$ 之间进行 Schmidt 分解, 我们可以将态写为

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1}^{\min(p,D)} \lambda_{\alpha_1}^{[1]} |\tau_{\alpha_1}^{[1]}\rangle \otimes |\tau_{\alpha_1}^{[2\dots M]}\rangle \quad (14)$$

式中: $\lambda_{\alpha_1}^{[1]}$ 为施密特系数, $|\tau_{\alpha_1}^{[1]}\rangle$ 和 $|\tau_{\alpha_1}^{[2\dots M]}\rangle$ 为应对的左右施密特基向量。如果我们根据位置 1 的局部基 $|i_1\rangle$ 改写左 Schmidt 向量, 那么态 $|\psi\rangle$ 可以写为

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1=1}^p \sum_{\alpha_1}^{\min(p,D)} \Gamma_{\alpha}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[1]} |i_1\rangle \otimes |\tau_{\alpha_1}^{[2\dots M]}\rangle \quad (15)$$

重复再进行施密特分解, 并且展开施密特基, 最终得到:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i\}} \sum_{\{\alpha\}} (\Gamma_{\alpha_1}^{[1]i_1} \lambda_{\alpha_1}^{[1]} \Gamma_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]i_2} \lambda_{\alpha_2}^{[2]} \cdots \lambda_{\alpha_{N-1}}^{[N-1]} \Gamma_{\alpha_{N-1}}^{[N]i_N}) |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \cdots \otimes |i_N\rangle \quad (16)$$

Canonical forms of MPS

MPS 的正则型具有许多性质，这使得它对 MPS 计算非常有用。最主要是计算 norm 和局部算子期望值。

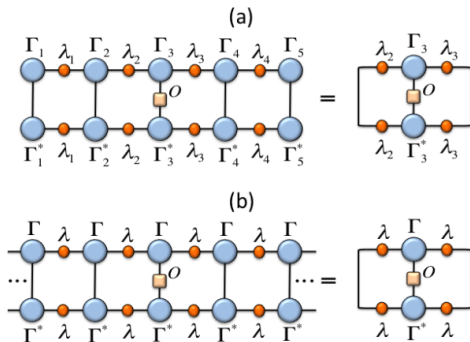


Figure 20: (color online) Expectation value of a 1-site observable for an MPS in canonical form:
(a) 5-site MPS and (b) infinite MPS with 1-site unit cell.

Decision Diagram Example

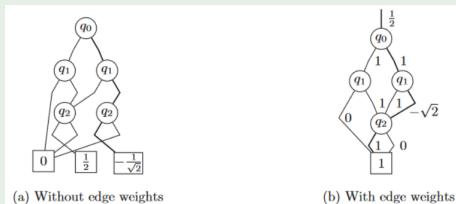
下面我们考虑通过决策图表示一个量子态：

例

如下为一个 3 比特的量子态，通过矩阵，我们需要存储 $2^3 = 8$ 位，但是实际上只使用到了 3 位。

$$\varphi = \left[0, 0, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right]^T.$$

其决策图可以表示如下：

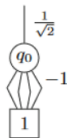


Decision Diagram Matrix Example

下面我们考虑通过决策图表示酉矩阵：

例

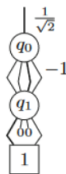
如下图用决策图表示酉矩阵：



(a) H



(b) I_2



(c) $U = H \otimes I_2$

对于单比特量子酉算符，通过四条边来表示量子态。

Decision Diagram Operator Example

下面我们考虑通过决策图运算：

基本运算

决策图酉矩阵与向量相乘。

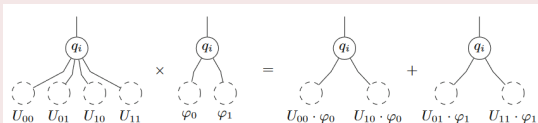


Fig. 5.4 Multiplication of a unitary matrix and a state vector

向量相加：

Fig. 5.5 Addition of state vectors

