

学校代码： 10246
学 号： 16110190045

復旦大學

博士 学位 论 文 (学术学位)

Z₂ 格点规范理论的量子模拟及其在图论量子算法中 的应用

**Quantum Simulation of Z₂ Lattice Gauge Theory and Its
Application in Quantum Algorithm of Graph Theory**

院 系： 物理系

专 业： 理论物理

姓 名： 崔晓鹏

指 导 教 师： 施郁 教授

完 成 日 期： 2020 年 8 月 10 日

目 录

目录	i
摘要	v
Abstract	vii
第1章 绪论	1
§ 1.1 Z_2 格点规范理论简介	1
§ 1.2 论文的主要研究内容	10
第2章 基于 GPU 量子模拟器的 Z_2 格点规范理论的量子模拟	15
§ 2.1 量子模拟方案	15
2.1.1 量子 Z_2 规范理论	15
2.1.2 量子绝热算法和量子线路	17
2.1.3 初态制备	20
2.1.4 绝热条件	21
2.1.5 模拟测量	22
2.1.6 硬件平台	23
§ 2.2 模拟结果	24
2.2.1 Wegner-Wilson loop 和 QPT 临界点	24
2.2.2 DOS 分析	25
2.2.3 量子相变的阶数	29
2.2.4 拓扑量子相变	32
§ 2.3 小结	36

第 3 章	格点拓扑改变诱导的 Z_2 拓扑量子相变	37
§ 3.1	Z_2 哈密顿量和格子拓扑	37
§ 3.2	Torus 和 Klein 格子下 g 改变诱导的拓扑量子相变对比	38
§ 3.3	随着 λ 改变格子从 Torus 变化到 Klein 诱发的一阶拓扑量子相变	40
§ 3.4	相图	40
§ 3.5	从不同退禁闭相简并基态出发的拓扑量子相变	41
§ 3.6	量子模拟方法	42
§ 3.7	小结	45
第 4 章	量子 Z_2 格点规范理论在图论 HCP 问题中的应用	47
§ 4.1	Torus 格子中 Z_2 退禁闭相基态的闭弦和哈密顿回路	47
§ 4.2	图和格子的映射关系	48
§ 4.3	基于 Z_2 拓扑量子相变获取闭弦凝聚态的量子算法及其计算复杂度	50
§ 4.4	Z_2 拓扑相变临界参数 g_c 和图的关系	51
4.4.1	用四个不同的图来测试临界参数 g_c	51
4.4.2	g_c 和图哈密顿回路数量 N_{hc} 的关系	52
4.4.3	g_c 和图边数 N_e 的关系	53
4.4.4	g_c 和图顶点度数的关系	53
4.4.5	拟合分析	54
§ 4.5	量子模拟方法	55
§ 4.6	小结	58
第 5 章	QBLAS: 一个量子基本线性代数和模拟库	59
§ 5.1	QBLAS 概览	59
§ 5.2	数据类型的比特格式	59
§ 5.3	量子随机存储器 QRAM	60
§ 5.4	量子向量 QVector	61
5.4.1	量子向量制备 preparation	62

5.4.2 向量操作: 内积和距离	63
§ 5.5 矩阵量子模拟	66
5.5.1 Trotter 哈密顿分解模拟	67
5.5.2 稀疏矩阵的量子步模拟	67
5.5.3 密度矩阵模拟	71
5.5.4 低秩稠密矩阵模拟	72
§ 5.6 矩阵操作: 求逆和分解	72
5.6.1 量子傅里叶变换 (QFT)	72
5.6.2 量子相位估计 (QPE)	73
5.6.3 矩阵求逆 HHL 算法	73
5.6.4 矩阵本征值分解	74
5.6.5 矩阵奇异值分解 (SVD) 算法	75
5.6.6 量子主成分分析 (PCA) 算法	75
§ 5.7 测试	76
5.7.1 向量部分	76
5.7.2 矩阵部分	77
§ 5.8 代码说明	78
§ 5.9 小结	79
第 6 章 结论和展望	81
§ 6.1 结论	81
§ 6.2 展望	82
参考文献	83
攻读博士学位期间撰写的论文情况	91
致谢	93

摘要

第一章阐述了课题的研究背景: Z_2 格点规范理论, 以及本文的主要研究内容。 Z_2 格点规范理论与粒子物理的规范场论, 凝聚态物理的拓扑量子相变, 量子信息的长程纠缠和拓扑量子计算, 图论算法问题等诸多领域具有深刻联系, 从而成为物理学多个热门领域的关注对象。对该理论的量子模拟研究有望推动诸多领域的进展。

第二章概述了一种基于通用量子线路实现的量子 Z_2 格点规范理论的量子模拟方案, 并在 GPU 量子模拟器上利用数字化绝热量子演化算法对其所具有的量子拓扑相变进行了研究。这是目前第一次使用基于线路模型的量子模拟方法系统性地研究了 $D=2+1$ 和 $D=3+1$ 量子 Z_2 格点规范理论, 提取了其拓扑量子相变的所有关键特征并进行了对比分析。蒙特卡罗模拟法是研究格点规范理论最重要的非微扰定量方法, 它的成功却受到符号问题和随机数问题的困扰。然而革命性的计算技术: 通用量子计算解决了这些问题。在量子霸权到来之际, 我们的演示方案有望在一台真实的通用量子计算机上编程实现。

第三章基于数字化绝热量子演化算法对量子 Z_2 格点规范理论的格子拓扑由 Torus 缓慢转变到 Klein 瓶的过程进行了研究。Torus 和 Klein 瓶是两种典型的拓扑曲面结构。它们具有不同的拓扑定向性。研究发现由于格子拓扑的变化引起了一种新颖的拓扑量子相变, 并详细研究了该相变的临界行为以及相图。该部分内容推动了对格点规范理论的这一新型拓扑量子相变的研究并加深了对 Z_2 规范理论和空间拓扑结构关系的理解。

第四章基于 Z_2 拓扑量子相变的闭弦凝聚特性, 通过将图映射为格子提出了一种具有时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ 的量子算法可获取图所对应格子的闭弦凝聚态, 有助于解决该图的哈密顿回路问题 (HCP)。利用该算法模型, 通过对大量小尺寸随机图的模拟我们发现图的哈密顿回路的数量对其所映射格子的 Z_2 拓扑量子相变临界参数 g_c 有显著影响。当 N_e, N_v 固定时, g_c 均值和 $\sqrt{N_{hc}}$ 呈线性关系。当 N_v 固定时, $\frac{1}{g_c}$ 均值和 N_e 呈线性关系。基于此, 我们进一步讨论了量子计算机上利用 g_c 来推断哈密顿回路数目的算法的可能性。

第五章基于微软最新推出的 Q# 量子编程语言开发了一个开源的量子基本线性代数和量子模拟库 QBLAS。随着量子计算软硬件研究的快速推进,以量子线性代数为特征的各种量子算法雨后春笋般诞生,指数级地加速了各种计算任务以及机器学习任务。此外,作为量子计算的杀手级应用,量子模拟在解决蒙特卡洛符号问题,强关联求解问题,非平衡动力学模拟问题等方面有着得天独厚的优势。如此趋势下,有必要系统地开发一个以量子基本线性代数和量子模拟为主的算法库,以迎接量子时代的到来。QBLAS 就是一个这样的量子算法库。

第六章对全文工作做了总结,并对该领域未来的发展做了展望。本文通过对 Z_2 格点规范理论的量子模拟,研究了其拓扑量子相变的特征,在空间拓扑结构变化下的行为,以及和图论 HCP 问题的精彩互动。其结果将推动格点规范理论,拓扑学,图论和量子计算等的进一步融合发展。

关键词: Z_2 格点规范理论; 量子模拟; 拓扑量子相变; 绝热量子算法; 基态简并度; 图论; 量子算法; 哈密顿回路问题; 量子基本线性代数; QBLAS

中图分类号: **O413.4**

Abstract

The chapter 1 describes the research background: Z_2 lattice gauge theory and the main research content of this paper. The Z_2 lattice gauge theory is deeply related to gauge field theory of particle physics, topological quantum phase transition of condensed matter physics, long-range entanglement and topological quantum computation of quantum information, algorithm problem of graph theory, etc. The quantum simulation research of this theory is expected to promote the development of many fields.

In chapter 2, we outline a quantum simulation scheme of quantum Z_2 gauge theory implemented with universal quantum circuit and use digitized adiabatic quantum simulation algorithm to study the Z_2 topological quantum phase transition. This is the first presentation up to our knowledge, to contrastively study the D=2+1 and D=3+1 quantum Z_2 gauge theory and extract all the key features of the topological quantum phase transitions using universal quantum computer approach. Monte Carlo simulation is the most important non-perturbative quantitative method in the study of the gauge theories, successful, however, suffer from the notorious sign problem and random number problem. the revolutionary computing technology: universal quantum computer shed a light on these problems. At the dawn of quantum supremacy, our demonstration can be realized on a real universal quantum computer in the near feature.

In chapter 3, the digitized adiabatic quantum simulation algorithm is used to study the quantum Z_2 lattice gauge theory in the process of slowly changing the lattice topology from torus to klein bottle. Torus and klein bottle are two typical topological surface structures. They have different topological orientations. The novel topological quantum phase transition(TQPT) caused by the change of lattice topology is found. Then the critical behavior and phase diagram of this phase transition are studied in detail. This part promotes the research of the new TQPT in the lattice gauge theory and deepens the understanding of the relationship between Z_2 gauge theory and spatial topological structure.

In chapter 4, using the condensed close string characteristics of Z_2 topological quantum phase transition, by mapping a graph to a lattice we develop a quantum algorithm with time complexity $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2}} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c}))$ to obtain the closed string condensate of its corresponding lattice, which is helpful to solve the Hamilton cycle problem (HCP) of the graph. Using this algorithm model, by the simulation of a number of small random graphs we find that the number of Hamiltonian cycles in a graph has a significant effect on the critical parameter g_c of Z_2 topological quantum phase transition of its corresponding lattice, the average of g_c with $\sqrt{N_{hc}}$ (N_e, N_v is fixed) and the average of $\frac{1}{g_c}$ with N_e (N_v is fixed) are all a linear relationship. Based on this, we further discuss the possibility of a algorithm which uses g_c to infer the number of Hamiltonian cycles in a graph on a quantum computer.

In chapter 5, an open source quantum basic linear algebra and quantum simulation library(QBLAS) is developed based on the newest Q# quantum programming language of Microsoft. With the rapid development of quantum computing software and hardware, various quantum algorithms characterized by quantum linear algebra spring up like mushrooms. These algorithms exponentially accelerate various computational and machine learning tasks. In addition, as the killer application of quantum computing, quantum simulation has unique advantages in solving monte carlo symbol problems, strong correlation problems and non-equilibrium dynamics simulation problems. With this trend, it is necessary to systematically develop an algorithm library focus on quantum basic linear algebra and quantum simulation algorithm for welcoming the arrival of the quantum era. QBLAS is such a quantum algorithm library.

The chapter 6 summarizes the work in this article and discusses the future development of the field. By adiabatic quantum simulation of Z_2 lattice gauge theory , this article studies the characteristics of its topological quantum phase transition , novelty behavior when the changes of spatial topology, as well as wonderful interaction with HCP problem of graph theory. These results will drive the further integration of lattice gauge theory, topology, graph theory and quantum computing.

Key Words: Z_2 lattice gauge theory; quantum simulation; topological quantum phase transition; adiabatic quantum algorithm; ground state degeneracy; graph theory; quantum algorithm; Hamiltonian cycle problem; quantum basic linear algebra; QBLAS

CLC Number: O413.4

第1章 绪论

1.1 Z_2 格点规范理论简介

规范理论最早由电磁场所对应的 U(1) 规范理论发展而来, 后来发展为电弱, 强相互作用统一的理论模型, 而今已成为粒子物理标准模型的理论基础。格点规范理论是在 20 世纪 70 年代由粒子物理领域所引入^[1,2]。其将规范理论置于离散为格点的时空中进行研究。时空的离散化解决了规范理论中积分发散等难题, 同时也带来了多种新特性。而如今格点规范理论也成为了量子自旋液体研究的基础理论^[3], 揭示了量子自旋液体长程纠缠, 拓扑序^[4], 弦网凝聚^[4,5] 等多种新奇特性, 从而受到凝聚态领域的高度重视。此外, 量子计算领域近年来以 Kitaev 模型为基础提出了 Toric code 拓扑纠错码^[6,7], 带动了拓扑量子计算的快速发展^[8]。而该模型实质上可以等价为格点规范模型的一种变体。2019 年 Google 公司在研究该模型中首次实现了量子霸权^[9]。如此以来, 格点规范理论已经成为物理学多个热门领域的关注对象, 对其特性的详细研究势必带动多个重要方向的进展。

Z_2 格点规范理论或简称 Z_2 规范理论, 是 U(1) 格点规范理论的最简单情况, 在凝聚态方向因为其和横场 Ising 模型有着多种对偶关系也被成为 Ising 规范理论^[2,3,10]。此外, 第一种精确可解的拓扑量子相变模型:Kitaev 模型通过幺正变换也可转换为 Z_2 规范理论的一种变体 Toric code 模型^[6,7], 位于 Kagome 格子上的一种海森堡模型 QDM 也可以等价为某种 Z_2 规范理论^[11,12]。

Z_2 规范理论最早由 Wegner 于 1971 年引入并发现了该理论存在着一个无局部对称性破缺的特殊量子相变^[2], 后被称为拓扑量子相变。Wegner 定义 Z_2 规范理论在 D 维 ($D=d+1$, d 为空间维数, 1 为时间维数) 时空中格子上的经典配分函数如下

$$Z_{Z_2} = \sum_{\sigma_{ij}=\pm 1} e^{-H_{Z_2}/T}, \quad H_{Z_2} = -K \sum_{\square} \prod_{ij \in \square} \sigma_{ij} \quad (1.1)$$

配分函数中的自由度为方格子的边(link) $l = ij$ 上的二进制变量 $\sigma_{ij} = \pm 1$, i, j 为格子中的临近格点。其中 \square 表示方格子中的基本小方块 (plaquette), 如图1-1所示。

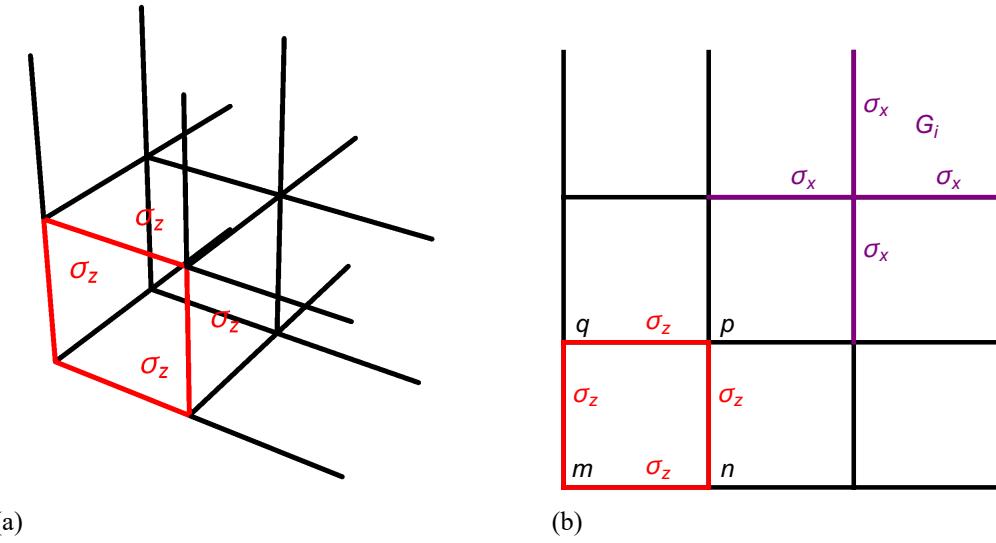


图 1-1: (a) $d=3$ 和 (b) $d=2$ Torus 格子 (循环边界条件), 各自带一个标出的 plaquette。

与其对应的量子模型版本上, 自由度为 link l 上的量子比特。泡利算符 $\sigma_l^\alpha (\alpha = x, y, z)$ 作用于这些量子比特。Wegner 经典模型中的 σ_{ij} 变量对应于 link 上的 σ_l^z 算符。如果设置 $\sigma_{ij} = +1$ 为 D 维 Wegner 经典模型时间 link 上的规范选择, 那么该经典模型对应定义于 d 维空间格子上的量子模型, 其哈密顿为^[3]

$$H = -K \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z - g \sum_l \sigma_l^x \quad (1.2)$$

当 $d=2$ 时, 该模型对偶于横场 Ising 模型, 当 $d=3$ 时, 该模型是自对偶的^[10]。

除 Wegner 的理论外, Z_2 规范理论也可以从电磁 U(1) 格点规范理论自然导出而作为 U(1) 格点规范理论的最简版本^[13,14]。

在电磁理论里面, 磁矢势或叫规范势 \vec{A} 是一个矢量场。由电磁理论可知, 电场 $\vec{E} = -\dot{\vec{A}}$, 磁场 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, 通过回路 C 的磁通 $\Phi_C = \int_C \vec{A} d\vec{r}$ 。空间离散为格点后, 如图1-1(b) 以方格子为例, 格点规范分量 A_{mn} 处于格子中格点 m 到格点 n 的边 (link) 上, 对应的电场 $E_{mn} = -\dot{A}_{mn}$, 回路 $mnpq$ 的磁通 $\Phi_{mnpq} = A_{mn} + A_{np} + A_{pq} + A_{qm}$ 。

格点 m 上的电通量或叫电荷 $Q_+ = \sum_{mx \in +} (E_{mx})$, 其中 $+$ 为格子中四条 link 组成的以格点 m 为交叉点的十字架。

在紧致 U(1) 规范理论里面, 规范势需要满足 $0 \leq A \leq 2\pi$, 因此任何物理量, 比如势能 U 必须是 A 的周期性函数 $U(A) = U(A + 2\pi)$, 如此导致了电荷的量子化。定义电磁场的能量 $H = T + U$, 其中 T 为动能, U 为势能。拉格朗日量

紧致 U(1) 格点规范理论	Z_2 规范理论
$E = 0, \pm 1, \pm 2$	$(-1)^E \cong \sigma^x = \pm 1$
$0 \leq A \leq 2\pi$	$e^{\pm iA} \cong \sigma^z = \pm 1$
$\Phi_{\square} = \sum_{\square} A$	$e^{i\Phi} \cong \phi = \prod_{l \in \square} \sigma_l^z = \pm 1$
$Q_+ = \sum_+ E$	$(-1)^Q \cong \rho = \prod_{l \in +} \sigma_l^x = \pm 1$
$e^{\pm iA} E e^{\mp iA} = E \pm 1$	$\sigma^z \sigma^x \sigma^z = -\sigma^x$

表 1-1: 紧致 U(1) 格点规范理论和 Z_2 规范理论的对应关系。 \cong 表示对应于

$L = T - U$, 动量 $p = \frac{\partial L}{\partial A}$ 。量子化该理论可构造对易关系

$$[A, p] = i\hbar \quad (1.3)$$

$p = \frac{\partial L}{\partial A} = -E$, 取自然单位 $\hbar = 1$ 则 $[A, E] = -i$ 。量子态波函数 $\psi(A)$ 可由 A 定义出。 E 作用到该波函数上给出: $E\psi(A) = i\frac{d}{dA}\psi(A)$, 由周期性条件 $\psi(A) = \psi(A + 2\pi)$ 可得:

$$\begin{aligned} E\psi_m(A) &= m\psi_m(A), \\ \psi_m(A) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-imA}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ e^{-iA}\psi_m(A) &= \psi_{m+1}(A), e^{iA}\psi_m(A) = \psi_{m-1}(A) \\ e^{iA}Ee^{-iA} &= E + 1, e^{-iA}Ee^{iA} = E - 1 \end{aligned} \quad (1.4)$$

如此电磁场是量子化的了, $E = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 。 e^{-iA} , e^{iA} 为 E 的升降算符

这样就构造出了紧致 U(1) 格点规范理论。如果将整数的电通量 Q_+ 进一步二值化为 ± 1 , 这样该理论就退化为了 Z_2 格点规范理论。二者的对应关系如表 1-1 所示。表 1-2 列出了电磁理论, 紧致 U(1) 格点规范理论以及 Z_2 格点规范理论中势能和动能的对应关系。与 Wegner 的模型一致可构造出 Z_2 格点规范理论的哈密顿如下:

$$H = U + T = -K \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z - g \sum_l \sigma_l^x \quad (1.5)$$

该哈密顿可以定义在任意格子和任意空间维数 d 上。本文中我们将重点关注 $d=2$ 和 $d=3$ 的情况。

Z_2 规范理论中的规范算符可定义为

$$G_i = \prod_{l \in +} \sigma_l^x \quad (1.6)$$

电磁理论	紧致 U(1) 格点规范理论	Z_2 规范理论
$T = \int \frac{\epsilon_0 E^2}{2} d^3 r = \int \frac{\epsilon_0 \vec{A}^2}{2} d^3 r$	$T = g \sum_l E_l^2$	$T = -g \sum_l \sigma_l^x$
$U = \int \frac{B^2}{2\mu_0} d^3 r = \int \frac{(\nabla \times A)^2}{2\mu_0} d^3 r$	$U = -K \sum_{\square} \cos(\Phi_{\square})$	$U = -K \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z$

表 1-2: 电磁理论, 紧致 U(1) 格点规范理论, Z_2 规范理论哈密顿动能和势能项的对比, ϵ_0 是真空介电常数, μ_0 是真空磁导率, l 为格子上的边 (link)。

G_i 位于格点 i 上, + 为格子中以格点 i 为中心的十字架如图1-1(b) 所示, 很明显其为厄米幺正算符遵循 $G_i^2 = 1$ 。 G_i 对 link 的作用, $G_i \sigma_l^z G_i = \rho_i \sigma_l^z$, 只有当 i 是 l 端点时, $\rho_i = -1$, 否则 $\rho_i = +1$, 如此 G_i 在格点 i 处产生一个位置依赖的 Z_2 规范变换。 G_i 对 plaquette 的作用, $G_i \prod_{l \in \square} \sigma_l^z G_i = \prod_{l \in \square} \sigma_l^z$, \square 为任意 plaquette, 可见 G_i 不改变 plaquette 的磁通, 因此 $[G_i, H] = 0$, 保证了系统的规范对称性。当对系统波函数取 $G_i |\psi\rangle = |\psi\rangle$, 即 $G_i = +1$ 时对应不带物质场的纯 Z_2 规范理论^[3]。

Wegner 最早发现该理论中存在这一个随着 g/K 增加而出现的一个反常的无对称性破缺的量子相变, 该相变中无法寻找一个局域的序参量来定义相变, 但可以用 Wilson loop(也叫 Wegner-Wilson loop) 算符 W_C 的行为来描述该相变^[2,3]。近些年来, 人们发现 W_C 并不是描述该相变的最好序参量, 尤其在添加物质场之后更不实用, 进而提出了拓扑序可以更好描述, 从而将该相变定性为拓扑量子相变^[3]。之前的研究已经表明, 随着空间维数 d 的不同, 该相变展现出不同的相变阶数^[15]。根据各自基态特征相变前后的两个相分别被定义为退禁闭相和禁闭相。由于对 $d=3$ 的研究尚很缺乏, 下面部分将结合 $d=2$ 的情况分别描述了该相变的这四个特征。

1) Wilson loop 算符 W_C 的行为。

Wilson loop 算符 W_C 定义在格子中一个闭合的回路 C 上如图1-2所示。

$$W_C = \prod_{l \in C} \sigma_l^z \quad (1.7)$$

当 $g \gg K$ 时为禁闭相。在这个相里面, W_C 遵从面积法则: $\langle W_C \rangle \sim e^{-\alpha A_C}$, A_C 是闭合回路 C 所围的面积, α 为某常数。该法则是 W_C 随小 K 展开的自然结果。 W_C 的快速衰减是 plaquette 上 Z_2 磁通 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z$ 大规模涨落的结果。

当 $g \ll K$ 时为退禁闭相。在这个相里面, W_C 遵从周长法则: $\langle W_C \rangle \sim e^{-\alpha' P_C}$, P_C 是闭合回路 C 的周长, α' 为某常数。退禁闭相, 格子中 Z_2 磁通全部被排除, 所有 plaquette 的 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = +1$ 。 Z_2 磁通排除和超导里面的迈斯纳效应是类似的。小的残余磁通涨落导致了该周长法则。

2) 无局域对称性破缺。

在这之前, 朗道对称破缺理论是凝聚态相变研究的重要指导理论。时间空间

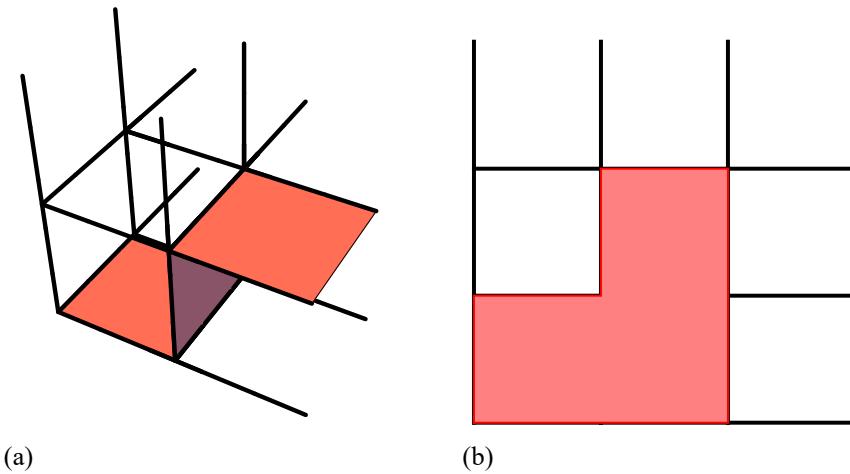


图 1-2: (a) 在 $d=3$ 格子上的一个 Wilson loop 回路和其所包围的区域。(b) 在 $d=2$ 格子上的一个 Wilson loop 回路和其所包围的区域。

电荷序的不同破缺对应着不同的相变类型。比如铁磁相变对应时间对称性破缺，铁电相变对应电荷对称性破缺，铁弹相变对应空间对称性破缺^[16]。然而 Z_2 规范理论退禁闭相到禁闭相的量子相变没有局域对称性破缺，这是非常不同寻常的。相变前后格子中任意 link l 上的量子比特始终保持 $\langle \sigma_l^z \rangle = 0$ 和 Ising 模型的铁磁相变展现出完全不同的特征。

3) 拓扑序^[3]

Wilson loop 算符对纯 Z_2 规范理论的相变可以给出很好的描述，但一旦模型增加物质场后，该描述将失效^[3]。对该相变之所以存在，最近一些观点的理解是退禁闭相存在着 Z_2 拓扑序，然而禁闭相是平凡的^[3]。该拓扑序反映到两个特征上：

第一个拓扑特征是退禁闭拓扑相基态存在着不能用任何局域算符湮灭的低能激发如图1-3(b)。该激发是一对粒子，称之为 vison，每个携带一个 Z_2 磁通 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = -1$ 。

第二个拓扑特征是 $g=0$ 时，退禁闭相基态存在着依赖于格子拓扑的多个简并基态，其简并度将于下文“退禁闭相基态的拓扑简并度”部分分析。而且，这些简并态将随着 g 增加产生一个正比于 $g(g/K)^L$ 的微小能隙劈裂而不再简并，其中 L 是格子的线性尺寸大小^[3]。拓扑简并态的存在和其随 g 增加的能隙劈裂是 Z_2 拓扑序的定义性特征^[3]。

4) 相变阶数

由于 $D=d+1$ 维时空的经典 Z_2 规范模型对应于 d 维空间的量子 Z_2 规范模型。因此量子 Z_2 规范理论的相变阶数可以由之前经典 Z_2 规范理论的研究来进行对照参考^[2]。经典中 $D=3$ 是二阶相变，然而 $D=4$ 是一阶相变^[15,17]。这就意味着量子版本中 $d=2$ 是二阶量子相变， $d=3$ 是一阶量子相变。通常情况下量子相变都是二

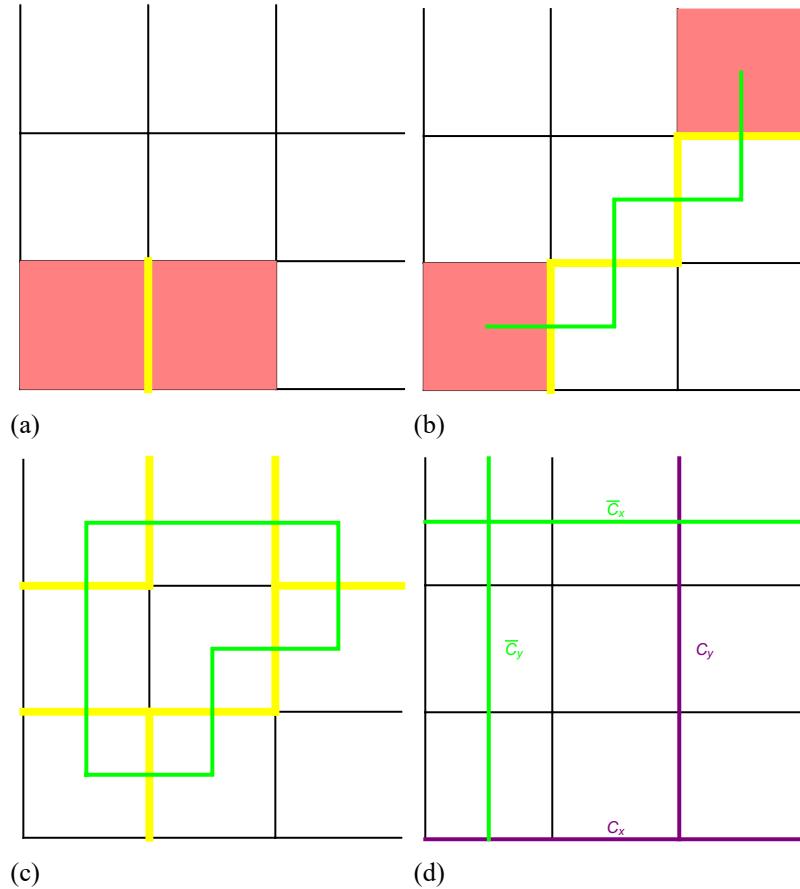


图 1-3: 黑色的 link 表示 $\sigma_z = +1$, 黄色的 link 表示翻转后 $\sigma_z = -1$, 粉色的 \square 表示激发磁通(也叫 vison) $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = -1$ 。(a) $d=2$ 格子, 其中一个 link 上的量子比特翻转激发 2 个 plaquette 的磁通。(b) $d=2$ 格子带有通过一根弦算符制备的 2 个分离的 vison。(c) $d=2$ 格子带有一根闭弦的退简并基态配置, 2 个已经分离的 vison 淹灭。(d) $d=2$ Torus 格子, 定义 V_x, V_y 的回路 \bar{C}_x, \bar{C}_y , 以及定义 W_x, W_y 的回路 C_x, C_y 。

阶的,一阶量子相变具有很多新奇的性质,其存在性引起了广泛的讨论^[18]。而且,一阶量子相变在量子算法中也有特殊的加速用途^[19]。鉴于量子相变的特殊性以及一阶量子相变的重要性,通过量子模拟验证该理论相变阶数显然是非常有必要的,这是本文第一部分的一个研究内容,其中从多个方面对量子 Z_2 规范理论的相变类型进行了分析验证。

退禁闭相和禁闭相的电荷禁闭分析。

当 $g \gg K$ 时为禁闭相。在该相,哈密顿中电荷项 $-g \sum_l \sigma_l^x$ 起主导作用。该相基态为所有 link 上的量子比特 $\sigma^x = +1$ 。格子中任何格点位置都满足 $\prod_{l \in +} \sigma_l^x = +1$,因此都没有 Z_2 电荷。在小的 K 扰动下用 σ^z 翻转某 link 上的 σ_x 将在 link 两端产生两个 Z_2 电荷 $\prod_{l \in +} \sigma_l^x = -1$ 。继续用 σ_z 翻转临接的 link 上的 σ_x ,其中一个电荷将随着翻转的 link 而移动,从而形成一根穿过这些 $\sigma^x = -1$ 的 link 以连接两电荷的电弦。由哈密顿可知,该电弦将增加与 g 以及电弦长度成正比的能量从而抑制了电弦的伸长,也就抑制了电荷的产生和移动,如同电荷被禁

闭了,这就是禁闭相名字的来源。

当 $g \ll K$ 时为退禁闭相。在该相,哈密顿中磁通项 $-K \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z$ 起主要作用。该相基态为所有 plaquette 的 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = +1$ 。格子中任何 plaquette 都不携带 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = -1$ 的 Z_2 磁通。此时由于 g 极小,禁闭相中所提到的由翻转产生的 Z_2 电弦将几乎不会附加能量,因此系统将不抑制电荷的产生和移动。好像电荷退出了禁闭,因此该相叫做退禁闭相。

因为退禁闭相拥有 Z_2 拓扑序,然而禁闭相是平凡的。所以退禁闭相基态特性的研究就显得非常必要。下面将从弦网凝聚理论^[4,5] 和拓扑简并度^[20] 两个方面介绍退禁闭相的基态特性。

1) 退禁闭相基态的闭弦凝聚理论

当 $g \ll K$ 时为退禁闭相。如上分析电荷退出禁闭。但以一个最简单的基态成分:所有 link 上的量子比特 $\sigma^z = +1$ 为例,在小的 g 扰动下用 σ^x 翻转某 link 上的 σ_z 将在 link 两侧 plaquette 产生两个 Z_2 磁通 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = -1$ 。继续用 σ_x 翻转临近的 link 上的 σ_z 。其中一个 Z_2 磁通将随着翻转的 link 而移动,从而形成一根垂着穿过这些 $\sigma^z = -1$ 的 link 以连接两磁通的弦,可以对应称之为磁弦,如图1-3(a-b)。如果磁弦闭合,两个磁通将湮灭,但磁弦仍存在如图1-3(c) 所示。与电弦不同的是这些闭合的磁弦并未增加新的能量,因而系统不阻止这些磁弦的产生。因此真实的系统基态将是这个最简单基态成分和各种可能的闭合磁弦态的等权叠加。这就是一个闭弦凝聚态^[4,5]。可以看出该闭弦和图论中的哈密顿回路^[21,22] 有着极其相似的特性,这一点启发了本文第四章采用 Z_2 规范理论解决哈密顿回路的研究。由于本文中主要讨论退禁闭相,故文中如无说明所指的弦都是磁弦。

2) 退禁闭相基态的拓扑简并度

退禁闭相的基态要求排除 Z_2 磁通,所有 plaquette 的 $\prod_{l \in \square} \sigma_l^z = +1$ 。然而每个 link 上量子比特状态根据此要求仍是不确定的。上面闭弦凝聚理论虽然给出了基态是闭弦配置的等权叠加态,但等权叠加的每个组分振幅的相位仍是不确定的,因此这里面还有多余的自由度。现在已经研究清楚,可定向曲面里该自由度由格子所在曲面的拓扑亏格(柄的数目) s 来扮演。亏格为 s 的二维曲面退禁闭相的基态简并度(GSD)为

$$GSD = 2^{2s} = 4^s \quad (1.8)$$

比如 Torus 曲面(二维循环边界条件的格子)的亏格为 1,其基态简并度为 4。该简并度可以根据如下方法推出。

一个顶点数 V ,边(link)数 E ,plaquette 数 F 的二维格子,根据欧拉多面体定理其亏格 s 和欧拉示性数 χ 满足如下关系

$$2 - 2s = \chi = V - E + F \quad (1.9)$$

格子中有 $V - 1$ 个独立的格点可以激发 Z_2 电荷, 有 $F - 1$ 个独立的 plaquette 可以激发 Z_2 磁通。剩下的自由度为

$$E - (V - 1) - (F - 1) = 2 - \chi = 2s$$

故简基态并度为 $GSD = 2^{2s}$, 该 2^{2s} 自由度实质是曲面拓扑不可收缩回路(如图1-4)里的磁通自由度, 不可收缩回路里面的磁通是全局磁通, 基态虽然要求所有 plaquette 的磁通被排除, 但全局磁通并没有要求。亏格为 s 的曲面, 不可收缩回路数为 $2s$, 因此有 2^{2s} 的多余自由度。Torus 曲面的不可收缩回路为 2, 因此其基态简并度为 4。由此可见退禁闭相和格子所在曲面的拓扑性质紧紧联系了起来, 这是其退禁闭相基态简并度的来源^[23]。

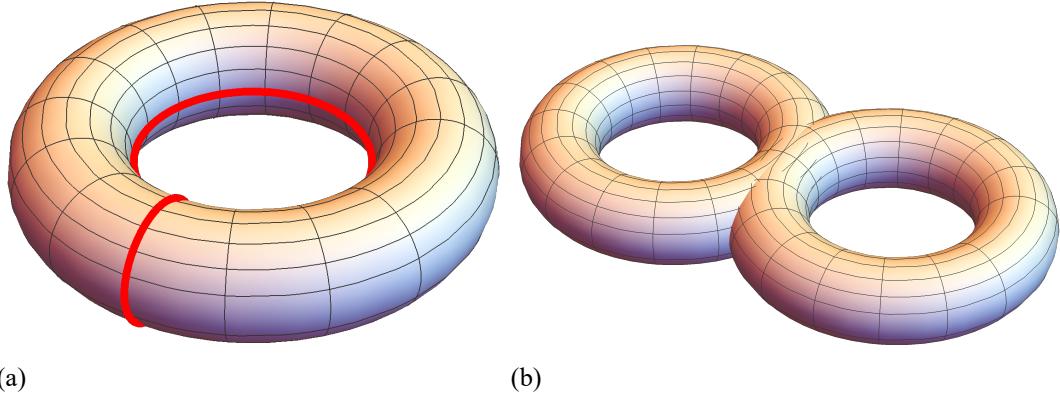


图 1-4: (a) Torus 曲面亏格为 1, 拥有红圈标出的两个不可缩回路。(b) 亏格为 2 的可定向曲面。

围绕第 n 个不可收缩回路 C_n 的 Wilson loop 算符 W_{C_n} 可以衡量该回路所对应全局磁通的状态。所有全局磁通也均被排除的基态 $|w_0\rangle$ 。

$$|w_0\rangle = \sum_i (1 + G_i) |\uparrow\rangle \quad (1.10)$$

其中 $|\uparrow\rangle$ 表示所有 link 处于 $\sigma_z = +1$ 的 $|0\rangle$ 态^[3]。从基态 $|w_0\rangle$ 出发激发第 n 个全局磁通 W_{C_n} 的算符可定义为 $V_{\bar{C}_{n'}} = \prod_{l \in \bar{C}_{n'}} \sigma_l^x$, 也叫't Hooft loop 算符, $\bar{C}_{n'}$ 是和 C_n 只交叉奇数次的闭合弦如图1-3(d) 中 \bar{C}_y 和 C_x 的关系。可知有如下反对易关系

$$\{V_{\bar{C}_{n'}}, W_{C_n}\} = 0 \quad (1.11)$$

如此通过 $V_{\bar{C}_{n'}}$ 对全局磁通的翻转, 就可以激发各个不可收缩回路里的全局磁通, 从而制备 $g = 0$ 时所有简并的基态共 2^{2s} 个。 $g = 0$ 时, W_{C_n} 和 H 对易, 这些简并基态是 W_{C_n} 和 H 的共同本征态, 然而 $g \neq 0$ 时, W_{C_n} 和 H 不再对易。

以上是从 W_{C_n} 角度考虑, 同样从 $V_{\bar{C}_{n'}}$ 角度考虑也有对应数量的简并基态, 与其关联的则是不可缩回路里的全局电通或叫全局电荷。所有全局电荷均被排除的基态就是振幅相位全为 +1 的所有闭弦配置的等权叠加态 $|\psi_0\rangle$ 。

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle, S_0 = \frac{2^E}{2^{F-1}} \quad (1.12)$$

其中 $|\phi_i\rangle$ 为第 i 个闭弦配置成分态。反过来, 从基态 $|\psi_0\rangle$ 出发激发第 n' 个全局电荷 $V_{\bar{C}_{n'}}$ 的算符则为 W_{C_n} 。如此通过 W_{C_n} 对全局电荷的翻转, 就可以激发各个不可缩回路里的全局电荷, 从而制备所有简并的基态共 2^{2s} 个。由于 $V_{\bar{C}_{n'}}$ 和哈密顿 H 始终对易, 这些简并基态是 $V_{\bar{C}_{n'}}$ 和 H 的共同本征态。

$$[H, V_{\bar{C}_{n'}}] = 0 \quad (1.13)$$

事实上 $|\psi_0\rangle$ 和 $|w_0\rangle$ 有如下关系^[3]

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n=1}^{N_C} (1 + V_{\bar{C}_{n'}}) |w_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle \quad (1.14)$$

N_C 是不可缩回路的数目, 由于 $|\psi_0\rangle$ 包含了全部的 S_0 个闭弦配置 $|\phi_i\rangle$, 那么 $|w_0\rangle$ 就只包含了部分的闭弦配置 ($2^{S_0}/2^{N_C}$ 个), 这部分的闭弦配置都可以通过规范算符 G_i 作用变换为 $|\uparrow\rangle$ 。 $V_{\bar{C}_{n'}} |w_0\rangle$ 效果是将 $|w_0\rangle$ 中的闭弦配置全部变为不可通过 G_i 算符作用缩为 $|\uparrow\rangle$ 的配置, 而只能缩为对应第 n' 个不可缩的回路的闭弦。如此以来组成 $|\psi_0\rangle$ 的 N_ϕ 个闭弦可以分为 2^{N_C} 组, 每组 $2^{S_0}/2^{N_C}$ 个等权叠加构成全局磁通 W_{C_n} 的一个本征态, 所有这些本征态等权叠加构成了 $|\psi_0\rangle$ 。

1.2 论文的主要研究内容

本文第二章到第四章从三个方面对 Z_2 规范理论的量子模拟及其应用进行了研究。第五章介绍了我们开发的量子基本线性代数和模拟库 QBLAS。

第二章讨论了一种基于量子计算线路模型的绝热量子模拟方案,该方案实现了对 $D=2+1$ 和 $D=3+1$ Z_2 规范理论的量子模拟并在 GPU 量子模拟器上对其进行了模拟演示,揭示了该理论所拥有的主要特性。

量子计算是目前速度最快的计算方法,最早由费曼、多伊奇等人提出。随着量子科学技术的迅速发展,量子计算在世界范围内得到了广泛的研究。一个可控制的量子系统,甚至可以是可编程的,来模拟另一个难以控制的量子系统,可以方便地研究该系统不同参数下的物理性质。近年来,量子模拟的算法越来越成熟。Trotter 分解^[24–26]、稀疏哈密顿的量子步方法^[27]、稠密哈密顿的密度矩阵指数方法^[28–30]、绝热演化方法^[31–33]等为基于格点自旋模型的量子系统的模拟奠定了基础,比如研究规范理论的主要非微扰近似方法格点规范理论^[14,34–37]。如此趋势下,相关量子软件的开发也逐步提上日程^[38]。

虽然蒙特卡罗 (MC) 模拟在格点规范理论研究方面取得了很大的成就^[10,39–41]。然而,在有费米子的情况下,由于 Grassmann 数的存在,配分函数符号可能出现激烈的变化和剧烈的振荡导致积分失效,从而使 MC 中的“重要性抽样”不再有效”,这就是众所周知的“符号问题”^[42–44],该问题在经典计算机上是 NP Hard 问题^[45]。费米子符号问题存在于大多数基于 MC 的方法比如量子 MC (QMC),除了一些特殊的问题可以采用特殊的指定算法来规避^[44,46,47]。此外,基于经典计算机的 MC 或者 QMC 模拟还面临着真假随机数问题的困扰以及因为使用欧几里得时空导致的缺乏实时动力学演化的问题。随后兴起的针对量子相变的张量网络技术^[48]虽然缓解了部分 QMC 的问题但没有从根本上解决,同时带来了复杂的重整化,模型相关的特殊操作和纠缠相关的模拟精度问题,而且对不同模型和格子的普遍适用性也未解决。令人兴奋的是量子模拟可以避免所有这些问题^[49],从而成为研究 Z_2 规范理论的量子相变 (QPT) 和量子力学的理想途径。

量子模拟已经形成模拟量子模拟和数字化量子模拟这两种主要方式。模拟量子模拟基于可控模拟系统与待模拟系统之间直接的哈密顿物理映射,在冷原子,离子阱,光学等平台上实施,具有模拟规模大等优点但需要专用量子模拟平台,成本高昂也缺乏可编程的灵活性和通用性。如今在这些平台上针对 $U(N)$ 和 $SU(N)$ 格点规范理论已经进行了很多理论探索^[34,50–56]和近期 $d=1$ 情况的一些实验探索^[57,58]。数字化量子模拟是基于将有限时间演化分解到多个 Trotter 步,每一步采用简单的单双比特量子门以数字化的方式来实现,具有可编程,灵活,通用等优点但需要在通用量子计算机上才容易实施,最近一些针对格点规范理论的基

数字化方法或数字化线路的量子模拟方案也已经提出^[14,36,37],近期部分实验也采用数字化方法在少数量子比特的通用量子计算平台上针对 d=1 情况做了简单的实验验证^[59,60]。

近年来随着高性能计算的算力大幅度增加,采用经典高性能计算来模拟数字化量子模拟的方式也成为可能,该方式采用基于高性能计算的量子模拟器直接模拟量子线路以得到结果^[61],比如一个针对双位点 *Schwinger* 模型的量子模拟工作^[62],以及尝试建立量子霸权边界的随机量子线路模拟工作^[63]。该方式除了具有数字量子模拟优点外也具有可实施性强,精度高,可直接读写模拟态矢等优点,但要面对随着量子比特数增加带来的巨大的计算能力需求。

最简单的格点规范理论是 Z_2 规范理论^[2,3,10,17],它是由 $U(1)$ 规范理论演化出的 Z_n 格点规范理论的最简单版本。 Z_2 规范场也可以嵌入或涌现出许多其他模型比如 Z_2 希格斯模型, Z_2 自旋液体, Z_2 嵌入的 Hubbard 模型, Z_2 相关的常规金属到正交金属转变^[47] 等等,这些和拓扑相变,高温超导,分数量子数等有着密切关系^[41,64]。 Z_2 toric code 模型可以视为量子 Z_2 规范理论的变体,在拓扑量子计算中扮演着重要作用^[6,8,65]。量子 Z_2 规范理论被理论性地研究过^[66], Z_2 toric code 模型的一些特性被实验性地演示过^[67,68]。然而通过量子模拟方法系统性地研究量子 Z_2 规范理论的特性的工作还是缺乏的。这正是本文研究的一个动机。

在经典的 Z_2 规范理论中,存在一个不自发破坏任何局域对称性的相变^[2,10],称之为拓扑相变^[3]。MC 研究透露了该相变在 4 维空间中是一阶,在三维空间中是二阶^[15,17],这表明对应量子版本的量子 Z_2 规范理论的 QPT 在 (3+1) 维是一阶,(2+1) 维是二阶。这是因为经典 D 维统计力学模型对应于 (d+1) 维量子模型,d=D-1 指的是空间维度,1 是时间维度。值得注意的是一阶 QPT 是一个有趣的问题^[18],在耗散量子系统^[69] 和拓扑绝缘体^[70] 中实验观察到了它。此外,它还与量子绝热算法^[19] 有关。

基于通用线路模型,本文设计了一种针对量子 Z_2 规范理论的绝热量子模拟方案,该方案中 D=3+1 维中至少需要 25 个量子比特,包括 d=3 $2 \times 2 \times 2$ 晶格上的每个 link 上的量子比特,以及量子算法中需要的一个辅助量子比特(称为 ancilla)。如果要进行基于量子相估计的能量测量等算法则需要更多的量子比特。而且实现绝热量子算法需要成千上万的 Trotter 分解步。目前的量子实验平台在量子比特数、错误率和相干时间等方面还难以满足要求。因此,在经典的高性能计算平台上进行量子仿真模拟具有重要的意义。也可以称之为赝 (pseudo) 量子模拟^[71]。它将在量子硬件完善前支撑和促进了量子软件的发展^[38],同时通过本文将看到它也是一种新的数值模拟方法,在计算能力足够下时可以解决目前很多困难的模拟任务。

这种赝量子模拟的计算复杂度随着比特数指数增加,因此其对计算能力的需

求非常巨大。当前,基于图形处理单元(GPU)的并行计算架构提供了出色的高性能计算能力,大大加速了各种大规模的科学运算。而 QuEST(量子精确仿真工具包)就是一种基于 GPU 的高效模拟量子线路的新型软件平台^[61],其采用 Nvidia 开发的 CUDA 编程架构,允许软件开发人员使用 CUDA 支持的 GPU 进行并行量子模拟,可成百上千倍地加速这种质量子模拟的运算速度。另外,作为一个 C 库设计的 QuEST 除 GPU 外也允许量子代码部署在其他计算平台上比如 MPI 集群。QuEST 可以在单张 Nvidia K40m GPU 上模拟 29 个量子比特,且具有很高的精度。该软件平台满足了我们对量子 Z_2 规范理论的量子模拟的需要。

第二章将利用所设计的这种简单的针对量子 Z_2 格点规范理论的量子模拟方案来揭示该理论所具有丰富的性质,包括拓扑相变和一阶量子相变现象^[2,3,10,17]。在 Nvidia K40m 和 NVIDIA V100 GPU 服务器上,我们通过采用 QuEST 量子模拟器,对基于量子线路实现的量子绝热算法进行模拟,可系统地研究该理论 D=3+1 和 D=2+1 维的情况,也可证明了量子模拟的优点,以及基于 GPU 的经典仿真的优点。

第三章在第二章基础上通过诱导格子所在空间的拓扑结构从 Torus 到 Klein 瓶的转变,发现了 Z_2 规范理论的一种新的一阶拓扑量子相变现象。

格点规范理论是对已离散为格点的时空中的规范理论的研究。 Z_2 规范理论除了是最简单的格点规范理论,也是一种量子自旋模型^[3,10],在弦网凝聚理论中可以重新表述为闭弦理论^[4,5]。对于 Z_2 格点规范理论,当参数 g 改变时,有两个不同的相被一拓扑量子相变分开。这两相分别为退禁闭相和禁闭相。不同的格子拓扑结构的退禁闭相基态有着不同的拓扑基态简并度(GSD),因此其对应着不同的拓扑相^[20,23]。如此以来,通过诱导格子拓扑结构的改变,有望实现这些相的转化,从而观察到一种新型的一阶拓扑量子相变。

Torus 和 Klein 瓶是两种典型的拓扑曲面结构。它们具有不同的拓扑定向性^[72]。Torus 是可定向曲面,Klein 瓶是不可定向曲面。此外, Z_2 规范理论退禁闭相的 GSD 在 Torus 格子中是 4,而在 Klein 格子中是 2^[3,23]。通过边界条件设定可以使二维格子分别等价于上述两种拓扑结构^[73],从而为研究该问题提供了途径。

先前的一些研究以及本文第二章的工作已经显示量子模拟已成为研究 Z_2 规范理论拓扑量子相变的一种新的强有力的研究工具^[24,36,66,71]。第三章将继续采用基于量子线路模型^[71] 的数字化量子绝热模拟方法^[33,74,75],在 D=2+1 维量子 Z_2 格点规范系统中,通过逐步改变二维格子的拓扑结构从而观察系统基态的变化。

第四章,鉴于格子所在空间的拓扑结构变化实际上等效于格子所对应的图的结构变化,我们可反过来讨论图结构变化对其所对应格子的 Z_2 拓扑量子相变的影响,并基于此提出一种有助于解决图论中 HCP 问题的量子算法模型,并进一步探讨了利用相变临界参数 g_c 来推断图哈密顿回路数目的算法可能性。

在图论研究领域, 哈密顿回路问题 (HCP) 是确定一个给定的无向图中是否存在哈密顿回路 (一个无向图中只访问每个顶点一次的回路) 的问题^[21]。一个无向图是由 N_v 条无向边连接的 N_v 个顶点组成。HCP 是一个著名的 NP 问题, 也是一个 NP 完全问题, 这意味着所有其他 NP 问题都可以在多项式时间内约化为 HCP^[76]。到目前为止, 在经典计算机中解决这个问题的最佳算法是时间复杂度为 $O(N_v^2 2^{N_v})$ 的动态规划算法 (Bellman, Held 和 Karp)^[77] 和时间复杂度 $O(1.657^{N_v})$ 的蒙特卡罗算法^[78]。随着量子计算机的发展, 量子算法的优势逐渐显现。比如 Shor 算法是针对整数因子分解问题的多项式时间算法^[79], 该问题在经典计算机中仍然是 NP 问题。Shor 算法极大地带动了理论计算机科学的进展。但是对于 HCP 仍然没有多项式时间复杂度的量子加速算法^[80]。因此, 量子计算机中的 HCP 问题仍然是一个具有挑战性的问题。然而, 我们发现 Z_2 规范理论和弦网凝聚理论为这一问题提供了新的可能性。

Z_2 规范理论是最简单的格点规范理论, 在弦网凝聚理论中可以重新表述为闭弦理论^[4,5]。如前所述, 在 Z_2 格点规范理论的退禁闭相中, 格点系统的基态是闭合弦的凝聚态^[4]。在此闭弦凝聚态下, 格子中量子比特的所有构型都是闭弦构型, 而通过格子所有区域的闭弦可以称作整个格子的哈密顿回路。因此, 可以通过 g 的绝热变化引起的拓扑量子相变来制备闭合弦的凝聚态, 然后在这种态, 有可能发展出较好的量子搜索算法来更容易地找到哈密顿回路。

由于任何无向无权图都可以映射到其所对应的格子, 该算法模型可以推广到普遍的图上。此外, 图中哈密顿回路数量可能对格点临界相变参数 g_c 产生影响, 从而可为利用 g_c 来推断哈密顿回路数目的算法提供可能性。此外, 由于图论在计算机科学和数学中的重要地位, 如以深度神经网络为代表的深度学习正与图模型集成在一起^[81,82]。而神经网络的理论基础玻尔兹曼机与 $d=2 Z_2$ 规范理论所对偶的横场 Ising 模型 (TIM) 具有深刻渊源^[83]。因而, 图论问题的该量子模型也将有利于量子深度学习的发展^[83–85]。

上述方案的关键是利用绝热量子模拟在量子计算机上诱导 Z_2 格点系统的拓扑量子相变。第二, 三章已经显示量子模拟可成功实现 Z_2 规范理论的该拓扑量子相变。因此, 第四章将继续采用该基于量子线路模型^[71] 的数字化绝热量子模拟方法^[33,74,75], 逐步改变 g , 以得到所要的闭合弦凝聚态。

第五章基于微软最新的 Q# 量子编程语言开发了一个以量子基本线性代数和量子模拟为主的开源量子算法库 QBLAS。

QBLAS(quantum basic linear algebra and quantum simulation library) 是基于微软 Q# 开发的一个量子基本线性代数和量子模拟库。Q# 是 2018 年以来微软推出的一种聚焦于量子编程的高级编程语言, 通过将高级编程语言所写的量子程序编译为面向指定平台的量子汇编代码, 同时支持基于高性能计算的量子模拟器 (比

如微软量子云, QuEST 等) 和未来的真实量子计算机平台(如 IBMQ)。Q# 语言的详细情况可参考其开发文档 (<https://docs.microsoft.com/en-us/quantum/language>)。

随着量子计算软硬件技术的快速进展,一个可编程的通用量子计算机已经呼之欲出。如此趋势下,量子软件的开发就势在必行^[38]。近年来量子算法方面以量子机器学习为目的的各种量子线性代数算法风起云涌,借助构建量子版本的向量和矩阵运算指数级加速了各种线性代数计算任务,从而指数级地加速了多种机器学习任务,形成了量子机器学习算法的研究热潮^[84],提出了如以量子向量内积加速为基础的量子 K-means 无监督分类算法^[86],以矩阵求逆 HHL 算法为基础的量子支持向量机监督分类算法^[87],以密度矩阵量子模拟为基础的量子主成分分析^[28],以及面向深度学习的量子玻尔兹曼机和量子深度学习^[83,85]等量子加速算法。然而,以上各种量子线性代数算法均严重依赖对相关矩阵的高效量子模拟。此外,作为量子计算的杀手级应用,量子模拟在解决蒙特卡洛符号问题,强关联求解问题,非平衡动力学模拟问题等方面有着得天独厚的优势^[49],将逐渐将成为物理系统模拟的研究主流(如本文研究的 Z_2 格点规范理论的量子模拟)。可喜的是,近年来量子模拟的相关算法也是越来越成熟。Trotter 分解^[24,25]、稀疏哈密顿的量子步模拟方法^[27]、稠密哈密顿的密度矩阵指数方法^[28–30]、绝热量子演化方法^[31–33]等为各种哈密顿的量子模拟做了打好了基础。如此趋势下,有必要着手系统地开发一个的量子算法和量子模拟库,以迎接量子时代的到来。QBLAS 就是这样一个开源量子程序库。

QBLAS 库被设计用来帮你在量子计算机或者量子模拟器上运行如上所述的各种量子基本线性代数算法和量子模拟任务。其中,量子基本线性代数部分包含了量子向量内积和距离算法^[86],矩阵本征值分解的 HHL 算法^[29,88,89],量子主成分分析算法^[28],量子傅里叶变换^[90],量子相估计等量子算法。量子模拟部分包含了稀疏矩阵的量子步模拟^[27,91],稠密矩阵的密度矩阵指数方法模拟^[28],Trotter 哈密顿分解模拟等^[24]。希望该库的研究能推动开源量子软件的发展。

第2章 基于GPU量子模拟器的 Z_2 格点规范理论的量子模拟

2.1 量子模拟方案

2.1.1 量子 Z_2 规范理论

量子 Z_2 规范理论特征主要由其哈密顿中的 g/K 决定^[3],为了讨论方便,我们可以取哈密顿中 $K=1$,从而简写为

$$H = Z + gX, \quad (2.1)$$

其中

$$X = - \sum_l \sigma_l^x, \quad Z = \sum_{\square} Z_{\square}, \quad (2.2)$$

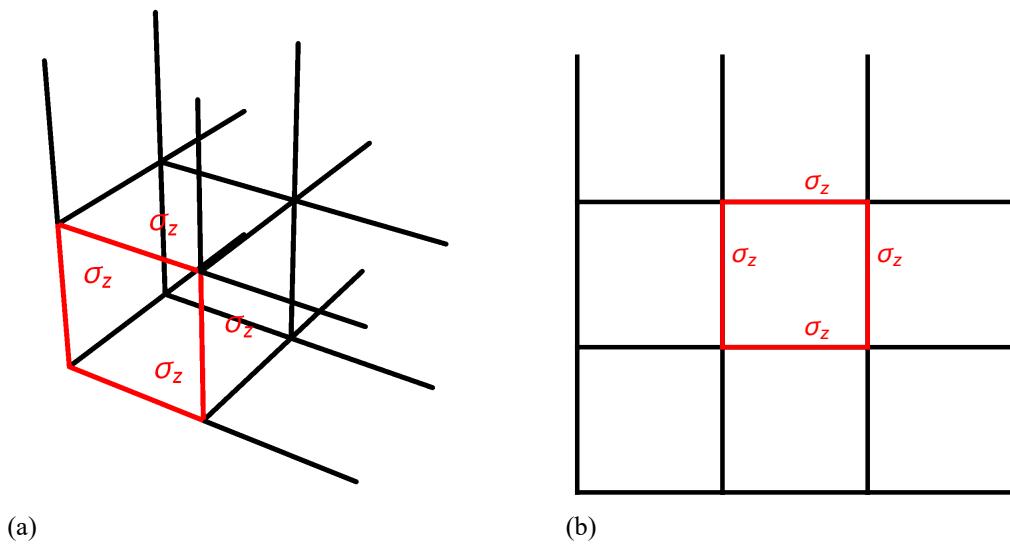
这里面 \square 表示基本的plaquette,如图2-1所示,

$$Z_{\square} = - \prod_{l \in \square} \sigma_l^z, \quad (2.3)$$

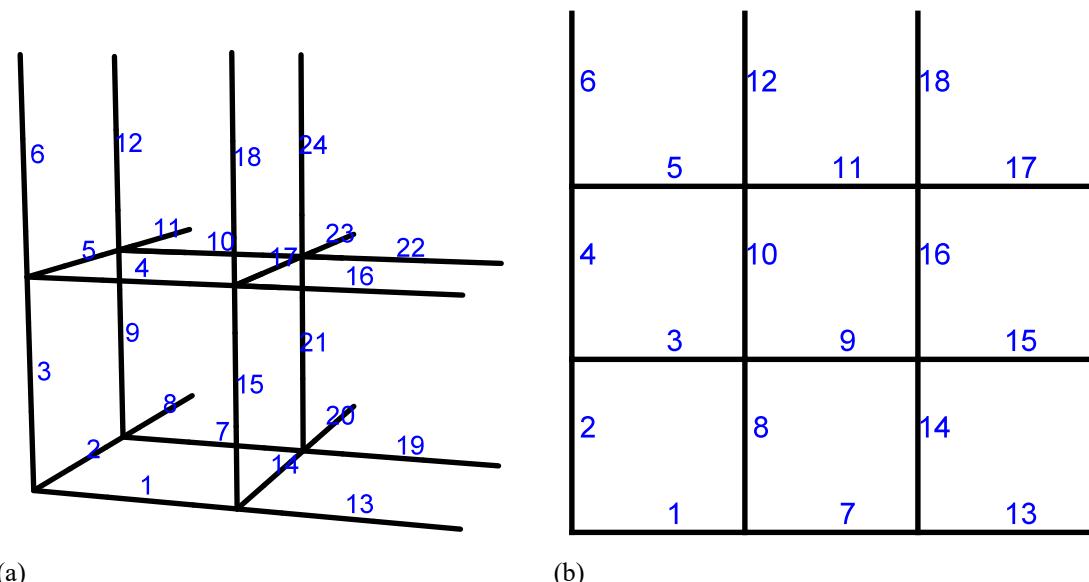
参数 g 是需要被调节的参数。对于每个量子比特, $\sigma^z|0\rangle = |0\rangle$, $\sigma^z|1\rangle = -|1\rangle$ 。经典 Z_2 规范理论的哈密顿是 Z ,对应的算符 σ_l^z 退化为对应的经典变量。 H 的量子特征起源于 σ_l^x 和 σ_l^z 的非对易性,引发了 Z 和 X 之间的竞争,其竞争形式类似于经典相变中的能量和熵。 g 在QPT中的角色类似于经典热力学相变中温度的角色。

根据 g 的不同,存在两个不同的相,退禁闭相和禁闭相,被一个QPT在临界点 g_c 处分开。该QPT没有自发的对称性破缺也不能找到一个局部序参数来描述它,我们可以使用Wegner-Wilson loop的行为来描述它。退禁闭相中有 Z_2 拓扑序,而禁闭相是平凡的,因此它是一个拓扑QPT^[2,3]。

为了模拟这一理论,我们首先要设计量子绝热算法和实现该算法的量子线路,其中 g 从0变化到一个足够大的值,经过 g_c 。假设格子为周期边界条件, $d=2$

图 2-1: (a) $d=3$ 和 (b) $d=2$ 格子, 各自带一个标出的基本 plaquette。

这样的话这样的格子是一个 Torus 拓扑结构。每个 link 上都有一个量子比特。link 和量子比特的编号如图3-1所示。一般而言 d 维的周期性边界的方形格子, 其 link 数目是 $N_e = dL^d$, 而其 plaquette 数目是 $N_v = \frac{(d-1)}{2}N_e$ 其中 L 是方形格子的线性长度。对于 D=3+1 理论, 格子是 $d=3 2 \times 2 \times 2$, 其中有 24 条 link, 24 个基本 plaquette , 一共需要 25 个量子比特, 其中一个是辅助比特。对于 D=2+1 理论, 格子是 $d=2 3 \times 3$, 其中有 18 条 link, 9 个基本 plaquette, 一共 19 个量子比特, 同样其中一个是辅助比特。虽然格子的尺寸很小, 但理论预测的所有的关键特征都显现了出来。

图 2-2: (a) $d=3 2 \times 2 \times 2$ 格子和 (b) $d=2 3 \times 3$ 格子, 带有序号的 link, 每个 link 上放一个量子比特。 $d=3$ 格子里面一共有 24 个量子比特, $d=2$ 格子里面一共有 18 个量子比特。

2.1.2 量子绝热算法和量子线路

在绝热演化中, g 改变的非常缓慢, 允许系统基态变化为对应的瞬时基态。如果系统从初始哈密顿 Z 的本征态出发, 它将以最终哈密顿对应的基态结束。

在我们的模拟中, 每一步系统演化很短的时间 t_s 后进行一次测量, 演化是通过量子线路实现的。由于 H 由两个非对易部分 Z 和 gX 组成, 因此可使用 Trotter 分解^[14,25,26,92] 对 H 进行分解。已知如下: 在 $H_1 + \dots + H_q$ 下演化时间 t_s 可以近似为在 H_1, \dots, H_q 各自下面的演化的连乘, 其中 n 是时间 t_s/n 的分解, 演化误差是^[27]

$$\|e^{-i(H_1+\dots+H_q)t_s} - (e^{-iH_1t_s/n} \dots e^{-iH_qt_s/n})^n\| = O\left(\frac{qlt_s^2}{n}\right), \quad (2.4)$$

对于只含有两项不对易成分的哈密顿分解误差为^[24]

$$\|e^{-i(A+B)t_s} - (e^{-iAt_s/n} e^{-iBt_s/n})^n\| \approx \left\|\frac{1}{2}[A, B] \frac{t_s^2}{n}\right\|, \quad (2.5)$$

其中 l 是任意两个子哈密顿的最大不对易模。 t_s 是一步的总模拟时间, n 是 Trotter 分解子步数。实际上 Trotter 分解公式来自于指数的一个分解近似 $e^{A+B} = e^A e^B + 1/2[A, B] + \dots$ 。

在我们的问题中, A, B 分别为 Z, gX , 哈密顿的分解及误差为

$$\begin{aligned} e^{-iHt_s} &\approx (e^{-iZ\frac{t_s}{n}} e^{-igX\frac{t_s}{n}})^n, \quad e^{-iZ\frac{t_s}{n}} = \prod_{\square} e^{-iZ_{\square}\frac{t_s}{n}} \\ \|e^{-i(Z+gX)t_s} - (e^{-iZt_s/n} e^{-igXt_s/n})^n\| &\approx \left\|\frac{1}{2}[Z, gX] \frac{t_s^2}{n}\right\| \leq \frac{1}{2} L_0 \frac{t_s^2}{n} = 2gN_v \frac{t_s^2}{n} \end{aligned} \quad (2.6)$$

其中 t_s 是一步的时间, n 是 Trotter 子步数, $\frac{t_s}{n}$ 是该步每一 Trotter 子步的时间, $e^{-iZ_{\square}\frac{t_s}{n}}, e^{-igX\frac{t_s}{n}}$ 可以通过量子线路精确实现。误差中 L_0 为

$$L_0 = \|[Z, gX]\| = g \left\| \sum_{i,j} [Z_{\square i}, -\sigma_j^x] \right\| \leq g N_v n_l$$

因为只有 $j \in \square_i, [Z_{\square i}, -\sigma_j^x] \neq 0$ 且 $\|[Z_{\square i}, -\sigma_j^x]\| \leq 1$, 而每个 plaquette 包含 n_l 个 link。对于本章中的方格子很显然 $n_l = 4$ 。

此外, 也可以使用来自于对称式 BCH 公式的对称式 Trotter 分解^[14,25,93] 去分解哈密顿以获得更优的精度, 蒙卡模拟中也有类似的分解称其为 Leapfrog 方法^[94–97], 其中对称式 BCH 公式^[94] 为

$$e^{A+B} = e^{A/2} e^B e^{A/2} + \frac{1}{24} (2[[A, B], B] + [[A, B], A]) + \dots$$

因此对称式 Trotter 的分解模拟误差为

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(t_s, n) &= \|e^{-i(A+B)t_s} - (e^{-iA\frac{t_s}{2n}} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}})^n\| \\
 &= \|e^{-i(A+B)t_s} - e^{-iA\frac{t_s}{2n}} (e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{n}})^{n-1} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}}\| \\
 &\approx \|(\frac{1}{12}[[A, B], B]) + \frac{1}{24}[[A, B], A]\) \frac{t_s^3}{n^2}\| \\
 &\leqslant (\frac{1}{12}L_1 + \frac{1}{24}L_2) \frac{t_s^3}{n^2}
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

其中 $L_1 = \|[[A, B], B]\|$, $L_2 = \|[[A, B], A]\|$ 。 t_s 是一步的总模拟时间, n 是一步时间 t_s 内的对称式 Trotter 子步数。对于我们的问题 $H = Z + gX$, $A = Z$, $B = gX$ 。

$$L_1 = \|[[Z, gX], gX]\| = g^2 \|[[Z, X], X]\|, L_2 = \|[[Z, gX], Z]\| = g \|[[Z, X], Z]\|$$

对于 L_1 :

$$[[Z, X], X] = [[\sum_{i=1}^{N_v} Z_{\square_i}, -\sum_{j=1}^{N_e} \sigma_j^x], -\sum_{k=1}^{N_e} \sigma_k^x] = \sum_{i,j,k} [[Z_{\square_i}, \sigma_j^x], \sigma_k^x]$$

其中只有 $j, k \in \square_i$, $[[Z_{\square_i}, \sigma_j^x], \sigma_k^x] \neq 0$, 且 $\|[[Z_{\square_i}, \sigma_j^x], \sigma_k^x]\| \leq 1$

由于每个 plaque 包含 n_l 个 link (对于本章中的方格子很显然 $n_l = 4$), 因此每个 Z_{\square_i} 与 n_l 个连接 link 的 σ_k^x 不对易. 排列组合 $\sum_{i,j,k} [[Z_{\square_i}, \sigma_j^x], \sigma_k^x]$ 中不为 0 的项数为 $N_v * n_l * n_l = N_v * n_l^2$.

所以

$$\|[[Z, X], X]\| \leq N_v * n_l^2, \text{故 } L_1 \leq g^2 N_v * n_l^2$$

对于 L_2 :

$$[[Z, X], Z] = [[\sum_{i=1}^{N_v} Z_{\square_i}, -\sum_{j=1}^{N_e} \sigma_j^x], \sum_{k=1}^{N_e} Z_{\square_k}] = \sum_{i,j,k} [[Z_{\square_i}, -\sigma_j^x], Z_{\square_k}]$$

其中只有 $j \in \square_i, j \in \square_k$, $[[Z_{\square_i}, -\sigma_j^x], Z_{\square_k}] \neq 0$, 且 $\|[[Z_{\square_i}, -\sigma_j^x], Z_{\square_k}]\| \leq 1$

由于每个 link 与 n_p 个 plaque 临接, 因此每个 σ_k^x 与 n_p 个临接的 Z_{\square_i} 不对易. 排列组合 $\sum_{i,j,k} [[Z_{\square_i}, -\sigma_j^x], Z_{\square_k}]$ 中不为 0 的项数为 $N_e * n_p * n_p = N_e * n_p^2$ 。所以

$$\|[[Z, X], Z]\| \leq N_e * n_p^2, \text{故 } L_2 \leq g N_e * n_p^2$$

两项合起来

$$\begin{aligned}\varepsilon(t_s, n, g) &\leq (\frac{1}{12}L_1 + \frac{1}{24}L_2)\frac{t_s^3}{n^2} \\ &\leq (\frac{1}{12}g^2N_v * n_l^2 + \frac{1}{24}gN_e * n_p^2)\frac{t_s^3}{n^2}\end{aligned}\quad (2.8)$$

以上是 t_s 内每个子步 g 不变的情况, 适用于 g 不变的动力学模拟。如果一步 t_s 内分成 n 个子步, 每一子步 g 增加, 每步 g 累计增加 g_s , 这样将引入绝热性演化, 第 k 步最后子步结束时的 $g = g' = kg_s$, 每一子步 g 增加 $\frac{g_s}{n}$ (g_s 是一个小量), 如此以来一步 t_s 的误差为

$$\begin{aligned}\varepsilon_s(t_s, n, g') &\\ &\leq \sum_{i=1}^n (\frac{1}{12}(g' - (n-i)*\frac{g_s}{n})^2 N_v * n_l^2 + \frac{1}{24}(g' - (n-i)*\frac{g_s}{n}) N_e * n_p^2) (\frac{t_s}{n})^3 \quad (2.9) \\ &\leq (\frac{1}{12}g'^2 N_v * n_l^2 + \frac{1}{24}g' N_e * n_p^2) \frac{t_s^3}{n^2} = \varepsilon(t_s, n, g')\end{aligned}$$

如此便将对称式 Trotter 分解推广到我们绝热模拟的情况, 每执行一步演化 t_s 时间, g 增加 g_s , 然后进行一次测量, t_s 内分解为 n 个对称式子步, g 从 0 开始到最后时的总累计误差是

$$\varepsilon_{all} = \sum_{g=g_s}^{g_f} \varepsilon_s(t_s, n, g) \quad (2.10)$$

$\varepsilon_s(t_s, n, g)$ 为每步绝热模拟的误差, g_f 为 g 的终止值, 本章中 $g_f = 2.0$ 。

对于 d=3: $N_v = 24, N_e = 24, n_p = 4, t_s = 0.1, n = 200$, 故 $\varepsilon_{all} \approx 2.9 \times 10^{-3}$

对于 d=2: $N_v = 9, N_e = 18, n_p = 2, t_s = 0.2, n = 5000$, 故 $\varepsilon_{all} \approx 1.2 \times 10^{-5}$

显然, 这种对称式 Trotter 分解方法比上面原始的 Trotter 方法具有更低的误差界, 因此本文中采用该对称式 Trotter 分解进行模拟。

哈密顿中 Z, Z_\square 部分的模拟可以采用

$$\begin{aligned}e^{-iZ_\square \frac{t_s}{n}} &= A^\dagger R_z^a(-2\frac{t_s}{n}) A, \quad A = \prod_{l \in \square} CNOT_{l,a} \\ e^{-iZ \frac{t_s}{n}} &= \prod_{\square} e^{-iZ_\square \frac{t_s}{n}}\end{aligned}\quad (2.11)$$

其中辅助比特上的量子门 $R_z^a(\phi) \equiv e^{-i\sigma_z^a \phi/2}$ 表示对其绕 σ_z 轴旋转角度 ϕ , $CNOT_{l,a}$ 是 CNOT 门, 其中 l 是控制比特, a 是目标比特, 如图2-3所示。最初, 辅助比特被设置为 $|r\rangle = |0\rangle$ 。在 $R_z^a(-2\frac{t_s}{n})$ 之前, 当且仅当控制比特是 $|1\rangle$ 时, 对应 CNOT 翻转 $|r\rangle$ 。因此, 当 plaquette 上有偶数个 $|1\rangle$ 时, $R_z^a(-2\frac{t_s}{n})$ 相当于 $e^{i\frac{t_s}{n}}$; 当

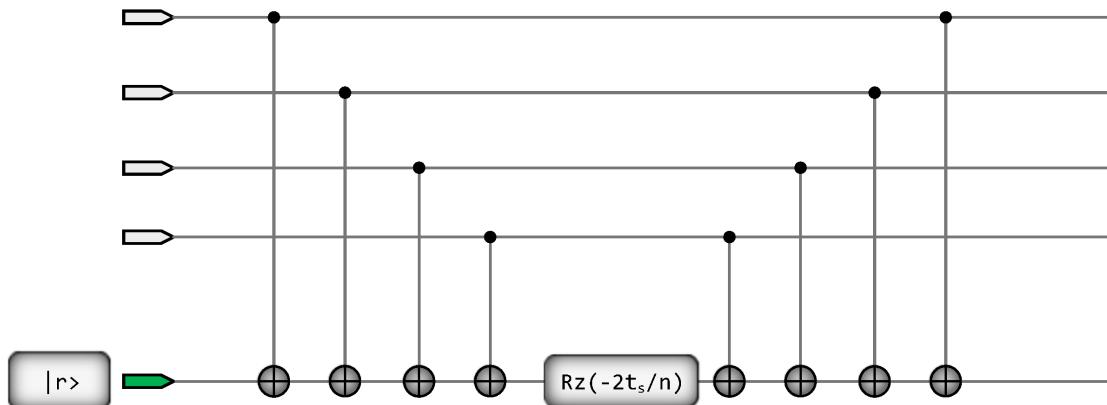


图 2-3: $e^{-iZ_{\square}\frac{t_s}{n}}$ 或 $e^{iZ_{\square}\frac{t_s}{n}}$ 的量子线路, 取决于辅助比特的态是 $|0\rangle$ 还是 $|1\rangle$ 。

plaquette 上有奇数个 $|1\rangle$ 时, $R_z^a(-2\frac{t_s}{n})$ 相当于 $e^{-i\frac{t_s}{n}}$ 。这正是 $e^{-iZ_{\square}\frac{t_s}{n}}$ 的效果。最后, $R_z^a(-2\frac{t_s}{n})$ 后面的四个 CNOT 门撤销辅助比特 $|r\rangle$ 到 $|0\rangle$, 辅助比特可用于下一个 plaquette 的演化。如果我们最初设置 $|r\rangle = |1\rangle$, 这个线路可以用来模拟反向时间 $-\frac{t_s}{n}$ 的演化。

对于哈密顿另一个部分 gX 的模拟可采用

$$e^{-igX\frac{t_s}{n}} = \prod_l e^{-i(-\sigma_l^x)g\frac{t_s}{n}} = \prod_l R_x^l(-2g\frac{t_s}{n}), \quad (2.12)$$

其中在量子比特 l 上的 $R_x^l(\phi)$ 表示绕 σ_x 轴旋转角度 ϕ 。

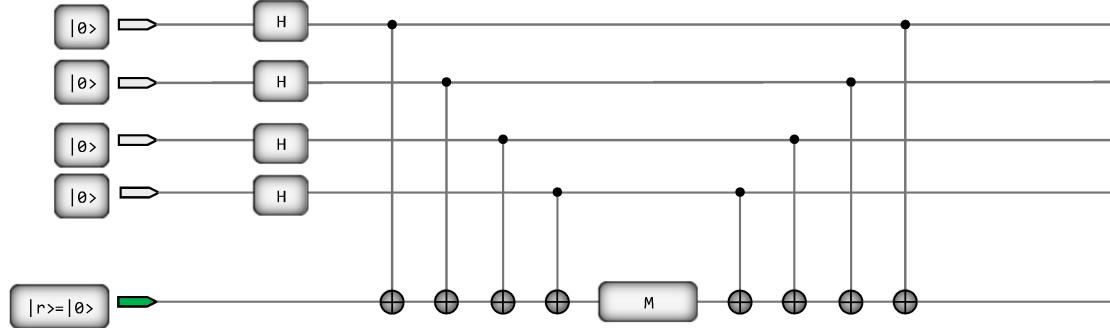
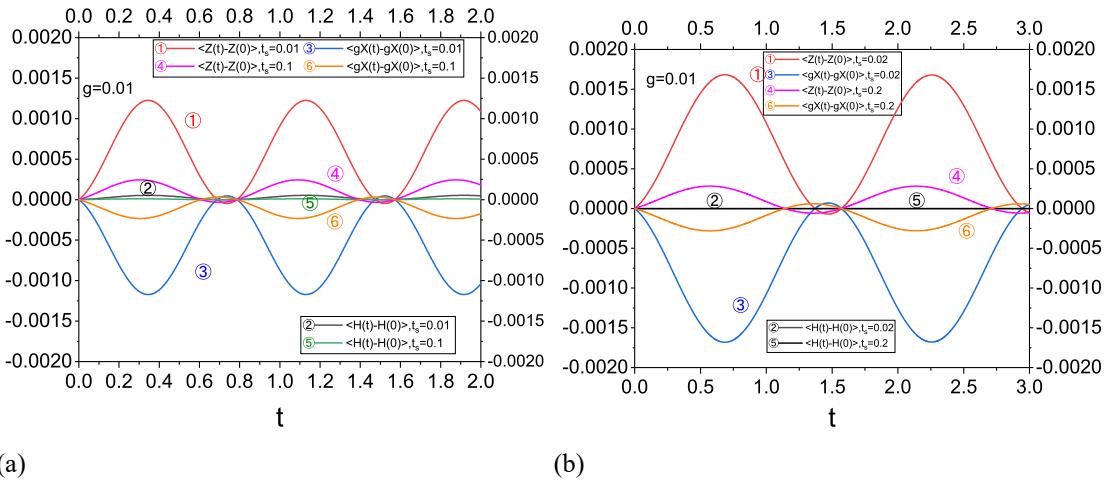
2.1.3 初态制备

绝热量子模拟从 $g = 0$ 开始, 此时 $H = Z$, 基态需满足

$$Z_{\square} = -1, \forall \square, \quad (2.13)$$

通常, 有多个简并的基态满足该条件, 其中全局电荷均排除的基态可通过如图2-4所示量子线路准备。首先使用 Hadamard 门制备所有 link 比特的等权叠加态, 然后对一个 plaquette 使用 CNOT 门产生态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|r=0\rangle_a|Z_{\square}=-1\rangle + |r=1\rangle_a|Z_{\square}=1\rangle)$, 这里辅助比特和该 plaquette 是纠缠的, 等权叠加两个分支 $Z_{\square} = +1$ 和 $Z_{\square} = -1$ 。然后对辅助比特的测量操作 M 将其投影到态 $|r=0\rangle$, 如此获得该 plaquette 处于态 $|Z_{\square}=-1\rangle$, 辅助比特已经还原, 可以用于下一个 plaquette 的制备, 以此类推使得所有 plaquette 处于 $|Z_{\square}=-1\rangle$, 它就是上面提到的 $g = 0$ 时的基态。该基态为 $|\psi_0\rangle$, 满足 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 。在 $m \times n$ 的 d=2 torus 格子, $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle$ 包含 $S_0 = 2^{2mn}/(2^{mn-1})$ 个闭弦配置的基矢成分 $|\phi_i\rangle$ 。

QuEST 提供了一种受控坍缩到预定态的函数, 利用该函数在模拟器中通过对

图 2-4: 一个 plaquette 的 Z_{\square} 初态制备的量子线路。图 2-5: 不同 t_s 下获得的 $g = 0.01$ 时的基态, H , Z 和 gX 期望值在时间 t 和时间 $t = 0$ 之间的差值。可见 t_s 越大, 绝热越好。(a) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子。(b) $d=2$ 3×3 格子。

辅助比特进行受控坍缩为准备初始基态提供了方便。受控坍缩在真实量子计算机中显然是不能实现的, 虽然真实量子计算机仍然可以通过多次准备等权叠加态然后测量辅助比特的尝试方法实现同样效果, 但效率是很低的只有 $2^{-(N_v-1)}$ 的概率能得到该基态。实际上对于真实的量子计算机有另一种更好的办法, 初始基态可以通过从所有 link 量子比特等权叠加的禁闭相开始绝热演化 $\lambda Z + (1 - \lambda)X$, λ 从 0 到 1 来获得, 其计算复杂度只有 $\sqrt{N_e}$ ^[31]。

2.1.4 绝热条件

绝热演化要求 g 的变化要比动力学时间标度慢得多。为了确定动力学时间的时间尺度, 我们通过从 $g = 0$ 基态的绝热演化, 为 g 的某个值准备了基态。在该基态下, Z 和 gX 的期望值呈现振荡如图2-5所示, 振荡周期的数量级为 1。因此 g 可以在 $t = 10 \sim 100$ 量级的时间间隔内从 0 变化到 2, 这比振荡周期要长得多。而且可以看出绝热演化越缓慢, 绝热效果越好。

t_s 越大, 绝热性越好, 但模拟误差越大。 n 越大, Trotter 精度越好, 但计算时间

越长。对于具体的计算硬件,需要在这些参数之间平衡。本文选择的这些参数值是为了在可接受的时间内尽量满足绝热条件下以最高能达到的精度完成计算。我们的模拟中 GPU 采用 NVIDIA Tesla V100-SXM2-32GB, 计算规模稍大的 d=3 情况所需时间为 28.43 小时, d=2 的情况为 3.98 小时, 精度可以接受。NVIDIA Tesla V100-SXM2-32GB 双精度计算能力为 7.834 TFLOPS, 相比 QuEST 文章中测试使用的 1.682TFLOPS 的 NVIDIA Tesla K40m 有较大提升, 意味着如果用后者将多花费数天时间。

绝热条件的约束条件是: $\partial H / \partial t$ 的矩阵元素要远远小于能隙^[31,75]。我们模拟的 g 范围内前者的量级为 $\partial g / \partial t = g_s / t_s = 0.01$ 。该系统退禁闭基态和第一激发态能隙可以被估计为创造一对 vison 的能量, 也就是 4。因此, 起始部分绝热条件确实满足。至于绝热全程其他 g 下的绝热条件, 文献^[31] 中指出相变临界能隙量级为 $\frac{1}{\sqrt{N_e}}$ 以及 Z_2 绝热相变模拟需要的时间尺度要不小于 $O(\sqrt{N_e})$ 量级, 我们的条件也是符合的。

2.1.5 模拟测量

能量 E 是 H 的期望值, $E = \langle H \rangle = \langle Z \rangle + g \langle X \rangle$ 。对于 Z, X , 在态 $|\psi\rangle$, $\langle Z \rangle = \langle \psi | Z | \psi \rangle = \sum_i z_i P(z_i)$, $\langle X \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \sum_i x_i P(x_i)$, 其中 z_i 和 x_i 分别表示算符 Z 和 X 的本征值, $Z |z_i\rangle = z_i |z_i\rangle$, $X |x_i\rangle = x_i |x_i\rangle$, $P(z_i)$ 和 $P(x_i)$ 是对应本征值的测量概率分布, 下面称其为态密度 (DOS)。波函数 $|\psi\rangle$ 在 Z, X 表象展开得 $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |z_i\rangle = \sum_i \beta_i |x_i\rangle$, 显然态密度 $P(z_i) = |\alpha_i|^2$, $P(x_i) = |\beta_i|^2$ 。在我们的经典模拟器里面, 我通过求和 $\langle Z \rangle, g \langle X \rangle$ 获得 $E = \langle H \rangle$ 。

测量值 $\langle F(g) \rangle$ 随 g 导数或偏导数计算, 由于 $\langle F(g) \rangle$ 随 g 曲线往往有振荡, 因此采用窗口平滑近似求导, 点 g 处的求导通过 $\partial \langle F(g) \rangle / \partial g \approx [\langle F(g + \frac{\Delta}{2}) \rangle - \langle F(g - \frac{\Delta}{2}) \rangle] / \Delta$ 来近似计算, 其中 Δ 为窗口长度, 本章中 d=2 取 $\Delta = 0.05$, d=3 取 $\Delta = 0.1$ 。

我们也计算了 Wegner-Wilson loop 算符的期望值。

$$W_C = \prod_{l \in C} \sigma_l^z, \quad (2.14)$$

格子回路 C 如图2-1。

期望计算需要进行大规模求和运算, 我们使用 CUDA 并行加速方法来计算 GPU 上所有基矢向量的统计求和。我们为测量结果的计算编写了自己的 CUDA 加速代码, 该部分代码基于 CUDA Reduce 求和加速技术大大缩短了求期望的时间, QuEST 中并没有包含这些代码。

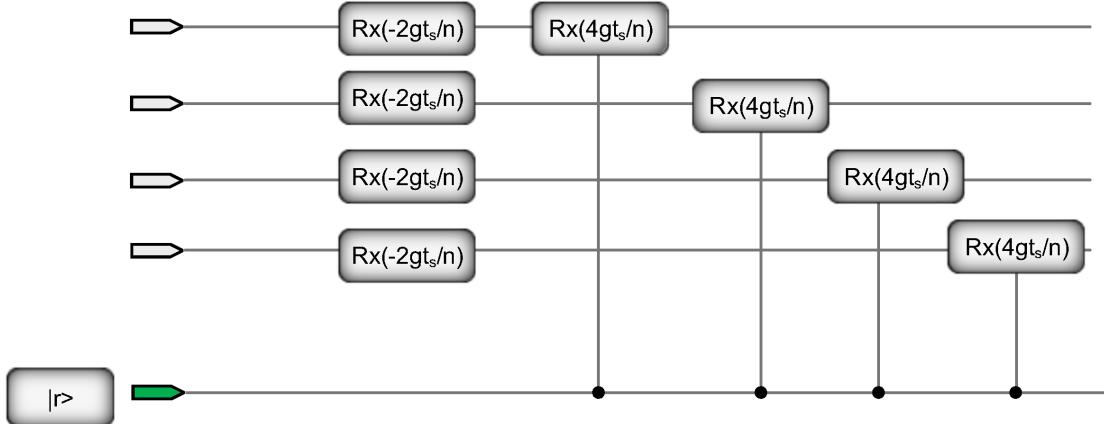


图 2-6: 量子线路模拟 $\prod_{l \in \square} e^{i\sigma_l^x g \frac{t_s}{n}}$ 或 $\prod_{l \in \square} e^{-i\sigma_l^x g \frac{t_s}{n}}$, 依赖于辅助比特态是 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 。

每一步演化 t_s 后, 将执行一次模拟测量。所有的量可以通过求测量值分布的期望来计算, $\langle Z \rangle = -\sum_{\square} \langle \psi | \prod_{l \in \square} \sigma_l^z | \psi \rangle$, $\langle X \rangle = -\sum_l \langle \psi | \mathbb{H} \sigma_l^z \mathbb{H} | \psi \rangle$, 其中 \mathbb{H} 表示 Hadamard 门, $\langle W_C \rangle = \langle \psi | \prod_{l \in C} \sigma_l^z | \psi \rangle$ 。

在真实的量子计算机上, E 可以通过更高效的方法: 量子相位估计获得。固定 g 值演化一个短的时间 t , $e^{-iHt} |u\rangle = e^{-i\phi} |u\rangle$, 其中 $\phi \equiv Et$ 。定义受一个辅助比特控制的受控演化

$$U(t) = |0\rangle \langle 0| \otimes e^{-iHt} + |1\rangle \langle 1| \otimes e^{iHt}, \quad (2.15)$$

为受控版本的哈密顿 H 演化。受控版本中, 对于 Z 部分, 模拟方法仍然如图2-3。对于 X 部分, 模拟方法增加辅助比特对其的控制如图2-6。可见这个辅助比特被用于控制时间演化的方向。

然后 $U(t) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) |u\rangle = e^{-i\phi} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle e^{i2\phi}) |u\rangle$ 因此, $U(2^n t) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) |u\rangle = e^{-i2^n \phi} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2^n \cdot 2\phi} |1\rangle) |u\rangle$, ($n = 0, 1, 2, \dots$)。这样就可以通过相估计方法估计 2ϕ 的概率分布可以获得 E 。相位估计方法中相位比特和待估计的态运算完之后没有纠缠, 保证了待估计的态可以继续被用于绝热模拟。这对实验实现是有利的, 减少了重复制备态的次数。

2.1.6 硬件平台

我们使用 Nvidia Tesla V100-SXM2-32GB GPU 服务器, QuEST 团队使用该 GPU 家族的 NVIDIA Tesla K40m 对 29 个量子比特 float 精度的量子模拟进行了详细测试^[61]。我们估计了 QuEST 在不同精度下采用本文量子模拟方案的最大模拟规模, 如表2-1所示。我们的模拟使用 double 双精度进行。

GPU	精度	计算能力 (TFLOPS)	N_f	N_{qubit}	M
Tesla K40m	float	5.046	4	30	8.2GB
	double	1.682	8	29	8.2GB
Tesla V100-SXM2-32GB	float	15.67	4	31	16.2GB
	double	7.834	8	30	16.2GB

表 2-1: 在单张 Nvidia Tesla K40m 和 Nvidia Tesla V100-SXM2-32GB GPU 上, 采用本文模拟方案 QuEST 可以模拟的最大规模。 N_f 是每个浮点数所占用的字节数, N_{qubit} 是量子比特数, M 是总显存需求。

2.2 模拟结果

2.2.1 Wegner-Wilson loop 和 QPT 临界点

现在我们来看 $D=3+1$ 和 $D=2+1$ 的模拟结果。我们首先准备 $g = 0$ 时的初始基态, 然后执行绝热模拟算法, 以步长 $g_s = 0.001$ 将 g 从 0 增加为 2。每一步都要停下来模拟测量待测量的几个物理量。

随着 g 增加, 态从所有的 plaquette $Z_{\square} = -1$ 的态发展到所有量子比特 $\sigma^x = +1$ 的态。在这个过程中, 它经历一个 QPT, 可以用 Wegner-Wilson loop W_C ^[3] 来描述。在 $g \gg 1$ 时的禁闭相阶段, W_C 遵守面积法则 $\langle W_C \rangle \sim \exp(-\alpha A_C)$, 其中 A_C 是回路 C 围成的区域, α 为常数。在 $g \ll 1$ 时的退禁闭相阶段, W_C 遵守周长法则 $\langle W_C \rangle \sim \exp(-\alpha' P_C)$, 其中 P_C 是回路 C 的边界, α' 是常数。在 $g = 0$ 时, 所有 $Z_{\square} = -1$, Z_2 磁通被排出, 小的涨落导致了周长法则。

我们的模拟结果证实, 随着 g 的增加, W_C 在经过相变时, 从周长法则转变为面积法则。对于 $d=3$ 和 $d=2$ 的格子, 我们分别选择了三个回路 $c1, c2, c3$, 如图2-7所示。它们的周长比是 1:1.5:2, 而面积比是 1:2:3。模拟结果表明, 三个回路中的 $\langle W_C \rangle$ 确实符合这两个法则如图2-8所示, 其中 $d=3$ 时 W_C 的对数比值有个下弯, 后面将解释其原因。

我们也确定了 QPT 的临界参数 g_c 。绝热演化的每一步, 我们计算 $\langle Z \rangle$ 和 $\langle X \rangle$, 然后求和得出 $\langle H \rangle$, 如图2-9所示。从其中我们获得了这些量对 g 的一阶和二阶导数, 如图2-10所示。然后我们从 $\langle H \rangle$ 二阶导数的峰决定来决定临界参数

$$g_c \approx 0.986, D = 3 + 1, \quad (2.16)$$

$$g_c \approx 0.380, D = 2 + 1, \quad (2.17)$$

和先前的对偶性理论暗示是一致的。 $D=3+1$ 理论是自对偶的。因此 $g_c \approx 1^{[2,17]}$ 。事实上, 我们观测到 $D=3+1$ 中 $\langle Z \rangle, \langle X \rangle$ 的确切交叉点就在 1.0, 这提供了一个

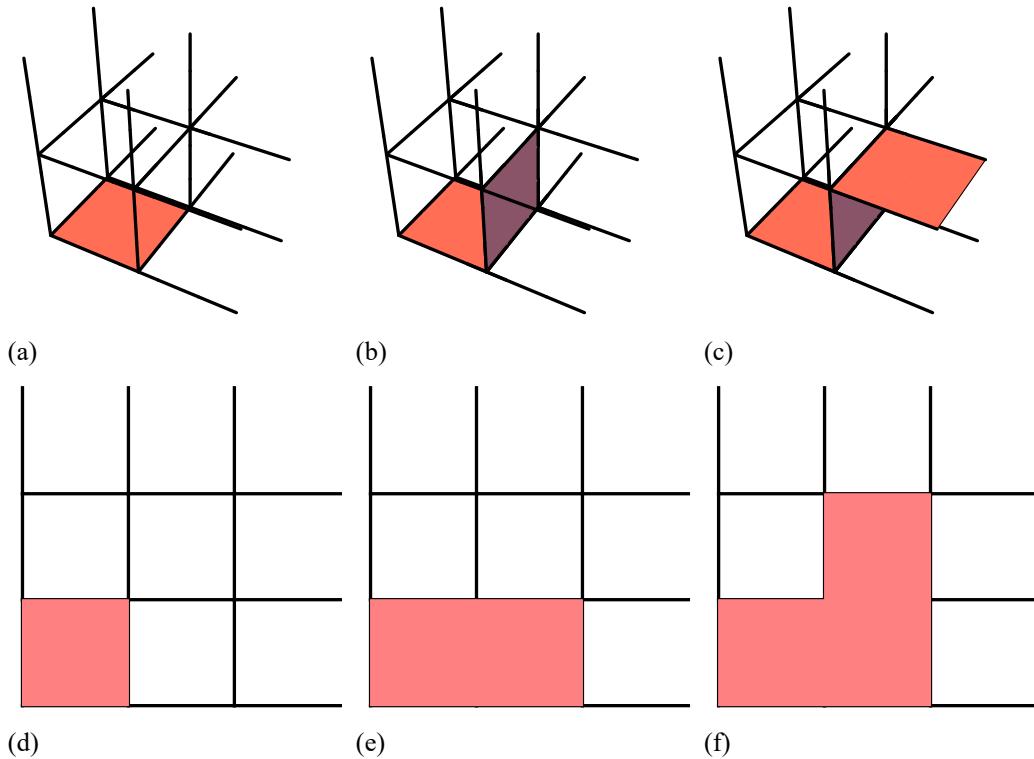


图 2-7: (a-c) 在 $d=3$ 格子上的三个 Wilson loop 回路。 (d-f) 在 $d=2$ 格子上的三个 Wilson loop 回路。

更有力的支持。D=2+1 理论对偶于 D=2+1 横场 Ising 模型 (TIM)。D=2+1 TIM 的临界参数 λ_c , 基于蒙卡和量子蒙卡模拟的结果是 $\lambda_c \approx 2.742 \sim 3.046^{[2,10,98]}$, 可推出 $g_c = 1/\lambda_c \approx 0.36 \sim 0.33$ 。TIM $L = 6$ 格子中一个精确对角化研究的结果是 $\lambda_c = 1/0.32841^{[99]}$. TIM $L = 54$ 格子一个基于纠缠重整化模拟的结果是 $\lambda_c = 1/0.3252^{[100]}$ 。以上研究中也都显示随着格子减小, 模拟得到的 g_c 有增大趋势。一个基于张量网络这一比较新的模拟方法直接对 $d=2 Z_2$ 规范理论 $L = 6$ 格子计算的结果显示 $g_c = 0.3267$, 然其文中 $L = 4$ 格子的结果 g_c 已经接近 $0.36^{[101]}$ 。

2.2.2 DOS 分析

定义 z, x 分别为算符 Z, X 本征值。其 DOS 如图2-12所示, Z_2 规范理论中 Z, X 本征值从其算符定义看有两个基本限制:

(1) link 的 σ^z 翻转对 Z 的限制: $d=2,3$ 格子中每个 link 的 σ^z 翻转改变 2 或其倍数个 plaquette 的激发状态, 因此 Z 每次改变 4 或其倍数。

(2) Z_2 规范性对 X 的限制: 规范算符 $G_+ = \prod_{l \in +} \sigma_l^x$ 与 H 对易是守恒量, 每次要同时翻转 2 或其倍数个 link 的 σ^x 才能保证 G_+ 不变. 因此 X 每次改变 4 或其倍数。

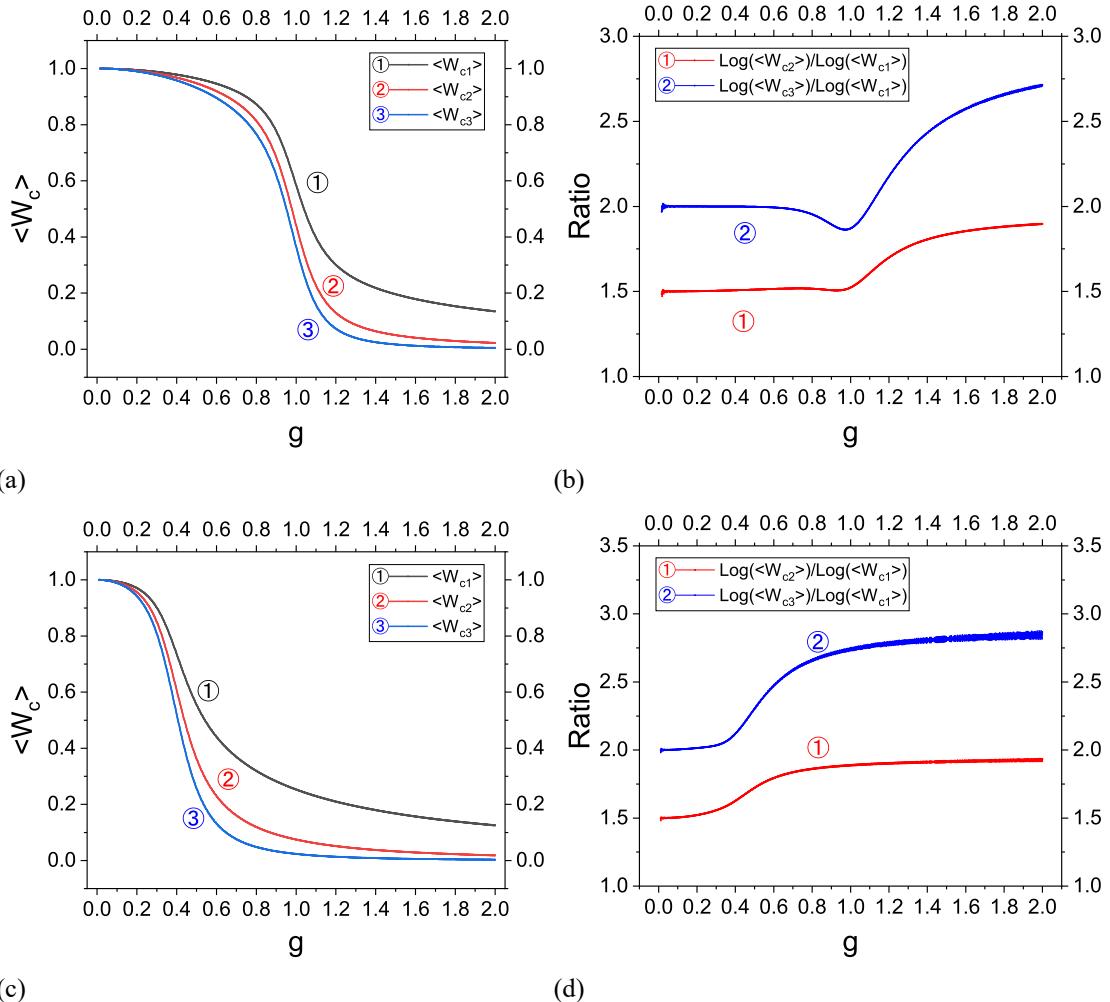


图 2-8: 三个 Wegner-Wilson loop 的期望值随着 g 的变化曲线。结果是通过增加 g , 步长 $g_s = 0.001$ 获取的。(a)(d) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子的结果。(b)(c) 中期望值对数的两个比值。

根据以上两个直观的限制, Z, X 仍然存在看似可以取但实际 DOS 中始终为 0 的本征值, 我们暂且称其为禁值。禁值的产生是以上两个通用的基本限制结合具体的格子几何所造成的, $d=3$ 和 $d=2$ 里面有着不同的情况。

对于 $d=3$ 的情况:

首先考虑具有周期边界条件的 $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子。根据以上限制, Z 的可能本征值是 $-24, -20, -16, -12, \dots, 16, -20, 24$, X 的可能本征值也是 $-24, -20, -16, -12, \dots, 16, -20, 24$ 。在 Z 和 X 这两个 DOS 中各自有一组禁值 $Z = \pm 20, X = \pm 20$ (图2-12)。其原因如下, 如图2-11所示, σ^z 本征态翻转一个量子比特, 共享该量子比特的 4 个 plaquette 的 Z_\square 的本征值的符号将改变, 从而将 Z 的本征值改变 8; 将两个相邻的量子比特的 σ^z 本征态翻转, 共享该量子比特的 6 个 plaquette 的 Z_\square 的本征值的符号将改变, 从而将 Z 的本征值改变 12; 一般来说, $4 + 2n$ 个 plaquette 可以被激发 ($n = 0, 1, 2, \dots$)。由于从 $g = 0$ 的退禁闭相基态往 g

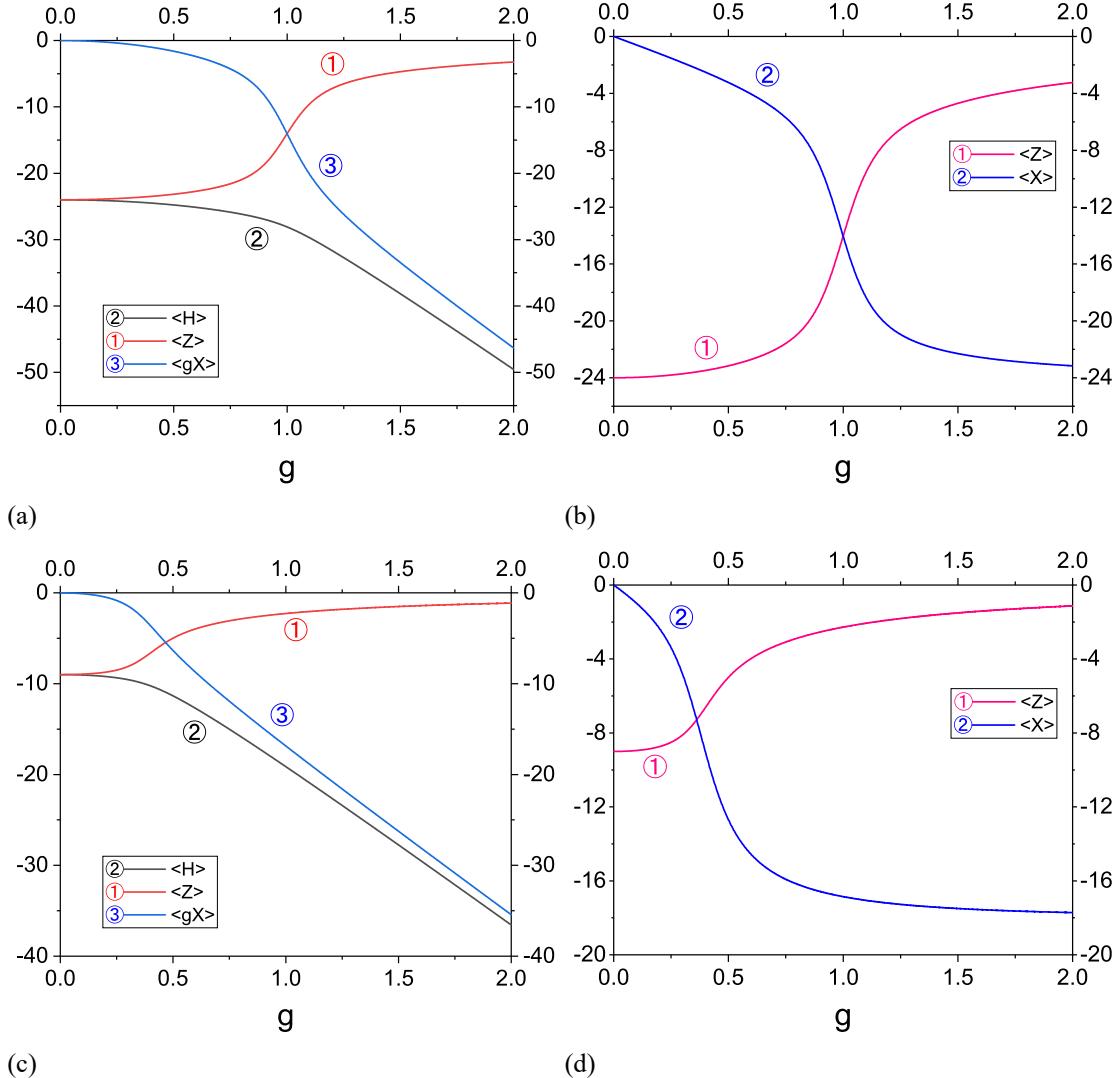


图 2-9: $\langle Z \rangle$, $\langle X \rangle$, $g\langle X \rangle$ 和 $\langle H \rangle$ 随着 g 的变化曲线, g 从 0 到 2, 步长 $g_s = 0.001$ 。(a) $\langle Z \rangle$, $g\langle X \rangle$ 和 $\langle H \rangle$, $d=3$ 2×2×2 格子。 $\langle Z \rangle$ 和 $\langle X \rangle$ 交叉于 $g_c \approx 1.0$ 。(b) $\langle Z \rangle$ 和 $\langle X \rangle$, $d=3$ 2×2×2 格子, 结果展示了明显的自对偶。(c) $\langle Z \rangle$, $g\langle X \rangle$ 和 $\langle H \rangle$, $d=2$ 3×3 格子。 $\langle Z \rangle$ 和 $\langle X \rangle$ 交叉于 g_c 附近于 ≈ 0.362 , $d=2$ 。(d) $\langle Z \rangle$ 和 $\langle X \rangle$, $d=2$ 3×3 格子。

增加方向第一步至少需要激发 4 个 plaquette, 而无法激发单独的 2 个 plaquette, 故出现禁值 -20 , 基于 Z_2 的对称性, ± 20 都是禁值。由于 $d=3$ 自对偶, X 相应也有禁值 ± 20 。

此外, $D=3+1$ 量子 Z_2 规范理论是自对偶的, 因此 Z 的 DOS 和 X 的 DOS 随 g 表现出明显相似的特征, 然而趋势相反, 如图2-12和图2-13所示。由 Z 和 X 的 DOS 得到, 随着 g 从 0 增加, Z 的期望值从 -24 增加到 0, X 的期望值从 0 减少到 -24 (图2-9)。

对于 $d=2$ 情况:

考虑具有周期边界条件的 $d=2$ 3×3 格子。根据以上限制, Z 的可能本征值是 $-9, -5, \dots, 7$, 而 X 的可能本征值是 $-18, -14, \dots, 14, 18$ 。从图中可以看

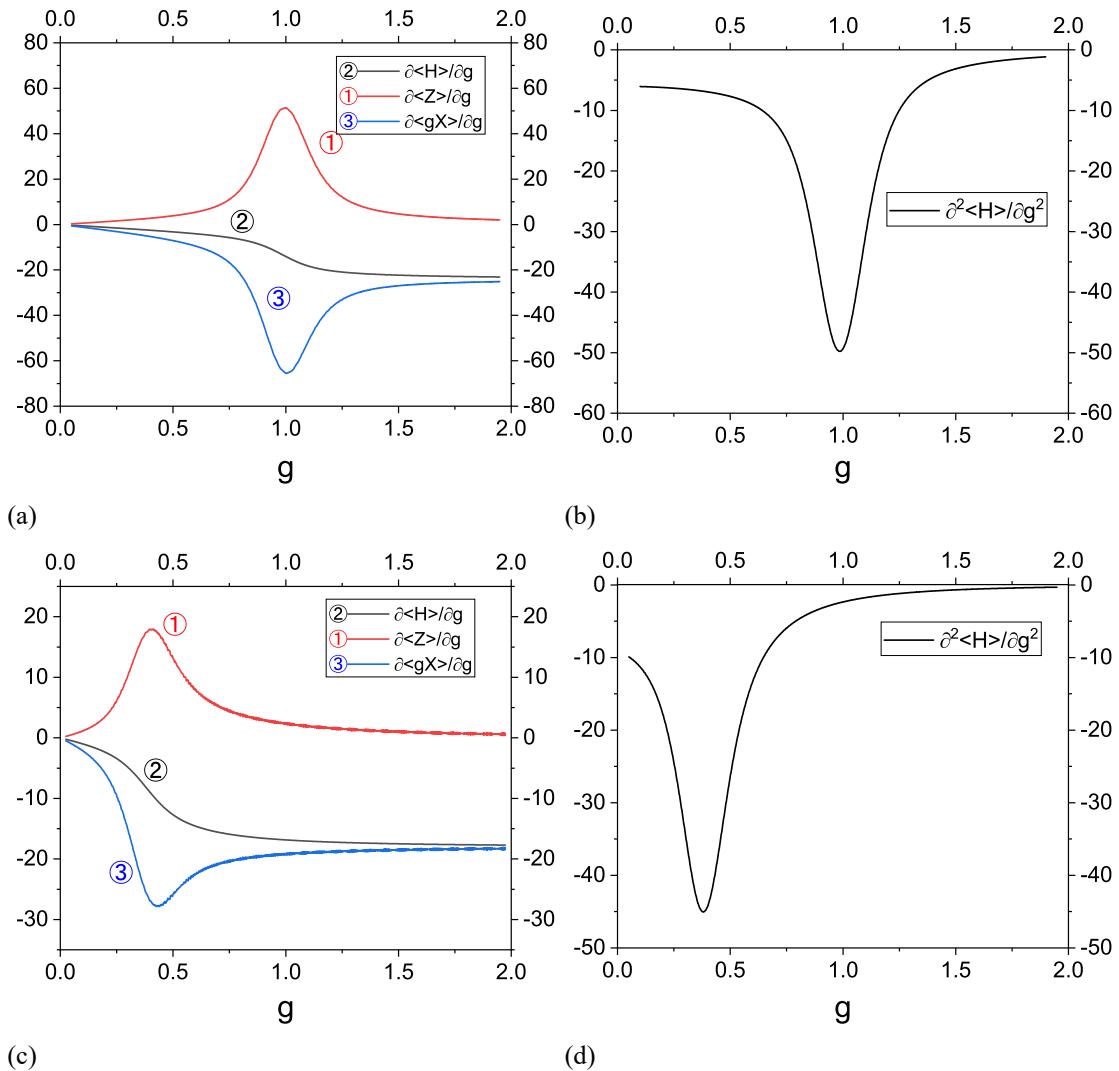


图 2-10: 导数随着 g 的变化曲线, g 从 0 到 2, 步长 $g_s = 0.001$ 。(a) $\langle Z \rangle$ 一阶导, $g\langle X \rangle$ 和 $\langle H \rangle$, $d=3 2 \times 2 \times 2$ 格子。(b) $\langle H \rangle$ 二阶导, $d=3 2 \times 2 \times 2$ 格子, 最低谷在 $g_c \approx 0.986$ 。(c) $\langle Z \rangle$ 一阶导, $g\langle X \rangle$ 和 $\langle H \rangle$, $d=2 3 \times 3$ 格子。(d) $\langle H \rangle$ 二阶导, $d=2 3 \times 3$ 格子, 最低谷在 $g_c \approx 0.380$ 。

出, Z 的 DOS 中没有禁值, 这是由于 $d=2$ 每次可以激发 2 个 plaquette, 而被激发的 plaquette 数目可以为 $2 + 2n, (n = 0, 1, 2, \dots)$, 如图2-11所示, 如此以来 Z 的所有可能本征值都能取到, 因而 DOS 中没有禁值。然而 X 的 DOS 中却有一组禁值 $X = \pm 14$ (图2-12), 该禁值来源是在 $3*3$ 格子中, 从 $g = +\infty$ 的禁闭相基态往 g 减小方向第一步, 为了让所有 + 的规范算符 G_+ 均不变号至少需要翻转 4 个而不是 2 个 link 的 σ^x 造成的。一般来说继续的话, $4 + 2n$ 个 σ^x 可以被翻转 ($n = 0, 1, 2, \dots$)。这是规范不变性的要求, σ^x 的翻转必须沿着闭合电弦进行, 而闭合电弦穿过的 link 数目是 $4 + 2n, n = 0, 1, 2, \dots, d=3$ 中 X 的 DOS 也可以类似解释。这与 $D=2+1$ 理论不是自对偶的这一事实也是一致的。随着 g 从 0 增加, Z 的期望值从 -9 开始向 0 移动, 而 X 的期望值从 0 开始向 -18 移动。

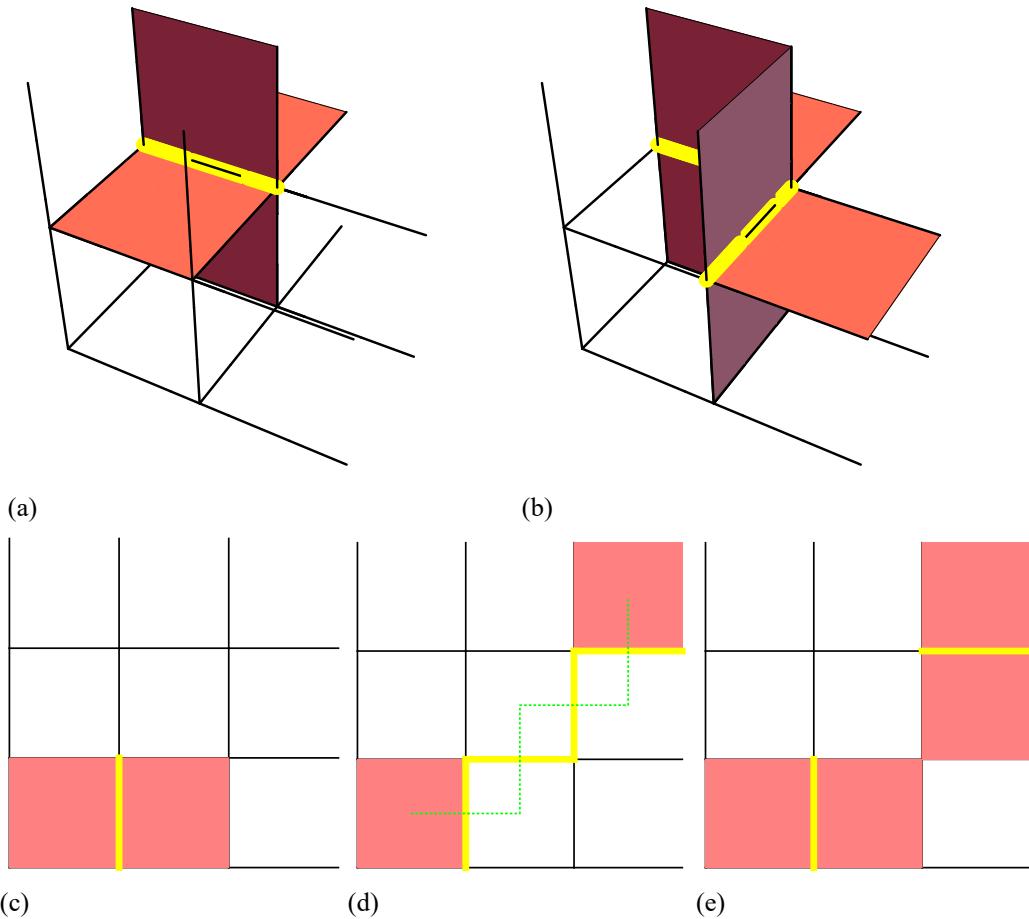


图 2-11: 黄色的 link 表示翻转 σ_z 的本征态, 粉色的 \square 表示 $Z_{\square} = 1$ 。(a) $d=3$ 格子, 其中一个 link 上的量子比特翻转后激发了 4 个 plaquette。(b) $d=3$ 格子, 如果相邻两个 link 上的量子比特同时翻转激发了 6 个 plaquette。(c) $d=2$ 格子, 其中一个 link 上的量子比特翻转激发 2 个 plaquette。(d) $d=2$ 格子带有通过一根弦算符 σ_x 制备的 2 个分离的 vison。(e) $d=2$ 格子, 相邻两个 link 上的量子比特同时翻转激发了 4 个 plaquette。

2.2.3 量子相变的阶数

是否存在一阶 QPT 是一个有趣的问题, 因为它可能引发低能级激发所主导的量子临界涨落^[18]。经典的 Z_2 格点规范理论中的相变在 $D=3$ 中是二阶的, 在 $D=4$ ^[15] 中是一阶的, 说明对应量子版本的 QPT 在 $D=2+1$ 中是二阶的, 在 $D=3+1$ 中是一阶的。这在我们的模拟中得到了证实。

我们的结果证明了量子 Z_2 格点规理论中的 QPT 在 $D=2+1$ 时是二阶的, 在 $D=3+1$ 时是一阶的, 原因有以下四个。

第一, 如图2-13所示, 在 $D=3+1$ 时, Z 的 DOS 在 QPT 前后有明显的不同, 峰值从 -12 以下变为大于 -12 , 而在临界点 $g_c \approx 1$ 处, 两个峰值都存在, 表明了量子版的相共存, 这是一阶相变的标志。

第二, 从图2-9,2-10,2-14中可以看出, 在 $D=3+1$ 时, 能量对 g 的一阶导数, 在

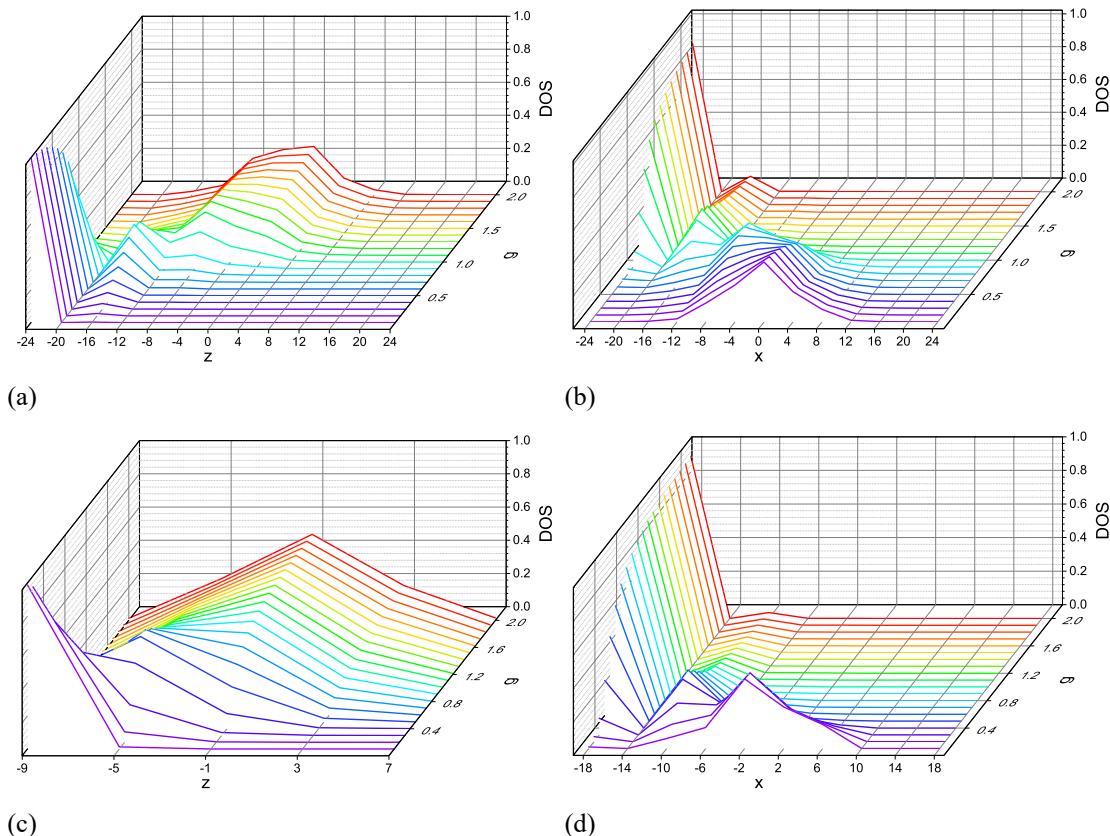


图 2-12: Z 和 X 的 DOS 随着 z , x , 以及 g 的变化, g 从 0 到 2, 步长 $g_s = 0.001$ 。(a) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子, Z 的 DOS。(b) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子, X 的 DOS。(c) $d=2$ 3×3 格子, Z 的 DOS。(d) $d=2$ 3×3 格子, X 的 DOS。

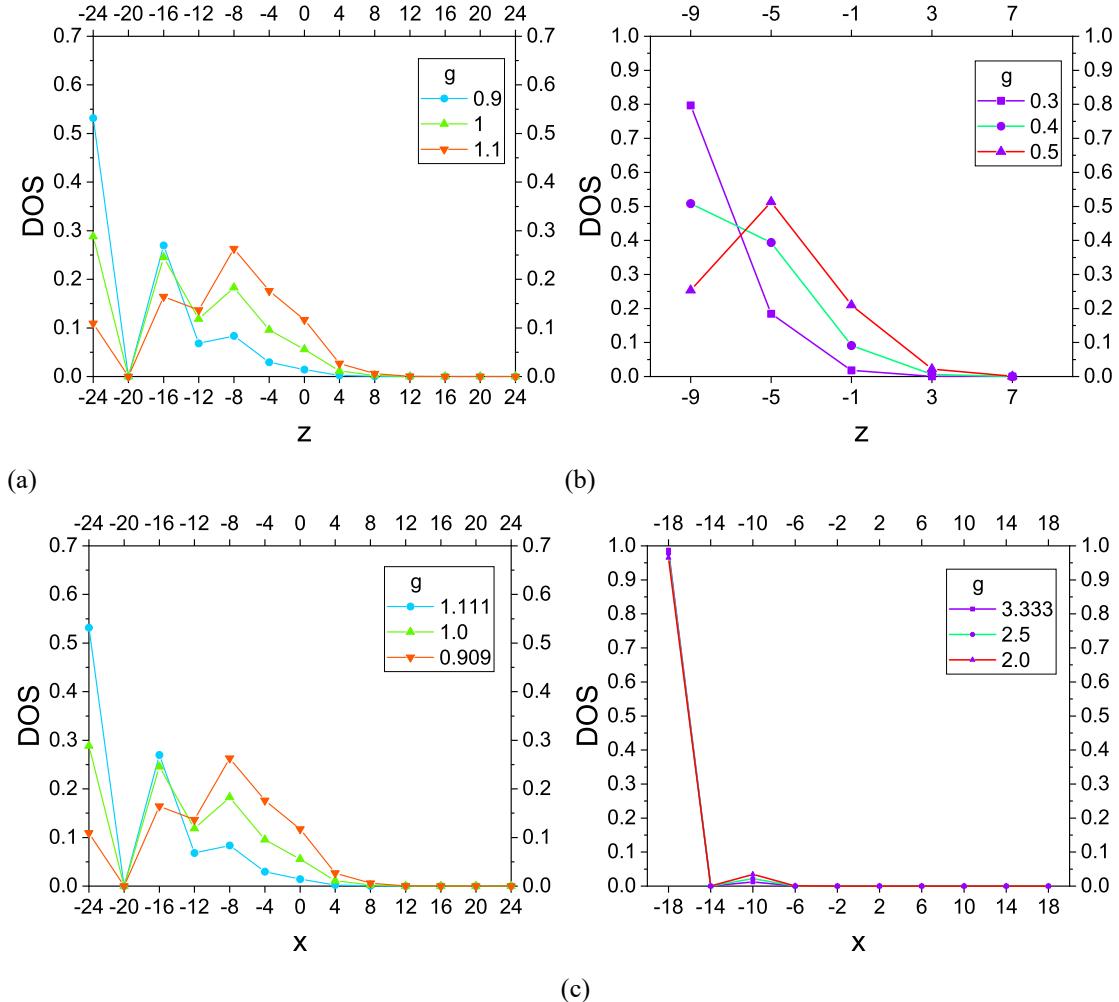


图 2-13: 相变点附近 Z 的 DOS 以及对偶 g 附近 X 的 DOS。(a) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子, $g = 0.9, 1.0, 1.1$ 。(b) $d=2$ 3×3 格子, $g = 0.3, 0.4, 0.5$ 。(c) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子, $g \approx 1/0.9, 1/1.0, 1/1.1$ 。(d) $d=2$ 3×3 格子, $g \approx 1/0.3, 1/0.4, 1/0.5$ 。

$g_c \approx 1$ 时是不连续变化的, 其二阶导数在相变前后出现两个不同高度的平台区呈现出阶跃特点。而在 $D=2+1$ 时两者都是相对连续变化的。

第三, 对比讨论 $d=2$ 和 $d=3$ 格子下 $\langle Z \rangle$ 对 g 一阶导数和能量对 g 的二阶导数, 如图2-14所示。可以清楚地看到, 在 $d=3$ QPT 时 $\langle Z \rangle, \langle H \rangle$ 的变化更为陡峭, 且远比 $d=2$ 处更为陡峭。这支持 QPT 在 $D=3+1$ 时为一阶, 在 $D=2+1$ 时为二阶。

第四, 如图2-8所示, 在 $D=3+1$ 时, Wegner-Wilson loop 的期望值在 $g_c \approx 1$ 处出现不连续的变化, 而在 $D=2+1$ 处只有连续的变化。此外, 在 $D=3+1$ 时, Wegner-Wilson loop 比值从图2-8(b) 中可以看到在 g_c 附近有一个下弯, 下弯的最低点恰好在 g_c 处。即当在 g_c 附近, 存在一个小的区间, 其期望值的比值随着 g 的减小而增大。该现象在 $D=2+1$ 里面是没有的。这是由于 $d=3$ 里面有在相变点的相共存, 两相之间的强烈破坏性互相干扰导致了该下弯。而且回路越大, 干扰越强, 所以 c_3 和 c_1 之间的比值比 c_2 和 c_1 之间比值下弯的更厉害。我们注意到自旋玻

璃系统的量子绝热模拟中也存在类似的下弯,被认为是一阶QPT的证据^[19]。

因此,我们的模拟支持四维经典 Z_2 格点规范理论所对应的量子 $d=3$ Z_2 规范理论中的QPT是一阶的,而三维经典 Z_2 格点规范理论所对应的量子 $d=2$ 是二阶的。

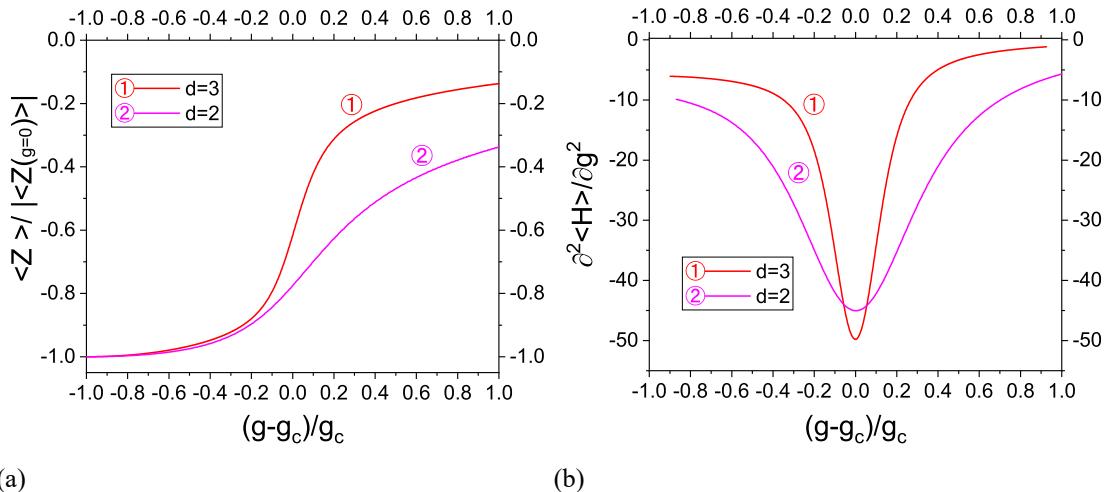


图 2-14: $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 和 $d=2$ 3×3 格子随着 $(g - g_c)/g_c$ 的变化的结果对比, g_c 是各自的临界值。(a) $\langle Z \rangle$, 是 $g = 0$ 时的绝对大小值。(b) 能量二阶导随着 g 的变化曲线。可以清楚地看到,在 $d=3$ 时, QPT 处的 $\langle Z \rangle$ 的变化更为陡峭, 能量的二阶导数的谷值也更为陡峭。

2.2.4 拓扑量子相变

经典 Z_2 格点规范理论的相变没有局域对称性破缺,如今被称为拓扑相变。我们的模拟从三个方面验证了量子 Z_2 规范理论里面的QPT也是拓扑的。

首先,可以用单个量子比特的 $\langle \sigma_z \rangle$ 随着 g 的函数来验证局部对称性破坏的缺失。从图2-15可以看出, $\langle \sigma_z \rangle$ 在 g 的所有值下都保持为0。我们还研究了单个link的能量 $\langle h_l \rangle$ 情况,其中 $h_l = z_l + x_l$, $z_l = \frac{1}{4} \sum_{\square_i, l \in \square_i} Z_{\square_i}$, $x_l = -\sigma_l^x$ 。

其次,在 $D=2+1$ 时,QPT的拓扑性质也可以通过拓扑相中稳定的低能级激发(vison)来表示(如图2-12)。如图2-11所示一个link翻转激发创建两个vison,它们可以由 σ_x 算符串分隔开,每个vison携带一个 Z_2 磁通 $Z_{\square} = +1$ ^[3],其不能由任何作用于基态的局域操作算符创建和湮灭。这两个分离的vison只能被非局部算符湮灭或相互接触而湮灭。DOS图2-12支持了这种激发的存在。

另一个拓扑特征是拓扑非平凡几何(如Torus)上的低激发状态,其能隙指数取决于 g 和格子尺寸 L ^[3,101]。在 $D=d+1$ 循环边界格子中,可以定义如下 d 个独立的't Hooft loop算符 $V_i \equiv \prod_{\bar{C}_i} \sigma_i$ 与 H 对易,在回路 \bar{C}_i 上($i = 1, \dots, d$)。如图2-16所示,在 $D=2+1$ 中, \bar{C}_x 和 \bar{C}_y 在对偶的正方形格点上,并围绕着Torus面的两个独立的圈,类似于 $D=2+1$ 的情况,在 $D=3+1$ 中我们定义 \bar{C}_x 、 \bar{C}_y 和 \bar{C}_z 包含了

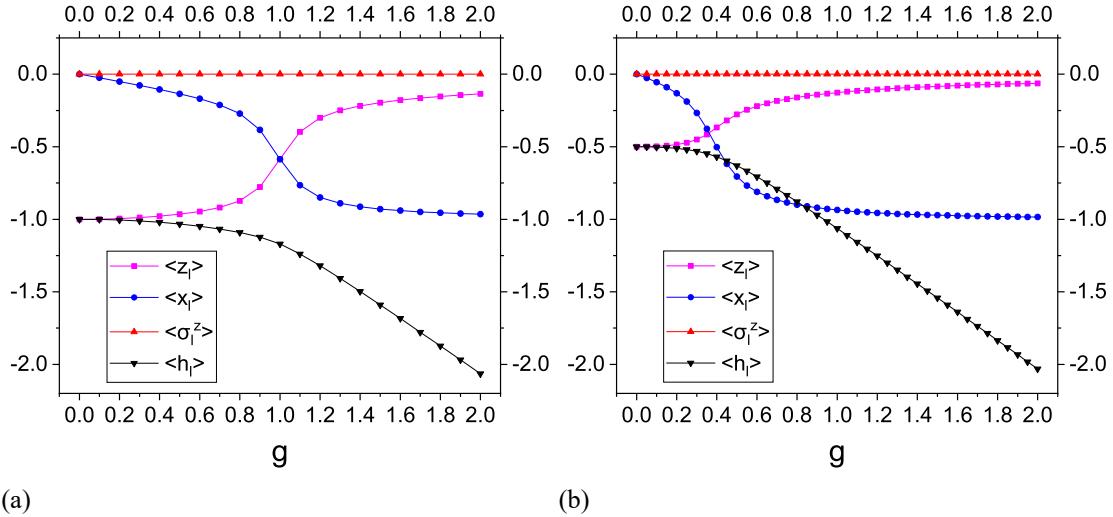


图 2-15: link $l = 1$ 的 $\langle \sigma_l^z \rangle$, $\langle z_l \rangle$, $\langle x_l \rangle$ 和 $\langle h_l \rangle$ 随着 g 变化曲线。(a) $d=3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子, 测量点 g 间隔 0.1。(b) $d=2$ 3×3 格子, 测量点 g 间隔 0.05。

被横截面切断的 link。

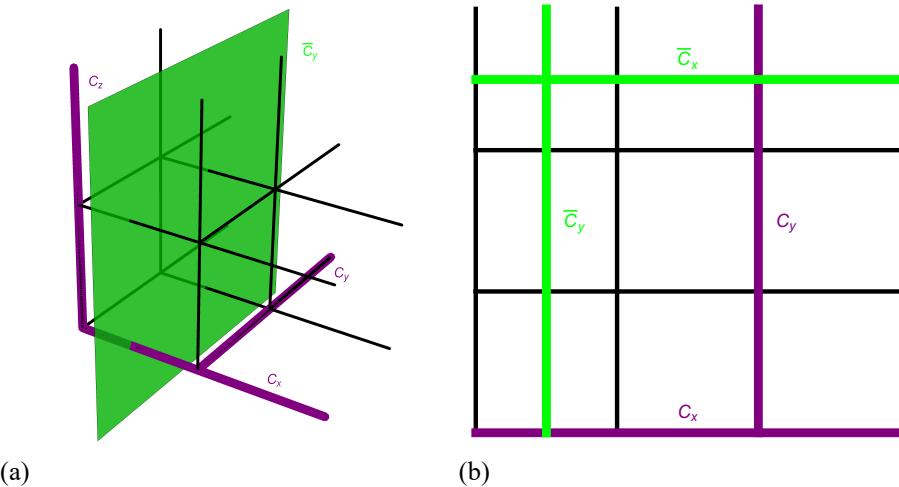


图 2-16: (a) $d=3$ 格子, 定义 V_y 的回路 \bar{C}_y , 定义 W_x, W_y, W_z 的回路 C_x, C_y, C_z 。(b) $d=2$ 格子, 定义 V_x, V_y 的回路 \bar{C}_x, \bar{C}_y , 以及定义 W_x, W_y 的回路 C_x, C_y 。

如图2-16所示, 我们还可以定义绕过边界的 Wegner-Wilson loop 的算符

$$W_x = \prod_{l \in C_x} \sigma_l^z, W_y = \prod_{l \in C_y} \sigma_l^z, W_z = \prod_{l \in C_z} \sigma_l^z$$

分别绕过边界回路 C_x, C_y 和 C_z , 与 H 不对易, 与 V_i 有以下的对易关系:

$$W_x V_y = -V_y W_x, \quad W_y V_x = -V_x W_y \quad (2.18)$$

因此, W_x (W_y) 作用于 V_y (V_x) 的一个本征态得到另一个本征态, 新本征态的

V_y (V_x) 本征值符号与之前是相反的。我们上面使用的这个起始基态 $|\psi_0\rangle$ 对应 $(V_x = +1, V_y = +1)$ 的情况, 因此 $g = 0$ 时其他简并的基态可以通过该 W_x, W_y 算符作用于 $|\psi_0\rangle$ 来制备。

在 $D=2+1, g = 0$ 时, 有 4 个简并基态, 分别对应 $V_x = \pm 1, V_y = \pm 1$ 。当 $g \neq 0$ 时, 这 4 种状态不再简并, 其中 $V_x = +1, V_y = +1$ 仍是基态, 而其他 3 种态与其有个较小的指数能隙。

$$\Delta_{i1} \equiv E_i - E_1 \propto g^{L+1}, \quad (2.19)$$

下标 $i = 2, 3, 4$ 表示另外三种简并的基态, 1 表示基态, L 表示 Torus 格子的长度, 本章显然 $L = 3$ 。这是 Z_2 拓扑序在 $D = 2 + 1$ 的定义性特征^[3]。我们使用 W 运算符准备 $g = 0$ 处的四个基态, 然后在每个基态上运行量子绝热模拟算法。如图2-17所示, 我们证实了相变前的能量间隙确实满足方程 (2.19)。最小二乘拟合结果为

$$\begin{aligned} \Delta_{21}^{\frac{1}{L+1}} &= \Delta_{31}^{\frac{1}{L+1}} = 1.88719g + 0.0251636 \\ \Delta_{41}^{\frac{1}{L+1}} &= 2.08307g + 0.0441229 \end{aligned} \quad (2.20)$$

在 $D=3+1$ 时, $g = 0$ 处有 $V_x = \pm 1, V_y = \pm 1, V_z = \pm 1$ 有 8 个简并基态, $g \neq 0$ 时因为旋转对称性其中只有四种能量是不同的。我们使用相应的 W 算符来准备这 8 个相应基态中的四个能量不同的态 $(V_x = +1, V_y = +1, V_z = +1), (V_x = +1, V_y = -1, V_z = +1), (V_x = -1, V_y = -1, V_z = +1)$ 和 $(V_x = -1, V_y = -1, V_z = -1)$ 。然后我们运行绝热演化算法, 得到了相变能量和间隙对 g 的依赖关系, 如图2-17所示。D=3+1 得出的能隙结果的理论解释还有待发展。

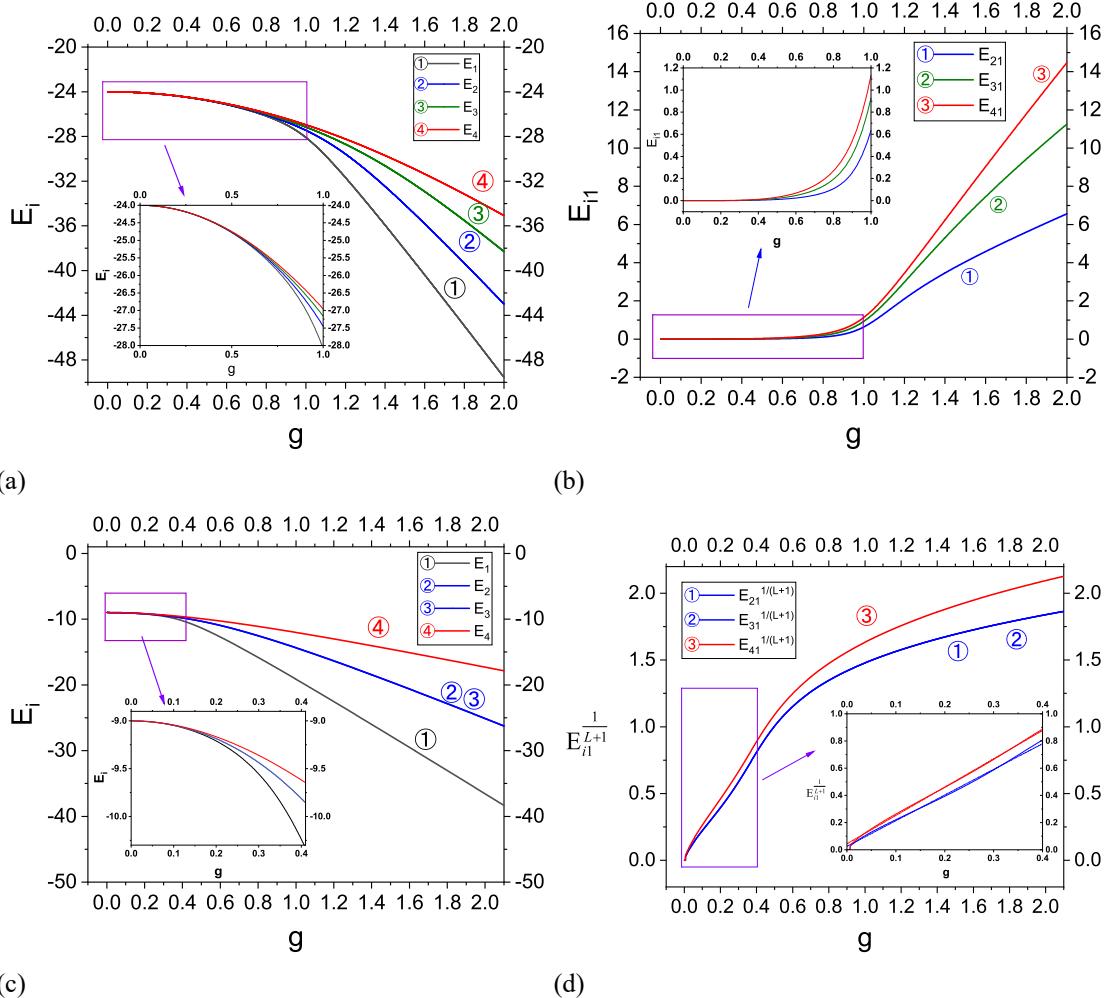


图 2-17: (a) 在 $d = 3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子上, 基态 $(V_x, V_y, V_z) = (1, 1, 1)$ 的能量本征值 E_1 , 基态 $(V_x, V_y, V_z) = (1, -1, 1)$ 的能量本征值 E_2 , 基态 $(V_x, V_y, V_z) = (-1, -1, 1)$ 的能量本征值 E_3 , 基态 $(V_x, V_y, V_z) = (-1, -1, -1)$ 的能量本征值 E_4 随着 g 的变化曲线, g 从 0 到 2, 每一步增加 $g_{step} = 0.001$ (b) 在 $d = 3$ $2 \times 2 \times 2$ 格子上, $E_{i1} \equiv E_i - E_1$ $i = 2, 3, 4$ 随着 g 变化曲线。(c) 在 $d = 3$ 3×3 格子上, 基态 $(V_x, V_y) = (1, 1)$ 的能量本征值 E_1 , 基态 $(V_x, V_y) = (1, -1)$ 的能量本征值 E_2 , 基态 $(V_x, V_y) = (-1, 1)$ 的能量本征值 E_3 , 基态 $(V_x, V_y) = (-1, -1)$ 的能量本征值 E_4 , 随着 g 的变化曲线, g 从 0 到 2, 每步增加 $g_{step} = 0.001$ 。(d) 在 $d = 3$ 3×3 格子上, $\Delta_{i1}^{\frac{1}{L+1}}$, ($i = 2, 3, 4$), 随着 g 的变化曲线, 其中能隙 $\Delta_{i1} \equiv E_i - E_1$ 。

2.3 小结

本章利用基于量子线路实现的数字化绝热量子模拟算法,设计了一种针对高能物理和凝聚态物理都有重要意义的量子格点规范理论的量子模拟方案。方案中通过采用通用的单双比特逻辑门组合实现了对 Z_2 规范理论哈密顿的量子模拟,通过将 Trotter 和对称式 Trotter 分解拓展到绝热演化的情况实现对其的绝热演化模拟。特别地,我们通过在 Nvidia Tesla V100-SXM2-32GB GPU 服务器上运行 GPU 模拟器任务来经典地模拟这种量子模拟。我们已经研究清楚了 $D=2+1$ 和 $D=3+1$ 的量子 Z_2 规范理论。尽管由于较小的格子量子相变的奇性被某种程度破坏,但所有的关键特征还是被观察到,并于之前的研究工作一致。当 $D=3+1$ 时,QPT 为一阶, $D=2+1$ 时,QPT 为二阶,临界点 g_c 分别为 0.986 和 0.380。此外,我们还清楚地观察到 QPT 的拓扑特征,如不存在局部对称性破缺以及 $D=2+1$ 时依赖于 g 的 vison 激发和能隙指数。

在这项工作中,量子模拟的高性能经典模拟也可以称为赝量子模拟代表了一种新的计算方式,同时将促进量子软件的发展。事实上我们注意到本文是首次采用基于线路的数字化绝热模拟方法对 $d=2$ 和 $d=3$ 量子 Z_2 规范理论做系统性对比研究并采用 GPU 蚕量子模拟得到了独特 $d=3$ 情况的数值结果。作为格点规范理论量子模拟的下一步,本章工作将为研究与规范场耦合的费米子问题以解决传统蒙卡中的符号问题提供铺垫。而作为一种通用的模拟方法,相较于张量网络等方法拥有更自然的物理表示和更大的模拟灵活性和通用性,因此该赝量子模拟方法在计算能力保证下将适用于各种其他量子系统模拟问题。

第3章 格点拓扑改变诱导的 Z_2 拓扑 量子相变

3.1 Z_2 哈密顿量和格子拓扑

如第二章,量子 Z_2 格点规范理论的哈密顿^[2,3] 是

$$H = Z + gX, \quad Z = - \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z, \quad X = - \sum_l \sigma_l^x \quad (3.1)$$

$$Z = \sum_{\square} Z_{\square}, \quad Z_{\square} = - \prod_{l \in \square} \sigma_l^z \quad (3.2)$$

二维格子的不同边界条件对应着不同的格子拓扑结构。对于 3×3 格子, Torus 和 Klein 瓶子的边界条件分别如图3-1所示, 我们分别称其为 Torus 格子和 Klein 格子。可见, 除了右边界 link 上下对调外, 格子其他部分的 link 是一致的。这两种格子拓扑下的量子 Z_2 哈密顿分别记为 H_t 和 H_k 。

本文采用量子绝热演化的方法使系统哈密顿从 H_t 缓慢地转变到 H_k , 来观察了系统基态的改变。之前, 该方法已被用于研究格点规范理论中规范群的变化所引起的相变^[102]。

$$H_t = Z_t + gX, \quad H_k = Z_k + gX \quad (3.3)$$

绝热演化的哈密顿是

$$\begin{aligned} H &= (1 - \lambda)H_t + \lambda H_k \\ &= (1 - \lambda)Z_t + \lambda Z_k + gX = Z_a + gX \\ Z_a &= (1 - \lambda)Z_t + \lambda Z_k \end{aligned} \quad (3.4)$$

λ 是绝热演化变量。结合格子而言, 哈密顿变化实际就是格子右边界的变化, 随着 λ 从 0 到 1, Torus 格子的右边界逐步变为 Klein 格子的右边界, Torus 格子就变成

了 Klein 格子。

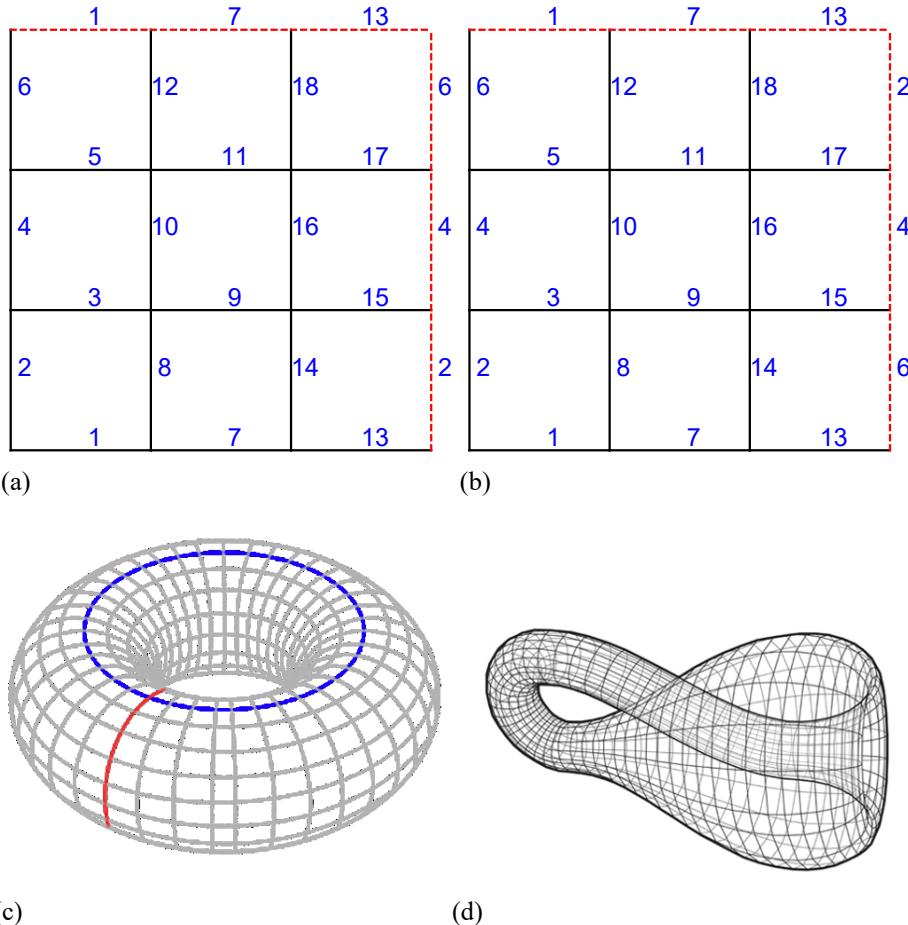


图 3-1: (a)Torus $d=2$ 3×3 格子的边界条件。(b) Klein $d=2$ 3×3 格子的边界条件。(c)Torus 定向曲面。(d) Klein 瓶非定向曲面。

3.2 Torus 和 Klein 格子下 g 改变诱导的拓扑量子相变对比

在研究格子拓扑变化之前, 我们首先研究两个格子各自的拓扑量子相变特性, 如图3-2所示。这两个格子的相变具有相同的性质。相变点约为 $g_c = 0.380$ 。Torus 格子中三个 W_C (Wegner-Wilson loop) 算符: W_{c1}, W_{c2}, W_{c3} 和 x,y 方向的两个't Hooft loop 算符 V_x, V_y 及所对应的 W_y, W_x 的定义如第二章所述^[71], Klein 格子中的对应算符除了 V_x, W_x 外其他和 Torus 中的保持一致, 由于右边界不同我们需要重新定义适合 Klein 格子的 x 方向't Hooft loop 算符 V_x^k , 以及 x 方向相应的 W_x^k 。

在 $g = 0$ 的起始基态, Torus 格子和 Klein 格子中分别有 $Z_t = -9, Z_k = -9$, 且两种格子各自选其 $V_x = +1, V_y = +1$ 和 $V_x^k = +1, V_y = +1$ 的起始基态^[71]。另

外,在 $g = 0$ 处的起始基态 $|\psi_0\rangle$ 要满足 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 。在 $m \times n$ 大小的 Torus 和 Klein 格子中, $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle$ 各自包含 $S_0 = 2^{2mn}/(2^{mn}-1)$ 个叠加的分量 $|\phi_i\rangle$, 两个格子的每一个 $|\phi_i\rangle$ 分别有 $Z_t = -9, Z_k = -9$ 。这个起始基态也是一个闭弦凝聚态, 每个 $|\phi_i\rangle$ 对应一种闭弦配置构型^[5], 所以起始基态中总共有 S_0 中叠加的闭弦配置。

在 $g = 0$ 的起始基态, 值得注意的是, 在 Torus 格子基态中测量的 Z_k 是-7, 而在 Klein 格子基态中测量的 Z_t 也是-7。这是由于 $g = 0$ 时 Torus 格子基态有一半的叠加闭弦配置分量 ($|\phi_i\rangle, Z_t = -9$) 不再是 Klein 格子基态中的叠加闭弦配置分量, 而是 Klein 格子中 $Z_k = -5$ 的态。从弦网凝聚理论的角度看, 在 $g = 0$ 时, Torus 格子基态中有一半的闭合弦配置构型在 Klein 格子中不再闭合, 这是由于格子右边界的变化断裂了这些闭合弦。这一断裂在 Torus 格子中形成一对由开弦连接的边界 vison。这一现象就是下文所述拓扑相变的根源。具体分析, Torus 格子基态中所有的闭弦都可以用其 V_x, V_y 作用于不跨越边界(这里称跨越某边界 0, 2, ... 等偶数次的为不跨越该边界, 因为其都可以通过规范算符 G 作用后变为跨越 0 次)的闭弦制备出来, 所以其闭弦配置共分成 4 类: 1) 不跨越边界的, 2) V_x 作用跨越右边界的, 3) V_y 作用跨越上边界的, 4) V_x, V_y 同时作用跨越两个边界的。这四类每类的闭弦配置数量都相等均为 $S_0/4$, 其中第 2 和 4 类受右边界及其关联的 V_x 影响而断裂, 因此刚好一半。

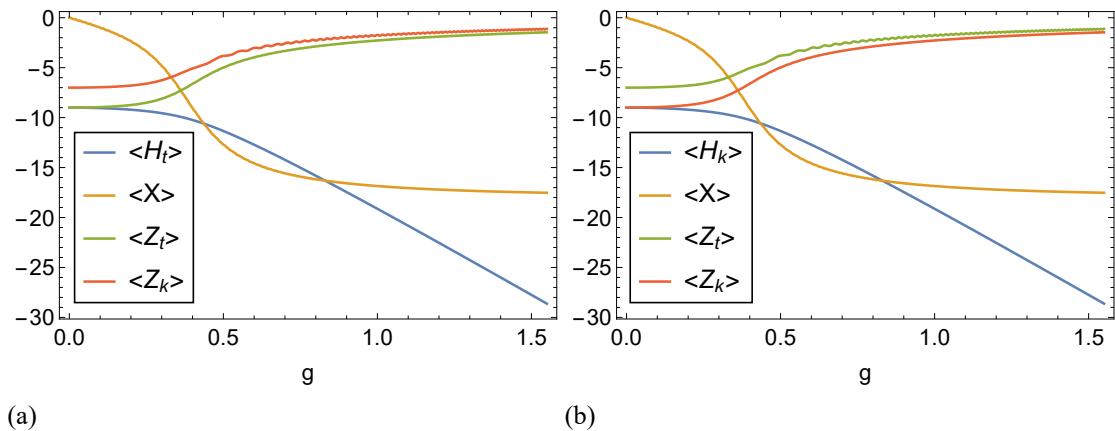


图 3-2: $\langle H_t \rangle, \langle H_k \rangle, \langle Z_t \rangle, \langle Z_k \rangle, \langle X \rangle$ 随着 g 改变的量子相变曲线, g 从 0 到 1.5, 其步长 $g_s = 0.001$ 。相变点大约在 $g_c \approx 0.380$ 。(a) Torus 格子下的量子相变曲线。(b) Klein 格子下的量子相变曲线。

3.3 随着 λ 改变格子从 **Torus** 变化到 **Klein** 诱发的一阶拓扑量子相变

量子模拟方案参考本章量子模拟方法部分, 我们首先研究 $g_w = 0.1$ 的情况, 结果如图3-3 和图3-4所示。

随着 λ 增加, 在 $\lambda_c = 0.5$ 处, 系统从 Torus 格子的基态突变为 Klein 格子的基态, 这从 $\langle Z_t \rangle$ 和 $\langle Z_k \rangle$ 的变化可以区分出。 $\langle Z_t \rangle, \langle H_t \rangle$ 对 λ 的导数在 $\lambda_c = 0.5$ 左右发散。然而, 局域的变量 $\langle \sigma_z \rangle = 0$ 在 λ_c 附近没有变化, 这说明在相变过程中局域对称性受到了保护。这些都是拓扑相变的明显信号^[2,10]。此外, 从 $\langle Z_t \rangle, \langle H_t \rangle$ 导数可以看出, 该相变也是一阶相变。我们可以使用 Z_t 作为序参量来描述相变。 Z_t 曲线显示, 由于闭合弦的断裂, 格子中右边界出现了一对边界 vison。

从图3-4中可以看出, W_C 和 V_x 也显示出了系统在 λ_c 处的相变信号。定义在 Torus 格子中的 $\langle V_x \rangle$ 从 +1 开始, 然后振荡, 经过相变后, 趋向于 0。由于格子拓扑结构的变化不会影响 V_y , 所以 $\langle V_y \rangle$ 保持 +1 不变。在退禁闭相 $g=0$ 时需要注意在 Torus 格子中有 $V_x = \pm 1, V_y = \pm 1$ 这 4 个简并基态 (GSD=4), 但在 Klein 格子中只有 $V_x^k = +1, V_y^k = \pm 1$ 这 2 个简并基态 (GSD=2)。

然后, 我们研究其他 g_w 的情况。

图3-5 展示了对于较小的 g_w , $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 增加经历了两次跳变。在第一次跳变, $\langle Z_t \rangle$ 没有进入 -7, 而是停留在一个平台。该平台高度随着 g_w 而变化。这是由于 λ 随着时间 t 变化过快造成的。因为对于较小的 g , X 项对 link 上量子比特的翻转作用是非常弱的, 所以它需要更长的时间停留在相变点 λ_c 附近来等待相变彻底完成。

对于较大的 g_w 比如 0.4, 1.0, $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 增加没有突变, 这是因为当 g_w 大于 g_c 时系统进入了禁闭相。

3.4 相图

为了更全面地了解上述相变特征, 我们需要了解各种 g_w 下的相变曲线如图3-6所示, 然后利用这些相变曲线形成一个相图如图3-7所示。在退禁闭相阶段即 g_w 小于 g_c 时, $\langle Z_t \rangle$ 被划分为 -7 和 -9 两个不同的区域, 这两个区域是两个稳定的相。在 g_w 小于 0.05 和 λ 大于 0.5 的区域, 存在一个 $\langle Z_t \rangle$ 的上升斜坡。在这一斜坡区域, $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 的增加跳变了两次, 这是由于 λ 随时间 t 变化过快造成的。在禁闭相阶段既 g_w 大于 g_c 时, 系统随着 λ 的增长没有相变发生。

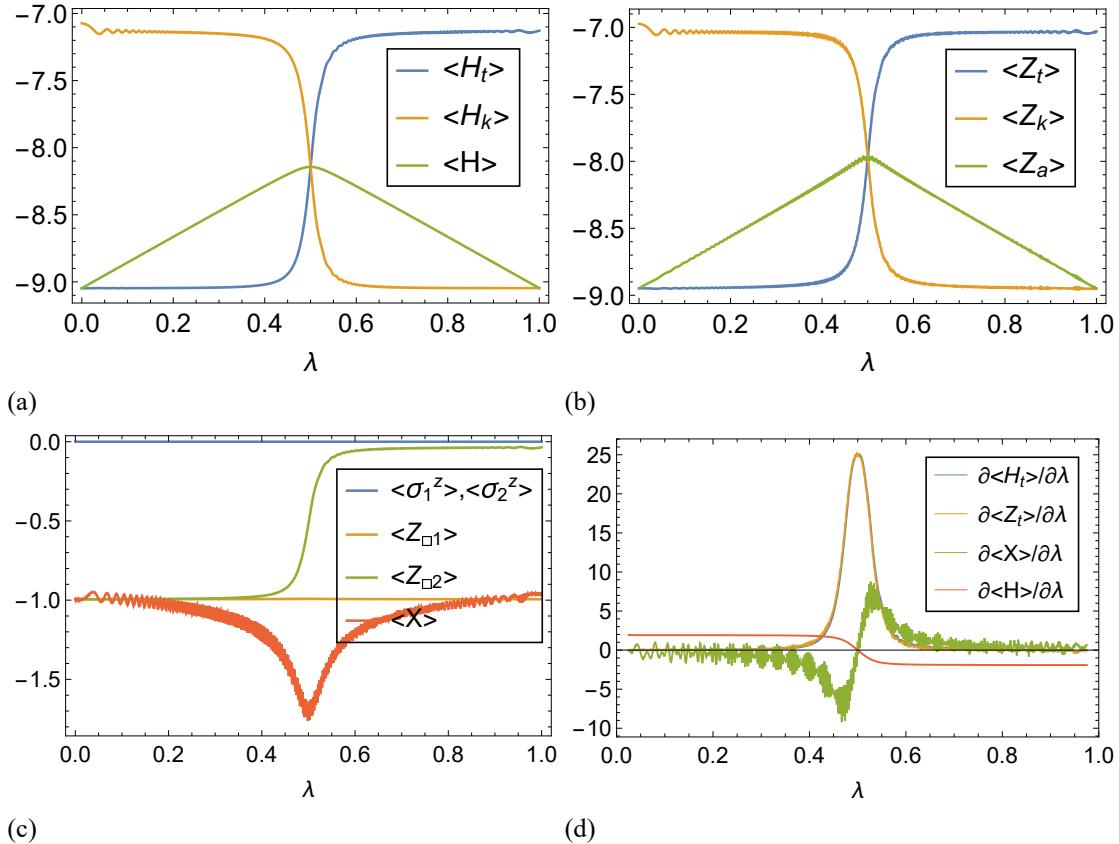


图 3-3: 在 $g_w = 0.1$ 下, 系统能量随着 λ 变化的量子相变曲线, λ 从 0 到 1, 其步长 $\lambda_s = 0.001$ 。(a) $\langle H \rangle, \langle H_t \rangle, \langle H_k \rangle$ 曲线。(b) $\langle Z \rangle, \langle Z_t \rangle, \langle Z_k \rangle$ 曲线。(c) $\langle X \rangle, \langle \sigma_l^z \rangle, \langle Z_{\square l} \rangle$ 曲线, $\langle \sigma_l^z \rangle$ 是编号第 l 个 link 的 $\langle \sigma^z \rangle$ 。 $\langle Z_{\square 1} \rangle$ 是 $\square \{7, 14, 9, 8\}$ 的 $\langle Z_{\square} \rangle$ 。 $\langle Z_{\square 2} \rangle$ 是 $\square \{13, 2, 15, 14\}$ 的 $\langle Z_{\square} \rangle$ 。(d) $\langle H \rangle, \langle H_t \rangle, \langle Z_t \rangle, \langle X \rangle$ 导数随着 λ 的变化曲线。

3.5 从不同退禁闭相简并基态出发的拓扑量子相变

Torus 格子在 $g = 0$ 时有 4 个简并的基态 (GSD=4): $V_x = \pm 1, V_y = \pm 1$ 。基态 $V_x = +1, V_y = +1$ 上面已经进行了研究。接下来我们将从这四个基态分别出发对比他们的相变行为。

图3-8(a) 显示从总能量 H 的视角看, 这四个基态之间的能隙随着 λ 改变, 但其能隙宽度随着 λ 增加有着不同的变化规律。 $V_x = \pm 1, V_y = +1$ 这两个基态出发最终融合进一个新的基态。 $V_x = \pm 1, V_y = -1$ 这两个基态出发最终融合进另一个新的基态。这两个新的基态是 Klein 格子的 $V_x^k = +1, V_y = \pm 1$ 的两个退禁闭相拓扑简并基态 (GSD=2)。图3-8(c) 显示从 Z 的视角看, $V_x = +1, V_y = \pm 1$ 这两个基态出发的曲线是一致的, 而 $V_x = -1, V_y = \pm 1$ 这两个基态出发的曲线是一致的。这些现象都是由于 V_x 的路径穿越随着 λ 变化的右边界, 而 V_y 不受右边界影响造成的。

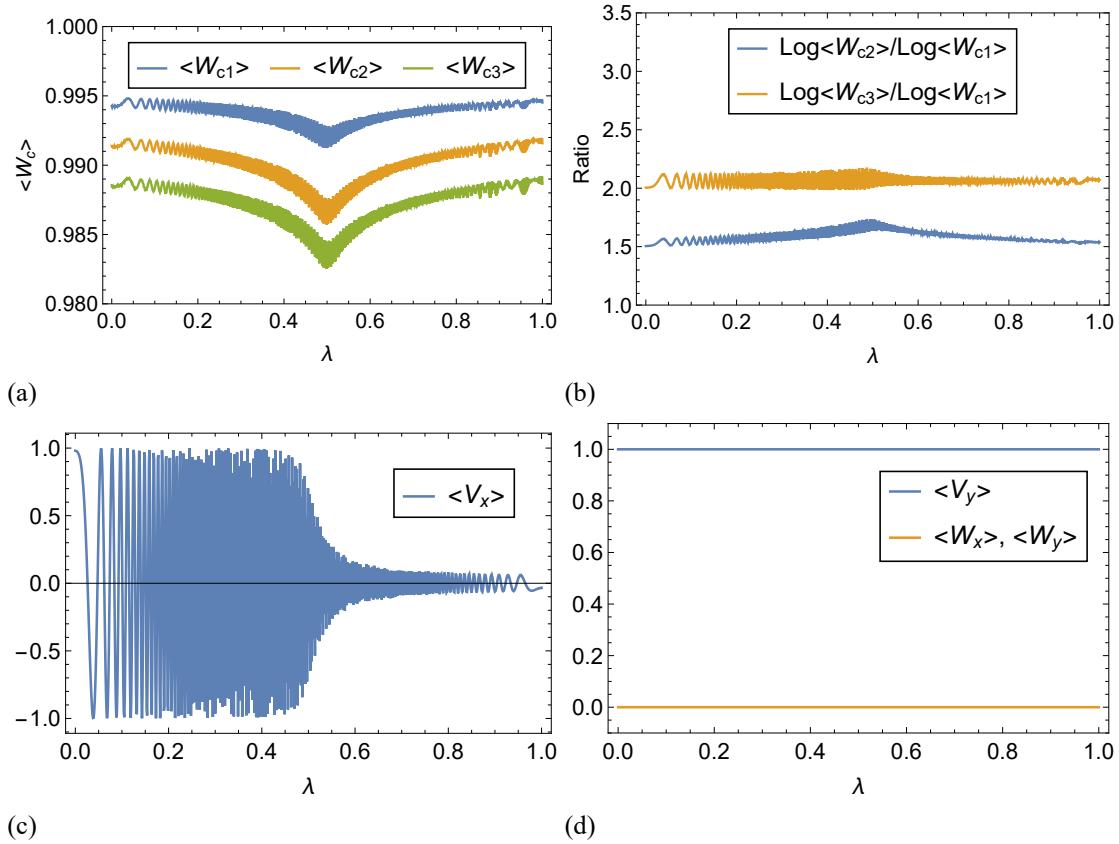


图 3-4: 在 $g_w = 0.1$ 下, 系统 Wegner-Wilson loop 和 V 值随着 λ 变化的量子相变曲线, λ 从 0 到 1, 其步长 $\lambda_s = 0.001$ 。相变点大约在 $\lambda_c = 0.5$ 。(a) 三个 Wegner-Wilson loops 的期望值变化曲线。(b) 三个 Wegner-Wilson loops 的期望值对数比值变化曲线。(c) $\langle V_x \rangle$ 曲线在 λ_c 附近突然变化。(d) $\langle V_y \rangle$ 曲线保持不变。

3.6 量子模拟方法

量子线路和量子绝热模拟方案请参考第二章^[71]。模拟器软件我们使用 QuEST GPU 量子模拟器^[61]。计算硬件我们使用当时最新计算力最强的 Nvidia GPU: Tesla V100-SXM2-32GB。

和第二章一样, 我们使用对称式 Trotter 分解去分解哈密顿, 这种方法比原始的 Trotter 方法更高效, 如公式(2.8)所述每一步的模拟误差为

$$\begin{aligned}\varepsilon(t_s, n, g) &= \|e^{-i(A+B)t_s} - (e^{-iA\frac{t_s}{2n}} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}})^n\| \\ &= \|e^{-i(A+B)t_s} - e^{-iA\frac{t_s}{2n}} (e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{n}})^{n-1} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}}\| \\ &\leqslant \left(\frac{1}{12}g^2N_v * n_l^2 + \frac{1}{24}gN_e * n_p^2\right)\frac{t_s^3}{n^2}\end{aligned}\quad (3.5)$$

对于本章中 A, B 分别对应 Z_a, gX , t_s 是一步的模拟时间, n 是时间 t_s 内的对称式 Trotter 子步数, n_l 为每个 plaquette 包含的 link 数目, n_p 为每个 link 相邻接的 plaquette 数目。为了获得绝热过程, g 在每一个绝热子步连续增加, 如第二章分析

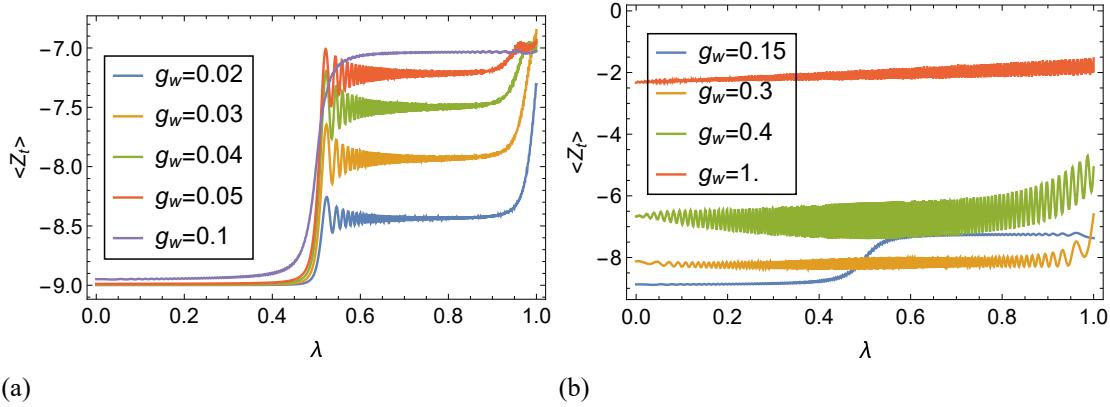


图 3-5: 在不同 g_w 下, $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 的变化曲线, λ 从 0 到 1, 其步长 $\lambda_s = 0.001$ 。相变点 λ_c 在较大 g_w 下消失。(a) $g_w = 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.1$ 。在较小的 g_w , $\langle Z_t \rangle$ 经历了两次跳变。(b) $g_w = 0.15, 0.3, 0.4, 1$ 。在较大 $g_w (g_w > g_c)$, $\langle Z_t \rangle$ 没有跳变。

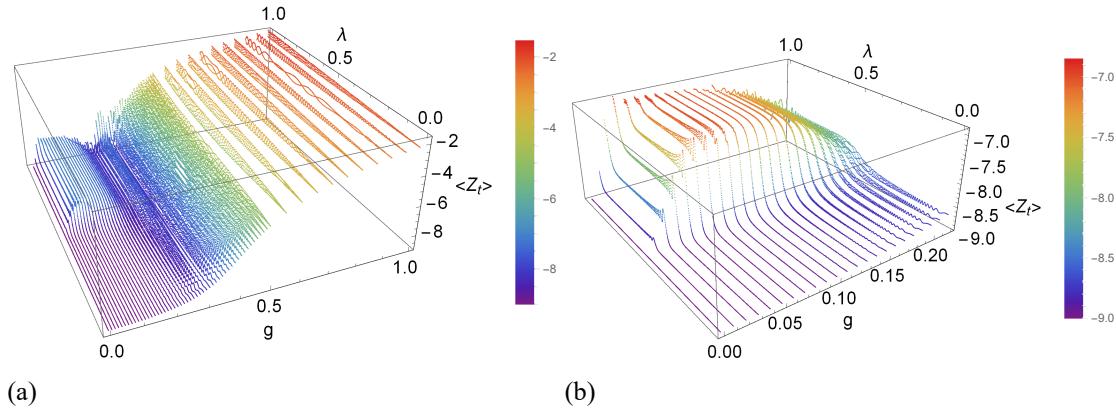


图 3-6: 序参数 $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 的变化曲线, λ 从 0 到 1, 其步长 $\lambda_s = 0.001$, g_w 从 0 到 0.5 间隔为 0.01, 从 0.5 到 1.0 间隔为 0.05。相变点 λ_c 随着 g_w 的增加在 g_c 之后消失。(a) 相变的 3D 散点图, $g_w = 0 - 1.0$ 。(b) 相变的 3D 散点图, $g_w = 0 - 0.23$ 。

这样并不增加每一步的误差, 误差为 $\varepsilon_s(t_s, n, g) \leq \varepsilon(t_s, n, g)$ 。对于本章 $d=2$ 3×3 格子: $N_v = 9$, $N_e = 18$, $n_l = 4$, $n_p = 2$ 。

本章中三个部分的模拟方案分别列出如下:

(1) Torus 和 Klein 格子相变对比部分, $g = 0$ 的模拟起始基态为 $|\psi_0\rangle$, 这个态要满足 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 。在 $m \times n$ 的 Torus 和 Klein 格子, 起始态 $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle$ 均包含 $S_0 = 2^{2mn}/(2^{mn-1})$ 个叠加的基矢成分 $|\phi_i\rangle$ 。两个格子中的各自起始基态分别对应其 $(V_x = +1, V_y = +1)$ 的基态和 $(V_x^k = +1, V_y = +1)$ 的基态, 其制备方法参考第二章。然后我们从 0 到 2 绝热地增加 g , 每一步为 $g_s = 0.001, t_s = 0.1, n_s = 100$ 。参考公式(2.10)可知到最后总共的累积误差约 $3.8 * 10^{-3}$ 。

(2) 获取相图部分。格子拓扑从 Torus 到 Klein 绝热变化的模拟, 我们先从 Torus 格子 ($V_x = +1, V_y = +1$) 的起始基态开始, 从 0 增加 g 到 g_w 停下来, 然后从 0 到 1 增加 λ 完成从 Torus 到 Klein 的哈密顿转变。相图部分我们分别从 0 到 1 增加 g_w 得出多条曲线。 g 增加过程的绝热步为 $g_s = 0.001, t_s = 1, n_s = 1000; \lambda$

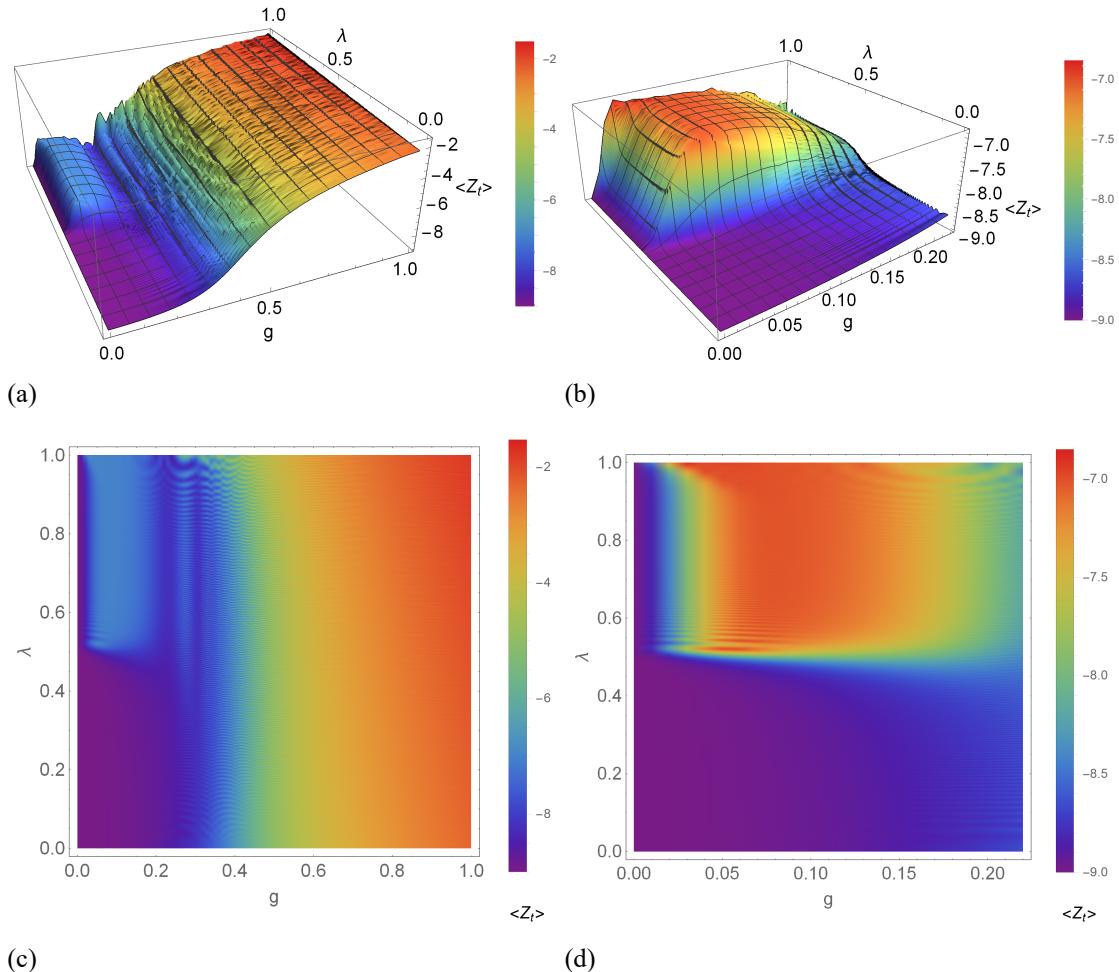


图 3-7: 相图。序参数 $\langle Z_t \rangle$ 随着 λ 的变化曲线, λ 从 0 到 1, 其步长 $\lambda_s = 0.001$, g_w 从 0 到 0.5 间隔为 0.01, 从 0.5 到 1.0 间隔为 0.05。相变点 λ_c 随着 g_w 的增加在 g_c 之后消失。(a) 相图的 3D 表面图, $g_w = 0 - 1.0$ 。(b) 相图的 3D 表面图, $g_w = 0 - 0.23$ 。(c) 相图的 2D 密度图, $g_w = 0 - 1.0$ 。(d) 相图的 2D 密度图, $g_w = 0 - 0.23$ 。

增加过程的绝热步为 $\lambda_s = 0.001, t_s = 1, n_s = 1000$ 。 t_s, n_s 为每一步的时间和对称式 Trotter 子步数目。参考公式(2.10)可知总共的累积误差是

$$\varepsilon_{all}(g_w) = \sum_{g=g_s}^{g_w} \varepsilon_s(t_s, n_s, g) + \sum_{\lambda=\lambda_s}^1 \varepsilon_s(t_s, n_s, g_w)$$

可见 $\varepsilon_{all}(g_w)$ 随着 g_w 而增加。其中最大的 $\varepsilon_{all}(1.0)$ 约 $2.1 * 10^{-2}$, 而中间的 $\varepsilon_{all}(0.5)$ 约 $3.1 * 10^{-3}$ 。

(3) 从不同退禁闭相简并基态出发的对比部分, 模拟过程类似于 (2)。出发所使用的 Torus 格子中其他三个简并的起始基态 ($V_x = -1, V_y = +1$), ($V_x = +1, V_y = -1$), ($V_x = -1, V_y = -1$) 的制备按照第二章中的方法进行^[71]。

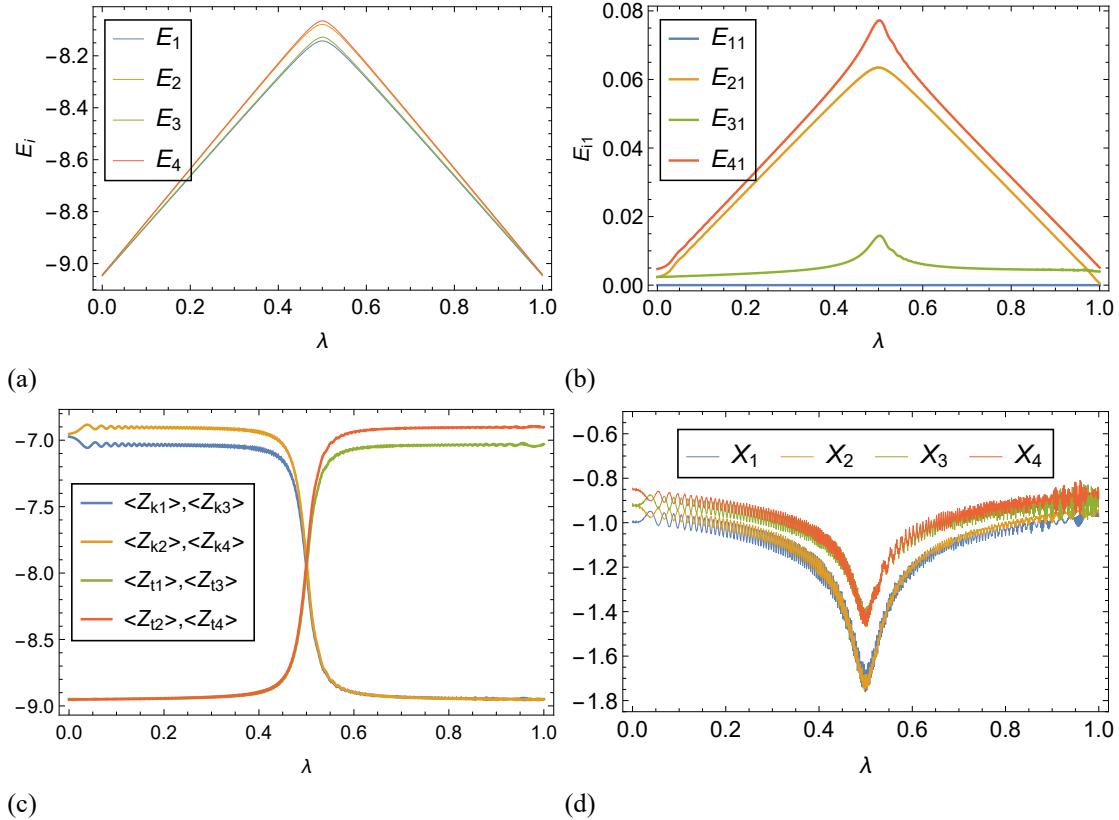


图 3-8: 在 $g_w = 0.1$ 下, 从 Torus 四个拓扑简并基态 1,2,3,4 出发系统随着 λ 的量子相变曲线, λ 从 0 到 1, 步长为 $\lambda_s = 0.001$ 。相变点大约是 $\lambda_c = 0.5$ 。1: ($Vx = +1, Vy = +1$); 2: ($Vx = -1, Vy = +1$); 3: ($Vx = +1, Vy = -1$); 4: ($Vx = -1, Vy = -1$)。 (a) E_i 曲线。 $E_i = \langle H_i \rangle$ 。(b) E_{i1} 曲线。 $E_{i1} = \langle H_i - H_1 \rangle$ 。(c) $\langle Z_{ti} \rangle, \langle Z_{ki} \rangle$ 曲线。 i 代表第 i 个基态。(d) $\langle X_i \rangle$ 曲线。 i 代表第 i 个基态。

3.7 小结

对于量子 Z_2 格点规范理论, 系统在不同的格子拓扑下具有不同的拓扑相。利用绝热量子模拟方法, 我们对量子 Z_2 格点规范理论的格子拓扑从 Torus 到 Klein 瓶缓慢变化的过程进行了研究。研究发现了由格子拓扑变化所引起的新型拓扑量子相变。本章内容推动了对 Z_2 格点规理论的这一新型拓扑量子相变的研究并加深了对 Z_2 规范理论和空间拓扑结构关系的理解。由于格子拓扑反映了格点连接的空间结构, 其他各种类型的拓扑结构改变也可以从本研究中得到启发, 预期将发现更多新的丰富多彩的物理现象。

第 4 章 量子 Z_2 格点规范理论在图论 HCP 问题中的应用

4.1 Torus 格子中 Z_2 退禁闭相基态的闭弦和哈密顿回路

量子 Z_2 规范理论的哈密顿为^[2,3,71]:

$$H = Z + gX, \quad Z = - \sum_{\square} \prod_{l \in \square} \sigma_l^z, \quad X = - \sum_l \sigma_l^x \quad (4.1)$$

$$Z = \sum_{\square} Z_{\square}, \quad Z_{\square} = - \prod_{l \in \square} \sigma_l^z \quad (4.2)$$

其中的 \square 表示了格子里面的基本小方块 plaquette。 l 代表格子中临接两个 plaquette 的边 link。

对于 3×3 Torus 格子, 其边界条件如图4-1(a) 所示。当 g 相对较小时, 系统基态处于退禁闭态; 当 g 较大时, 系统的基态处于有禁闭态。在此期间, 经历了一个拓扑量子相变, 相变的临界参数为 g_c 。

当 $g = 0$ 。起始基态是 $|\psi_0\rangle$ 。起始基态 $|\psi_0\rangle$ 是 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 所以 $Z = -9$ 。在 $m \times n$ 的 Torus 格子里面有 $N_v = mn$ 个 plaquette, $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle$ 包含 $S_0 = 2^{N_e}/(2^{N_v-1})$ 叠加的基矢配置 $|\phi_i\rangle$, 且每个 $|\phi_i\rangle$ 都有 $Z = -9$ 。 $N_e = 2N_v$ 是 Torus 格子的 link 数。在该格子里, 穿过 $\sigma_z = -1$ link 的闭合圈形成一条闭弦^[5]。这个起始基态是一个闭弦凝聚态, 每一个 $|\phi_i\rangle$ 对应一种闭弦配置^[5]。所以在这个起始基态总共有 S_0 个等权叠加的闭弦配置。图4-2展示了其中两个配置。在配置 Fig.4-2(a) 中, 一根单独的闭合弦穿过了整个格子的所有 N_v 个 plaquette, 所以它是一条哈密顿回路。在配置 Fig.4-2(b) 中, 两根闭合弦各自穿过 N_v 个 plaquette 中部分 plaquette, 所以里面没有哈密顿回路。如果我们映射一个 plaquette 到图的一个顶点, 我们就可以得到一个拥有 N_v 个顶点的无向无权图如图4-1(b) 所示。可以

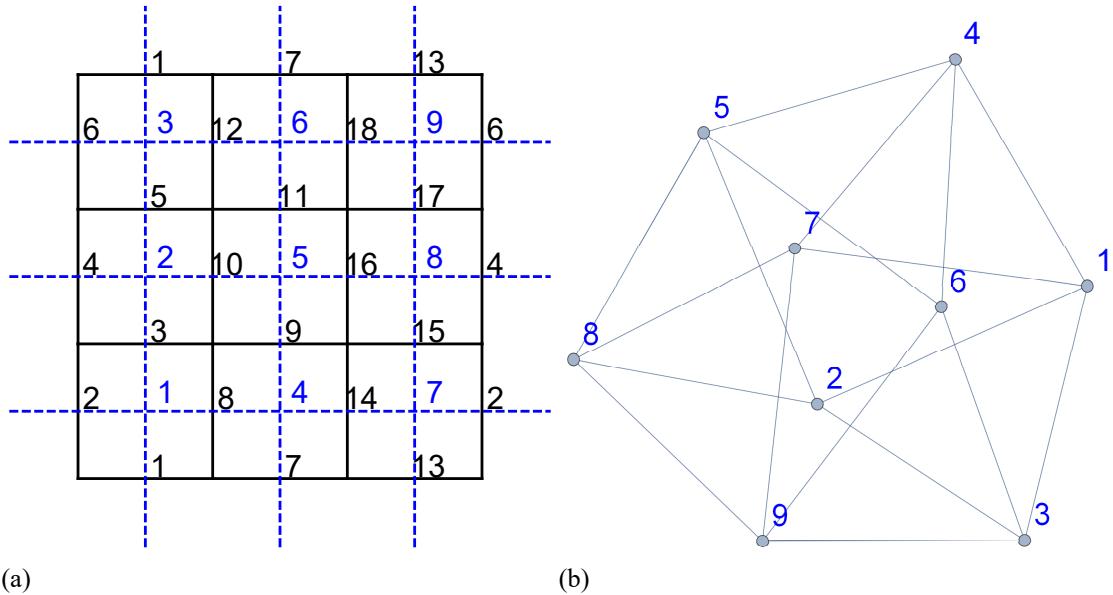


图 4-1: Torus 格子和其所映射图的对应。(a) 3×3 Torus 格子。黑色实线是格子的边, 蓝色虚线对应图的边。黑色的数字是格子的边号, 蓝色的数字对应图的顶点号。(b) 3×3 tours 格子所映射的图。

看出在退禁闭相, 我们只需要在尺寸大小 S_0 的配置空间中搜索来决定这 N_v 个 plaquette 组成的格子里面有没有哈密顿回路。和原始的搜索配置空间尺寸 $N_v!$ ^[21] 相比可极大地降低搜索复杂度。

4.2 图和格子的映射关系

我们可以看到, 通过将格子的 plaquette 与图的顶点相对应, 我们可以将 Torus 格子映射到一个图中, 如图4-1所示。格子中两个相邻的 plaquette 被映射到图中的两个相邻的顶点。格子中分割两个 plaquette 的边被映射到图中连接两个顶点的边。同理反过来, 我们也可以把任何图形映射到一个格子上。图中两个相邻的顶点被映射到格子中的两个相邻的 plaquette。当然此时的 plaquette 不一定是正方形了, 根据图顶点度数可能是各种多边形, 但我们仍沿用 plaquette 的叫法。图中连接两个顶点的边被映射到格子中临接两个 plaquette 的 link。这样一来, 图的 HCP 问题就变成了对应格子的 HCP 问题。对于有 N_v 个顶点和 N_e 条边的图所映射的格子, 在它的闭弦凝聚态一共有 $S_0 = O(2^{N_e}/2^{N_v})$ 个闭弦配置 $|\phi_i\rangle$, 因为在格子中所有 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 。

这种映射很有意义, 一方面可获得图所对应格子的闭弦凝聚态, 另一方面, 图的各种性质必然也会影响其所对应格子的拓扑量子相变临界参数 g_c , 从而揭示图的性质。如此, 图论问题和拓扑量子相变紧密地联系在了一起。为了便于讨论, 我们定义了几个量来描述图的属性。 N_v 是图顶点的数量。 N_e 是图的边数。 N_{hc} 是

图的哈密顿回路数量。 $\text{Max}(\text{Deg})$ 是图中顶点的最大度数。 $\text{Min}(\text{Deg})$ 是图中顶点的最小度数。

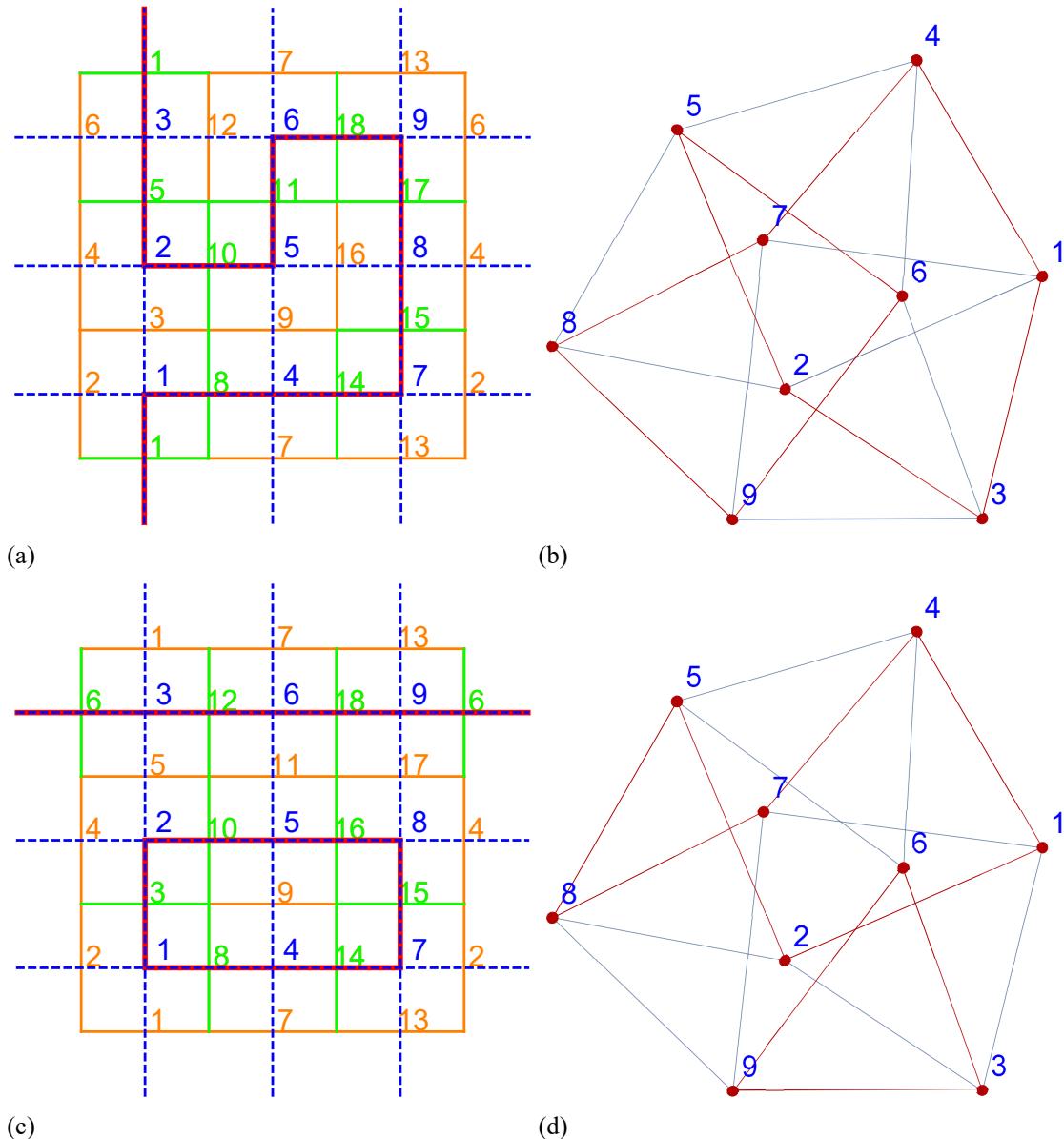


图 4-2: Torus 格子的闭弦与图的回路之间的对应关系。(a) 在 $g=0$ 时, Z_2 基态的一种闭弦配置。在这里只有一根闭弦(红色的路径所示)。格子中绿色的边处于 $|1\rangle$ 状态, 橙色的边处于 $|0\rangle$ 状态。(b) 对应 (a) 中格子闭弦的图中的哈密顿回路(红色回路)。(c) 在 $g=0$ 处, Z_2 基态的另一种配置, 这里有两根闭弦(红色路径所示)。格子中绿色的边处于 $|0\rangle$ 状态, 橙色的边处于 $|1\rangle$ 状态。(d) 对应 (c) 中格子闭弦的图中的闭合回路(红色回路)

4.3 基于 Z_2 拓扑量子相变获取闭弦凝聚态的量子算法及其计算复杂度

图映射为格子后, 其格子的闭弦凝聚态可通过对 Z_2 拓扑量子相变的绝热量子模拟来实现。该过程的计算复杂度来自于绝热量子模拟的 Trotter 分解步数。而闭弦凝聚态是各种闭弦回路的等权叠加态, 其叠加成分中包含有哈密回路, 我们可以将包含哈密顿回路的叠加成分称作哈密顿回路态。

闭弦凝聚态可以通过量子绝热演化从等权叠加态获得^[31,71]。因为格子所有 link 的等权叠加态是 $g = +\infty$ 的基态^[3], 从该态出发如果我们逐步绝热地降低 g , 拓扑量子相变临界参数 g_c 之后便可得到需要的闭弦凝聚态。这个过程等价于绝热演化哈密顿 $H_\lambda = \lambda Z + X$, $\lambda = 0 \rightarrow \lambda_c$, 这里 $\lambda = \frac{1}{g}$, $\lambda_c = \frac{1}{g_c}$ 。根据 Z_2 规范理论绝热量子模拟的绝热条件要求, 实现拓扑量子相变的时间量尺度为 $O(\sqrt{N_e})$ ^[31], 那么可设置匀速增加 λ 模拟到相变点 λ_c 所需时间 $t = O(\sqrt{N_e} \lambda_c)$ 。对于连通图而言 $N_v \leq N_e \leq N_v(N_v - 1)/2$, 每个顶点的边数(即其对应 plaquette 的 link 数) $n_l = O(N_v)$, 每个边连接的顶点数(即其对应 link 临界的 plaquette 数) $n_p = 2$ 。根据本文所使用的对称式 Trotter 误差公式(2.10)可得模拟到相变点 λ_c 的累计误差

$$\varepsilon = O\left(\frac{1}{N_{ss}^2} N_e^{3/2} (N_v^3 + N_e \lambda_c) \lambda_c^4\right) \quad (4.3)$$

N_{ss} 为对称式 Trotter 总的子步数。因此这一步所需的复杂度 N_{ss} 为 $O_1 = O(\sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + N_e \lambda_c) \lambda_c^4}) = O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ ^[25,71,92]。其中, 每个格子的相变临界参数 $\lambda_c = 1/g_c$ 是相对固定的量。

事实上抛去物理意义, 通用量子计算机上可以使用哈密顿 $H_\lambda = \lambda Z + (1 - \lambda)X$ 通过从 0-1 绝热改变 λ 来制备闭弦凝聚态。如此以来 $0 \leq \lambda_c \leq 1$, $\frac{1}{g_c} = \lambda_c = O(1)$, 复杂度为 $O_1 = O(\sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} N_v^3})$ 。当然该哈密顿变化在真实量子物理系统可能不是容易实现的, 真实系统中 λ 往往是场的强度, 增加 Z 系数同时不能随意降低 X 系数。

由于闭弦凝聚态是 S_0 个闭弦配置的等权叠加态, 包含了哈密顿回路态。 S_0 远小于 2^{N_e} 。直接测量格子的话有 $O(N_{hc}/S_0)$ 概率获得哈密顿回路态, 一些样本图的 N_{hc} 均值和 N_e 关系如图4-10(b) 所示。但显然, 有可能发展出在闭弦凝聚态寻找哈密顿回路的更优的搜索算法, 对此问题我们保持开放性。

如上节所述, 图的各种性质可能会影响其所对应格子的拓扑量子相变临界参数 g_c , 从而反过来 g_c 有可能揭示图的性质。如果 g_c 大小可以反应出哈密顿回路的数目 N_{hc} , 那么就有可能通过拓扑量子相变来推断哈密顿回路数目。当然求 g_c

需要测量 H , 需要额外的测量复杂度 O_M , 根据第二章中的相估计测能量方法可得复杂度和 O_1 一个量级, $O_M = O_1$ 。这样一个时间复杂度 $O = O_1 + O_M = O_1$ 的获取 g_c 的量子算法就找到了。由于复杂度中包含 $\lambda_c = \frac{1}{g_c}$, 不同的图对应的格子 g_c 可能不同。因此, 我们需要探讨图的属性比如 N_{hc} 等对 g_c 的影响和 g_c 和 N_e 之间的关系以分析该复杂度。

4.4 Z_2 拓扑相变临界参数 g_c 和图的关系

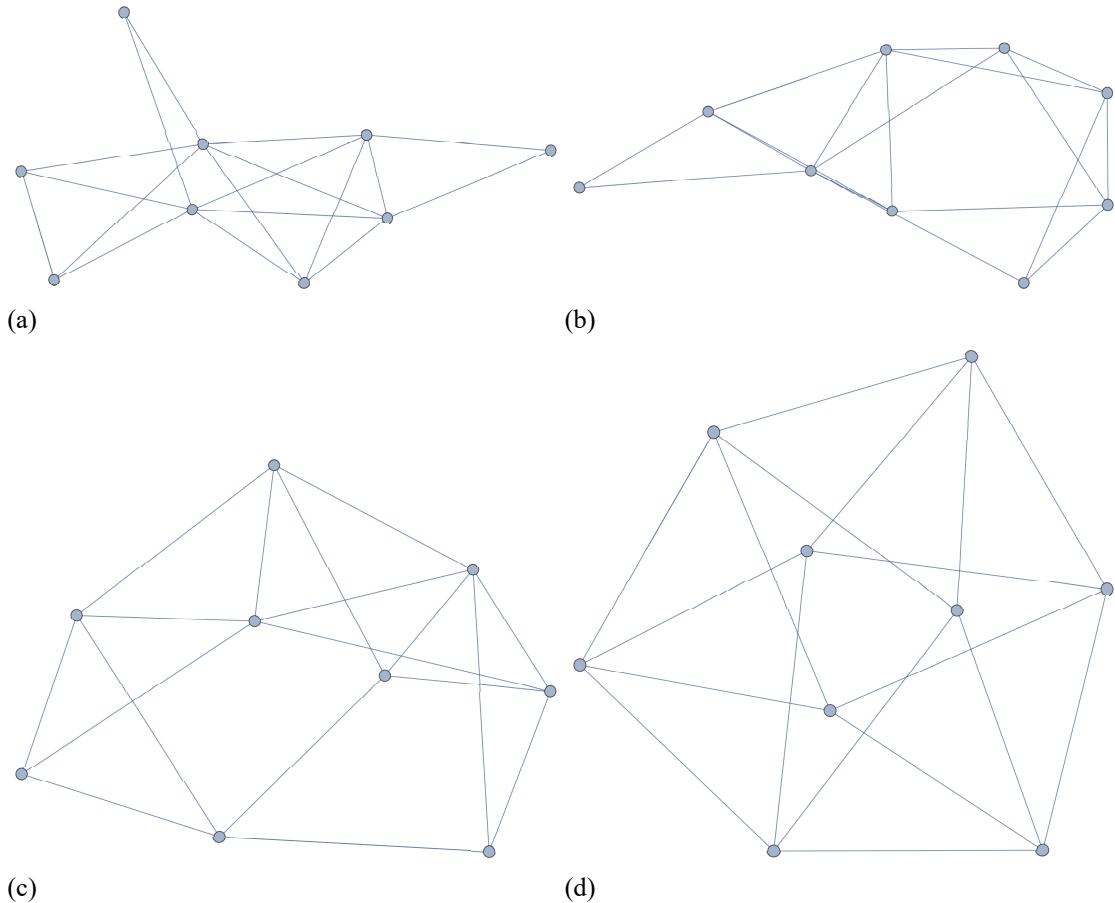


图 4-3: 用于测试 Z_2 拓扑量子相变的临界参数 g_c 的四个不同的图。(a) $G_1 : N_v = 9, N_e = 18, N_{hc} = 0$ 。(b) $G_2 : N_v = 9, N_e = 18, N_{hc} = 10$ 。(c) $G_3 : N_v = 9, N_e = 18, N_{hc} = 30$ 。(d) G_4 : 3×3 Torus 格子所对应的图, $N_v = 9, N_e = 18, N_{hc} = 48$ 。

4.4.1 用四个不同的图来测试临界参数 g_c

为了研究图的属性对相变的影响, 我首先随机的选择四个 $N_v = 9, N_e = 18$ 的图(如图4-4(a-d)所示)来观察其对应格子的相变曲线特征。四个图的 N_{hc} 分别是 $0, 10, 30, 48$, 其中第四个图是 Torus 格子所对应的图。所有的结果在图4-4中列出。我们定义两个 g_c : g_c^H 表示 $\langle H \rangle$ 曲线二阶偏导数的极值点, g_c^z 表示 $\langle Z \rangle$ 曲线一

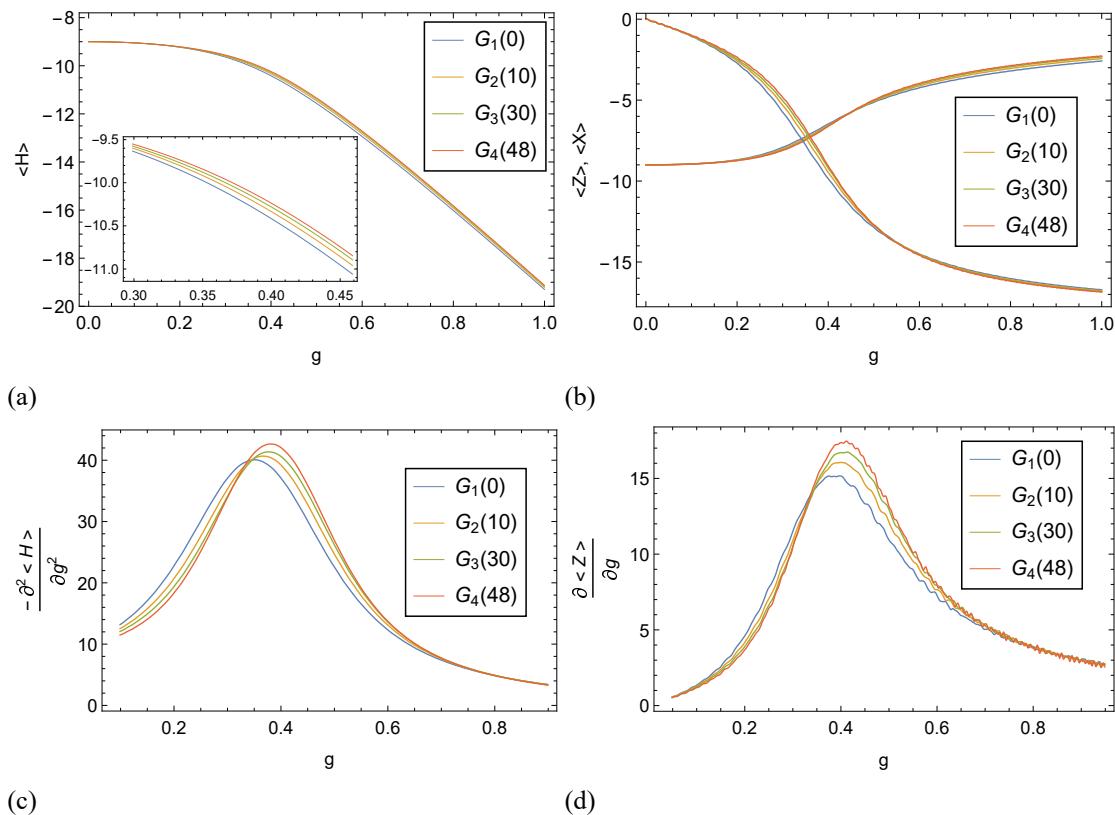


图 4-4: 图4-3中四个测试图所对应格子的 Z_2 拓扑量子相变曲线和临界参数 g_c 。(a-b) 四个测试图对应格子的量子相变曲线 ($\langle H \rangle$, $\langle Z \rangle$, $\langle X \rangle$)。(c) 个测试图对应格子的 $\langle H \rangle$ 二阶导数曲线, 此曲线可以用于决定 g_c^H 。(d) 个测试图对应格子的 $\langle Z \rangle$ 一阶导数曲线, 此曲线可以用于决定 g_c^Z 。

阶偏导数的极值点。偏导数计算参考第二章, 本章取求导窗口长度 $\Delta = 0.1$ 。然后 $\lambda_c^H = \frac{1}{g_c^H}, \lambda_c^Z = \frac{1}{g_c^Z}$ 。可以从图4-4(c-d)看出, 四个相变的临界参数 g_c 随着 N_{hc} 而增长。这显示了图的属性将直接地影响对应格子的相变特性, 下面将详细研究这种影响。

4.4.2 g_c 和图哈密顿回路数量 N_{hc} 的关系

为了研究 N_{hc} 对 g_c 的影响效果, 我们利用 Mathematica 软件生成了两组随机的无向无权连通图, 每个图有 $N_v = 9$ 个顶点, 其 N_{hc} 由 Mathematica 软件计算而得。第一组有 1000 个样本, 每个图有 $N_e = 18$ 条边, 样本的 N_{hc} 分布如图4-5(a) 所示。第二组图有多种边数 $N_e = 16 \sim 22$, 每种 N_e 有 200 个样本, 一共 1400 个样本, 样本的 N_{hc} 分布如图4-5(b) 所示。使用格点 plaquette 和图顶点的对应关系, 每个图都被转换为了其对应的格子。然后使用量子绝热模拟方法观察每个格子随 g 改变的 H 和 Z 曲线, 最后对曲线求导获得临界参数 g_c 。从图4-6可以看出, 当 N_e 固定时 g_c 平均值随着 N_{hc} 稳步增长。特别当 $N_{hc} = 0$ 时, g_c 平均值明显下降。这显示了 N_{hc} 对 g_c 有明显影响。利用这个效应通过拓扑量子相变可以帮助决定一

个图的 N_{hc} 而无需搜索这个图的所有回路。需要完成该拓扑量子相变的量子门数量也就是计算时间复杂度为 $O_1 = O\left(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})}\right)$ 。并且如下一部分要讨论的 $\frac{1}{g_c}$ 随着 N_e 线性增长。这意味着在量子计算机上有可能拥有 O_1 时间复杂度的算法利用 g_c 来判断哈密顿回路的数目。

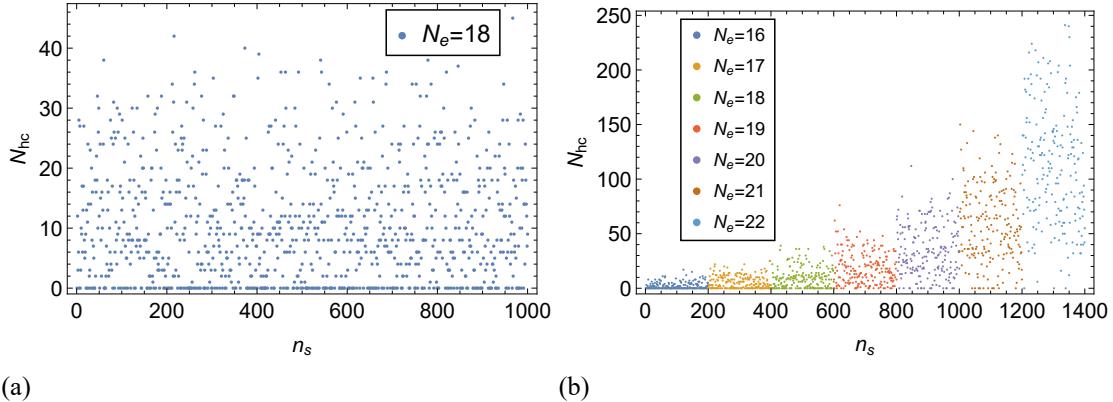


图 4-5: 所有样本 N_{hc} 的分布。 n_s 是样本编号。(a) 第一组一共 1000 个样本, 每个样本边数为 $N_e = 18$ 。(b) 第二组, 每个样本边数为 $N_e = 16 \sim 22$, 每个 N_e 有 200 个样本, 一共 1400 个样本。

4.4.3 g_c 和图边数 N_e 的关系

为了研究 N_e 对 g_c 的影响效果, 我们使用第二组图, 他们有着相同的 N_v 不同的 N_e 。如图4-7所示, 当 N_v 固定时, g_c 平均值随着 N_e 稳步下降。平均而言, 当 N_v 固定时图的顶点之间的连通性是正比于 N_e 。从格子的观点看, 这意味着 plaquette 之间的连接强度是正比于 N_e 。因此, N_e 越大, 相变临界参数 g_c 越低。特别重要地, 当 N_v 固定后, $\lambda_c = \frac{1}{g_c}$ 平均值随着 N_e 线性增长。

4.4.4 g_c 和图顶点度数的关系

为了研究图顶点度数对 g_c 的影响, 我们同时用这两组图。当 N_e, N_v 固定时, 如图4-8所示, g_c 平均值随着 $\text{Max}(Deg)$ 下降, 随着 $\text{Min}(Deg)$ 增加。 $\text{Max}(Deg)$ 和 $\text{Min}(Deg)$ 反应了图顶点连接的均衡性。平均而言, 当 N_v 和 N_e 固定时, $\text{Max}(Deg)$ 越大, ($\text{Min}(Deg)$) 越小。所以图4-8(a,c) 和图4-8(b,d) 的数据是互相呼应的。另外平均上当 N_v 和 N_e 固定时, $\text{Max}(Deg)$ 越大, N_{hc} 越小。所以图4-8和图4-6的数据也是互相一致的。

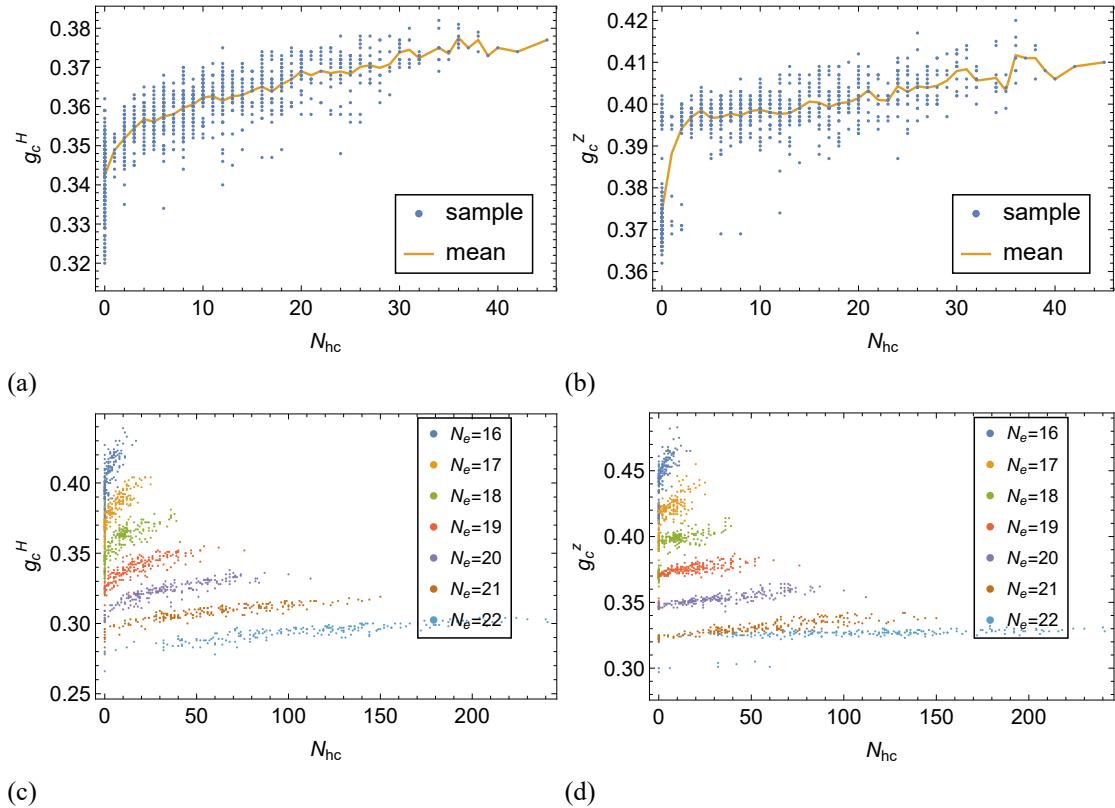


图 4-6: 临界参数 g_c 随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化。(a) 在 $N_e = 18$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化。(b) 在 $N_e = 18$ 样本中, 临界参数 g_c^Z 随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化。(c) 在 $N_e = 16 \sim 22$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化。(d) 在 $N_e = 16 \sim 22$ 样本中, 临界参数 g_c^Z 随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化。

4.4.5 拟合分析

以上部分, 结合数值模拟结果我们对 g_c 随着图的各种属性的变化进行了定性分析, 揭示了图属性对 g_c 有明显的影响。下面我们将对其中两个比较关键的结果进行定量的拟合分析。

1) g_c^H 均值随着 N_{hc} 变化曲线的拟合分析: 借助 N_{hc} 对 g_c 的影响可以反过用 g_c 来揭示图中哈密顿回路的数量, 这是本章量子算法的一个核心, 因此寻找 g_c 和 N_{hc} 的定量关系就显得至关重要。根据曲线的形状, 我们发现下面的公式可以得到很好的拟合结果

$$g_c^H = A\sqrt{N_{hc}} + B \quad (4.4)$$

我们采用该公式对两组样本进行了拟合结果如图4-9, 可以看到得到了非常好的拟合效果。这显示了 g_c^H 和 N_{hc} 呈现线性增长关系, 当然这是根据曲线形状经验性拟合的结果, 其中的理论原因尚需要解决。

2) $\lambda_c = \frac{1}{g_c}$ 均值随着 N_e 变化曲线的拟合分析: 上文定性分析可以看到 λ_c^H 和 N_e 呈现线性关系, 我们对其进行线性拟合得到了非常好的结果如图4-10。拟合结

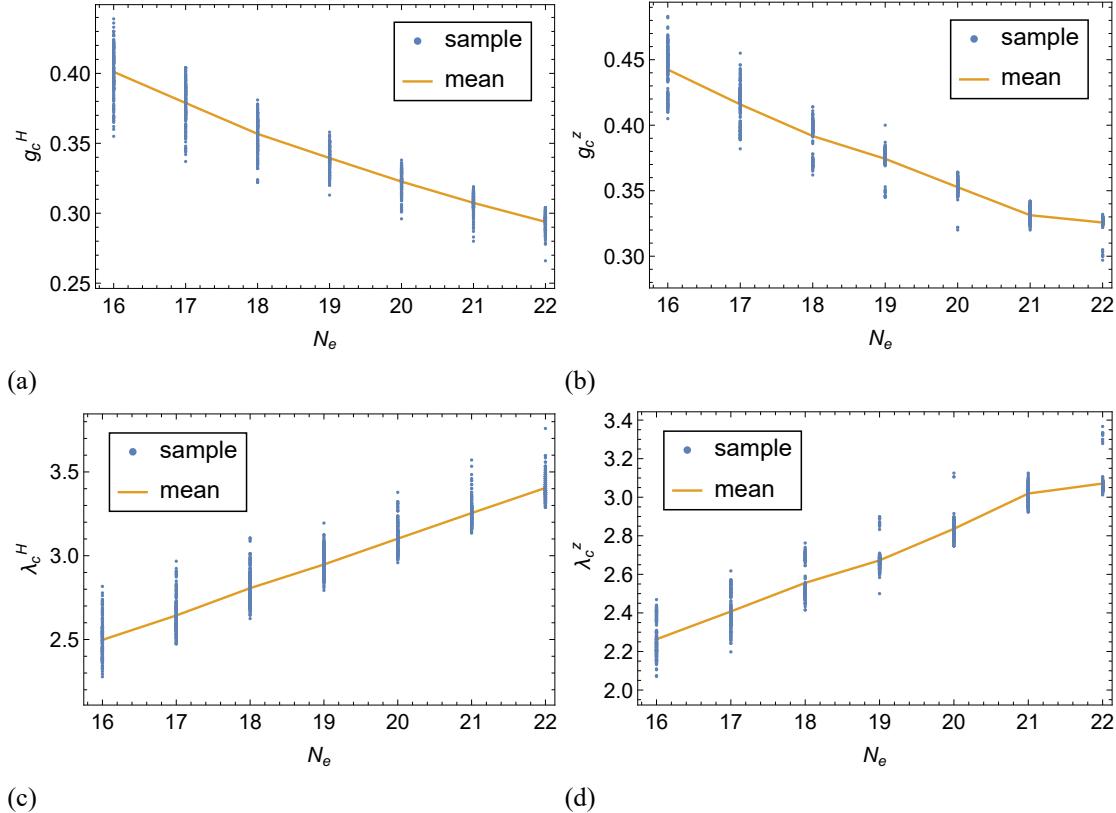


图 4-7: 临界参数 g_c 随着边数 N_e 的变化。(a) 在 $N_e = 16 - 18$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随着边数 N_e 的变化。(b) 在 $N_e = 16 - 18$ 样本中, 临界参数 g_c^Z 随着边数 N_e 的变化。(a) 在 $N_e = 16 - 18$ 样本中, 临界参数 λ_c^H 随着边数 N_e 的变化。(b) 在 $N_e = 16 - 18$ 样本中, 临界参数 λ_c^Z 随着边数 N_e 的变化。

果为 $\lambda_c^H = 0.1513 * N_e + 0.007536$ 。当然由于计算能力限制, 我们模拟的图边数还比较少, 该线性关系需要更多边数的图来验证。

4.5 量子模拟方法

量子线路和量子绝热模拟方案请参考第二章^[71]。模拟器软件我们使用 QuEST GPU 量子模拟器^[61]。计算硬件我们使用最新计算力最强的 Nvidia 显卡: Tesla V100。

和第二章一样, 我们使用对称式 Trotter 分解去分解哈密顿, 这种方法比原始的 Trotter 方法更高效, 如公式(2.8)所述每一步的模拟误差为

$$\begin{aligned} \varepsilon(t_s, n, g) &= \|e^{-i(A+B)t_s} - (e^{-iA\frac{t_s}{2n}} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}})^n\| \\ &= \|e^{-i(A+B)t_s} - e^{-iA\frac{t_s}{2n}} (e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{n}})^{n-1} e^{-iB\frac{t_s}{n}} e^{-iA\frac{t_s}{2n}}\| \\ &\leqslant \left(\frac{1}{12}g^2N_v * n_l^2 + \frac{1}{24}gN_e * n_p^2\right)\frac{t_s^3}{n^2} \end{aligned} \quad (4.5)$$

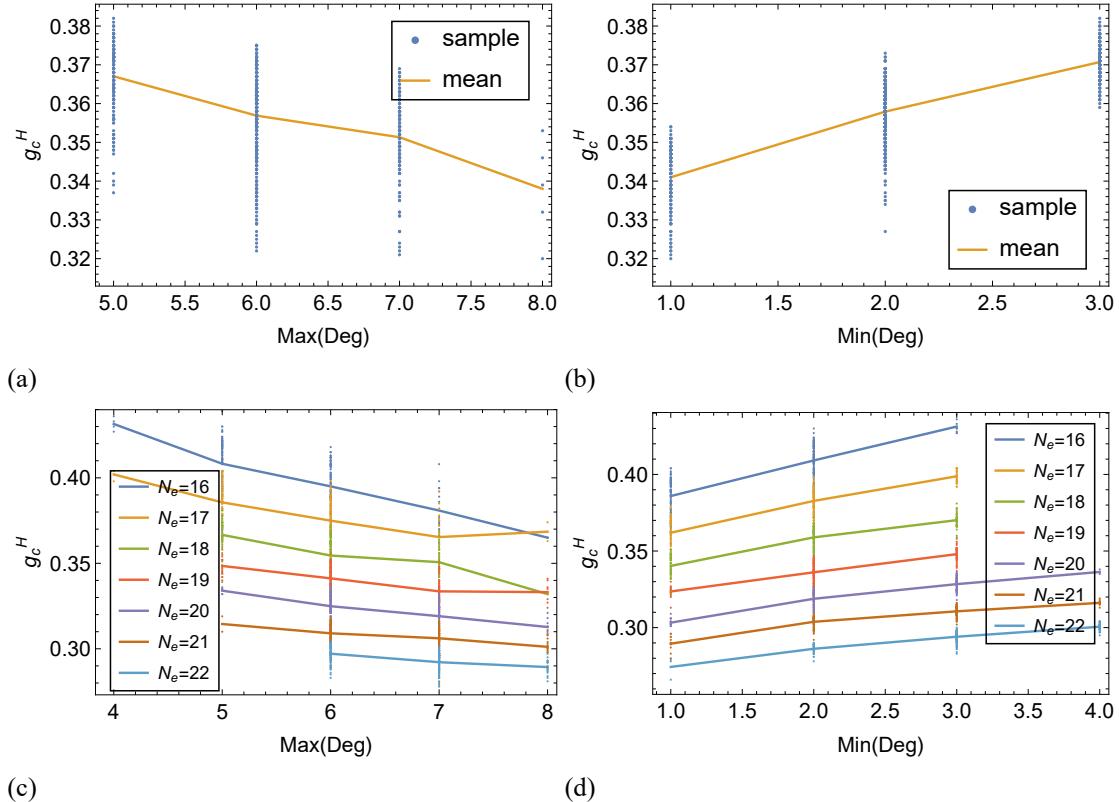


图 4-8: 临界参数 g_c 随着顶点度数的变化。(a) 在 $N_e = 18$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随顶点最大度数 $\text{Max}(Deg)$ 的变化。(b) 在 $N_e = 18$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随顶点最小度数 $\text{Min}(Deg)$ 的变化。(c) 在 $N_e = 16 - 22$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随顶点最大度数 $\text{Max}(Deg)$ 的变化。(d) 在 $N_e = 16 - 22$ 样本中, 临界参数 g_c^H 随顶点最小度数 $\text{Min}(Deg)$ 的变化。

对于本章中 A, B 分别对应 Z, gX, t_s 是模拟时间, n 是时间 t_s 内的对称式 Trotter 子步数。和第二章一样, 为了获得绝热过程, g 随着每一个子步连续增加, 这样不增加每一步误差, 误差为 $\varepsilon_s(t_s, n, g) \leq \varepsilon(t_s, n, g)$ 。对于本章 $d=2$ 由图所映射的格子: $N_v = 9, 16 \leq N_e \leq 22, n_p = 2$ 。 n_l 为每个 plaquette 包含的 link 数量, 对于本章的话就是图中顶点的度数, 由图 4-8 可知平均 $n_l \approx 4$ 。

$g = 0$ 的模拟起始态为 $|\psi_0\rangle$, 这个态 $Z_{\square} = -1, \forall \square$ 。在 $m * n$ 的 torus 格子, 起始态 $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{S_0} |\phi_i\rangle$ 包含 $S_0 = 2^{2mn}/(2^{mn-1})$ 组成基矢成分 $|\phi_i\rangle$ 。对于一个由 N_v 顶点和 N_e 边组成的图所映射的格, 在它的闭弦凝聚态中有 $S_0 = O(2^{N_e}/2^{N_v})$ 个闭弦配置 $|\phi_i\rangle$ 。

我们首先从 0 到 1 绝热地增加 g , 绝热步为 $g_s = 0.001, t_s = 0.1, n_s = 100$ 。 t_s, n_s 为每一步的时间和对称式 Trotter 子步数。总共的累积误差如第二章公式(2.10)所述是 $\varepsilon_{all} = \sum_{g=g_s}^1 \varepsilon_s(t_s, n_s, g)$ 。可以计算出对于所有图映射的格子, ε_{all} 小于最多边数 $N_e = 22$ 的 $5.8 * 10^{-4}$ 。

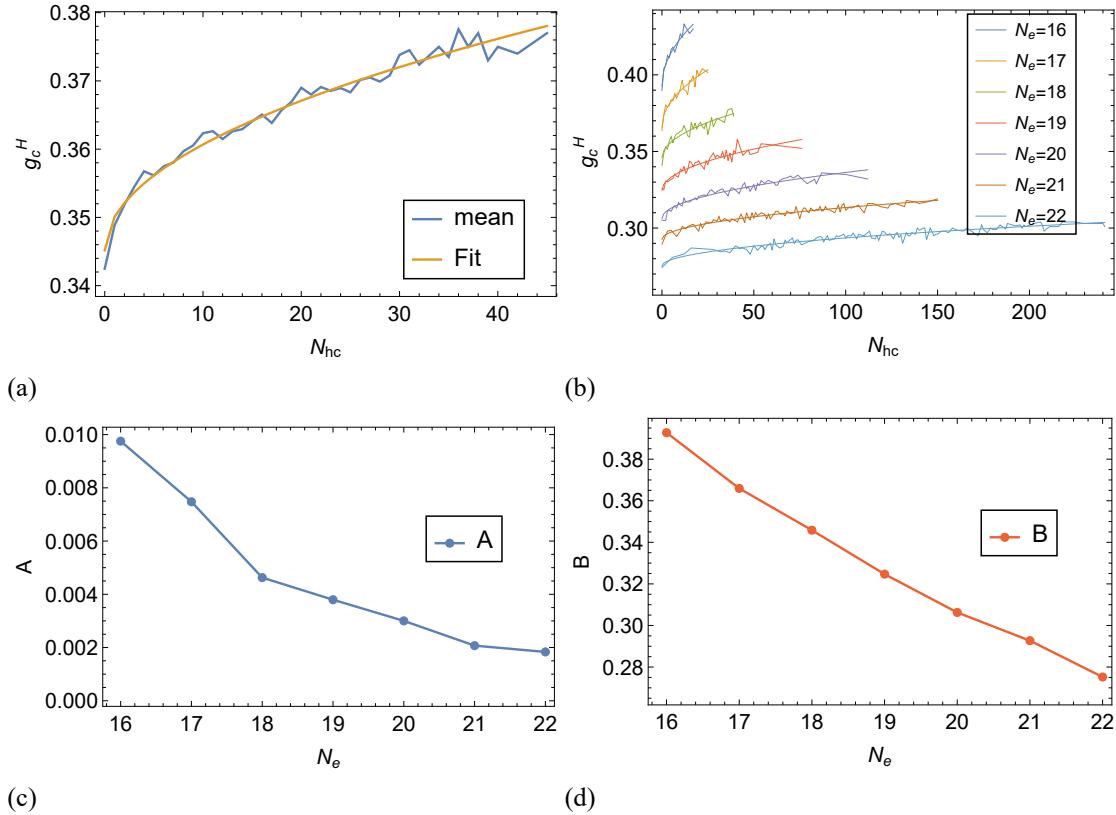


图 4-9: 临界参数 g_c^H 均值随着 N_{hc} 变化曲线的拟合分析, 拟合函数采用 $g_c^H = A\sqrt{N_{hc}} + B$ 。
 (a) 在 $N_e = 18$ 样本中, 临界参数 g_c^H 均值随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化曲线及拟合曲线, 拟合结果 $A = 0.0049005$, $B = 0.345178$ 。(b) 在 $N_e = 16 \sim 22$ 样本中, 临界参数 g_c^H 均值随着哈密顿回路数量 N_{hc} 的变化曲线及拟合曲线。(c) (b) 中拟合的参数 A 随边数 N_e 的变化曲线。(d) (b) 中拟合的参数 B 随边数 N_e 的变化曲线。

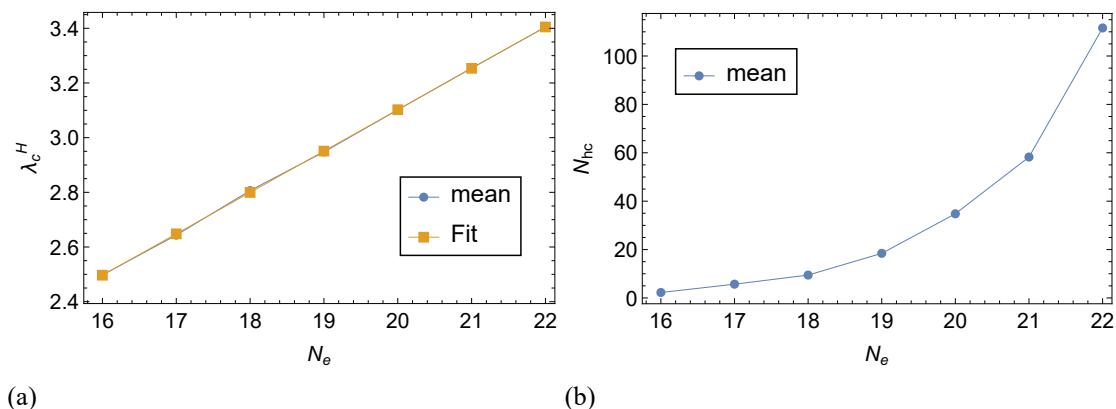


图 4-10: 临界参数 λ_c^H 均值随着 N_e 变化曲线的线性拟合分析。(a) 在 $N_e = 16 \sim 22$ 样本中, 临界参数 λ_c^H 均值随着哈密顿回路数量 N_e 的变化曲线及拟合曲线。拟合结果为 $\lambda_c^H = 0.1513 * N_e + 0.07536$ 。(b) 在 $N_e = 16 \sim 22$ 样本中, N_{hc} 均值随着图边数 N_e 的变化曲线。

4.6 小结

综上所述，本章利用 Z_2 拓扑量子相变的闭弦凝聚特性，通过将图映射为格子，建立了图问题的量子模型。基于该模型设计出一种时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ 的量子算法可获取图所对应格子的闭弦凝聚态，有助于解决该图的 HCP 问题。此外，在这个模型中，我们发现图的哈密顿回路数量 N_{hc} 对其所映射的格子的临界相变参数 g_c 有较大影响。 N_e, N_v 固定时， g_c 均值和 $\sqrt{N_{hc}}$ 呈线性关系。 N_v 固定时， $\frac{1}{g_c}$ 均值和 N_e 呈线性关系。基于此，我们进一步讨论了量子计算机上一种时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ 利用 g_c 来推断哈密顿回路数目的算法可能性。而本章是对较小的图的模拟结果，其结果是否适用于更大的图仍是一个值得继续研究的问题。鉴于图论在计算机科学和数学中的重要地位，这种图的量子算法模型可能在众多领域产生有益的影响。例如基于玻尔兹曼机的深度神经网络为代表的深度学习正与图模型和横场 Ising 模型进行融合^[81–83]。而 $d=2$ Z_2 规范理论和横场 Ising 模型呈现对偶关系。因此，该算法模型对图问题的求解也有利于量子深度学习的发展^[83,85]。此外，该算法模型还连接了图论问题和拓扑量子相变这两个热点领域。相信这两个领域的相互激荡将产生丰富的新成果。

第 5 章 QBLAS: 一个量子基本线性代数和模拟库

5.1 QBLAS 概览

QBLAS 的整体算法结构如图5-1所示。QBLAS 被分为两个大部分：量子线性代数部分和量子模拟部分。

量子线性代数部分分为矩阵操作和向量操作两个子部分。矩阵操作部分主要实现了矩阵求逆的 HHL 算法^[88,89] 和以此为基础的量子主元素分析算法^[28]，本征值和奇异值分解算法^[29]。另外这部分也实现了这些算法所依赖的量子相位估计算法^[103]，量子傅里叶变换算法^[103]。量子相位估计依赖于矩阵量子模拟。矩阵量子模拟在量子模拟部分有实现。量子向量操作部分主要实现了依赖于量子交换测试^[104] 的向量以及向量组中心的内积和距离算法^[86]。

量子模拟部分实现了三种类型的量子模拟。1) 基于量子步方法的稀疏矩阵模拟^[27,90,91]，2) 基于密度矩阵指数方法的密度矩阵模拟和低秩稠密矩阵模拟^[28,29,89]，3) 基于 Trotter 哈密顿分解方法的一般矩阵量子模拟^[24,25,92,93]。

和经典计算机需要内存类似，量子计算机各种算法的运行都需要基于量子物理比特系统的量子内存 QRAM^[105,106]。本库中为了演示算法，构建了一个虚拟的 QRAM 来帮助算法运行。

QBLAS 的文件结构如图5-2所示。整个库采用模块化的原则，每一个文件实现一类函数。模块直接可以通过固定的量子函数接口互相调用。这种设计将提高了库代码的可读性和拓展性。在量子算法快速发展的今天，拓展性是至关重要的。

5.2 数据类型的比特格式

所有数据类型都采用小端整形的格式储存在量子向量态中。如下所示，当前库中一共有四种数据类型：Bool, Int, Real, Complex。除 Bool 型外最后一个比特是符号位，0 表示正数，1 表示负数。

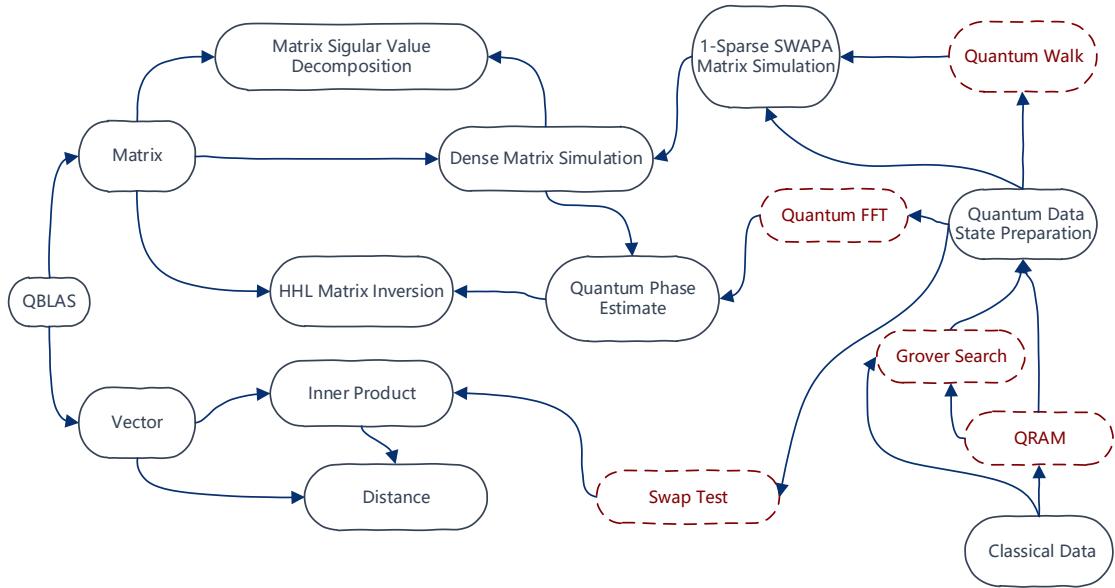


图 5-1: QBLAS 的算法结构。虚线框为量子指数或根号加速核心算法。

Bool: $|b\rangle = |bool\rangle$, $b = 0, 1$

Int: $|b\rangle = |b_0 b_1 \dots b_{n-1} b_n\rangle$, $b = (b_0 2^0 + b_1 2^1 + \dots + b_{n-1} 2^{n-1}) sign(b_n)$

Real: $|b\rangle = |b_0 b_1 \dots b_{n-1} b_n\rangle$, $b = (b_0 2^{-1} + b_1 2^{-2} + \dots + b_n 2^{-(n-1)}) sign(b_n)$

Complex: $|b_n\rangle |b_\phi\rangle$, b_n 是复数模, b_ϕ 是复数辐角。

n 根据数据所占的量子比特数目改变。

5.3 量子随机存储器 QRAM

RAM(随机读取存储器)是经典计算机的基本构建。对于量子计算机就是 QRAM。因为量子计算机需要接入叠加的内存单元, 其地址也是叠加的地址寄存器 $\sum_j A_j |a_j\rangle$ 。接受到叠加的地址, QRAM 将在数据寄存器 d 中返回与之关联的叠加的内存数据内容^[105]:

$$\sum_{j=0}^{N-1} A_j |a_j\rangle \xrightarrow{QRAM} \sum_{j=0}^{N-1} A_j |a_j\rangle |D_j\rangle \quad (5.1)$$

a_j 是地址寄存器。 A_j 为相应地址的振幅, 不同于经典寄存器, 量子寄存器可以处于叠加态, 叠加态也可以拥有振幅。 D_j 为相应地址的量子内存数据。

如^[105,106] 中所详细讨论的, 完成 N 个经典数据向量子数据转化的 QRAM 需要物理量子比特系统以 $O(\log(N))$ 复杂度实现。几乎所有量子算法都需要调用 QRAM 制备量子初态, 为了方便演示这些量子算法, QBLAS 库在 `q_ram` 模块实现了一个模拟的 QRAM, 可以给出类似于真实 QRAM 的调用接口。

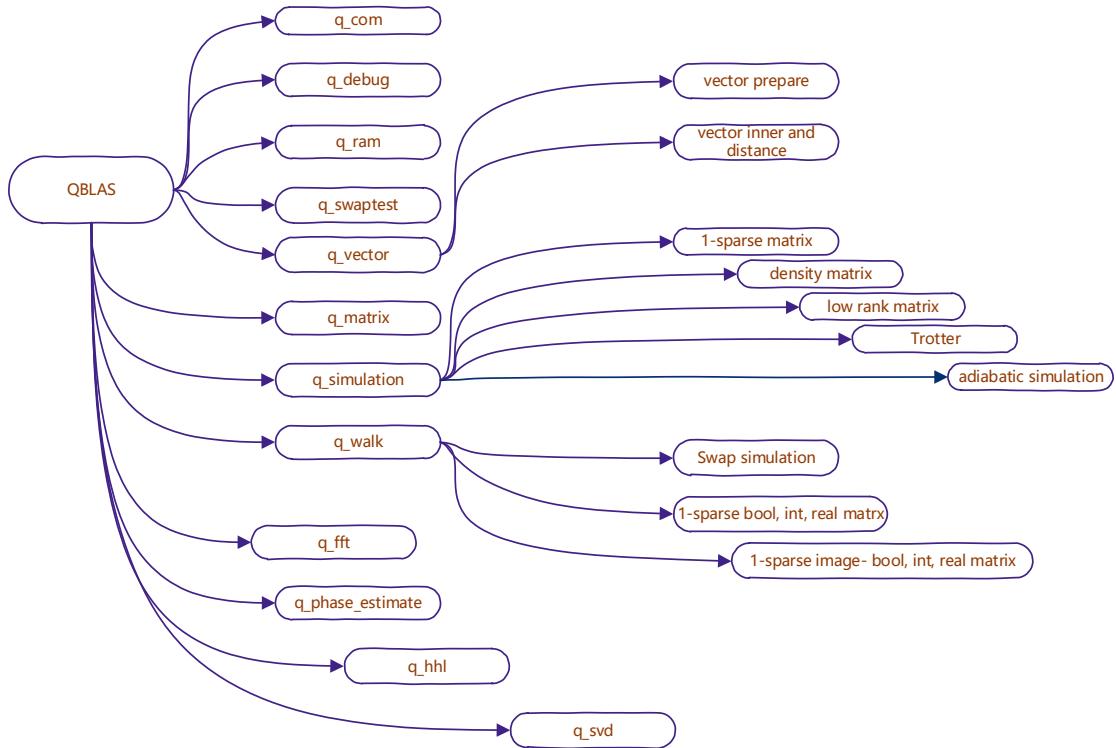


图 5-2: QBLAS 的文件结构。采用模块化设计，每个文件包含单独的功能模块。

5.4 量子向量 QVector

向量 (vector) 是线性代数的基本元素。量子计算机使用量子态来表示向量。一个经典向量 \vec{v} 可以用量子态 $|v\rangle$ 加上模参数 $|v|$ 来表示。

经典 vector	量子 vector
$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \\ \vdots \\ v_{N-1} \end{pmatrix}$	$ v , v\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} v_j j\rangle$

经典归一化向量 \vec{v} 到量子向量 $|v\rangle$ 的变换需要通过 *preparation* 过程实现：

$$\vec{v} : \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle \xrightarrow{\text{preparation}} \sum_{j=0}^{2^n-1} v_j |j\rangle, n = \log_2(N) \quad (5.2)$$

n 是所需要的量子比特数目。 n 必须是整数，不满足此条件的 N 可以通过添加 0 元素加以拓展。

$$preparation : \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle |0\rangle \xrightarrow{QRAM} \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle |v_j\rangle \rightarrow \sum_{j=0}^{2^n-1} v_j |j\rangle |v_j\rangle, \xrightarrow{QRAM^\dagger} \sum_{j=0}^{2^n-1} v_j |j\rangle |0\rangle$$

$QRAM^\dagger$ 是 $QRAM$ 操作的厄米共轭, 表示逆 (undo) $QRAM$ 操作。可以看出通过 $preparation$ 过程, 经典向量元素被制备到了对应量子向量态的基矢振幅位置 $v_j |j\rangle$ 。

5.4.1 量子向量制备 preparation

从经典向量制备量子向量有很多算法。本库提供一种基于测量的算法来制备量子向量。我们以归一化的经典向量 \vec{v} 为例。

实数向量

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_0 \\ v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}$$

preparation 制备过程:

$$\begin{aligned}
 & \sum_j |j\rangle \\
 & \xrightarrow{QRAM} \sum_j |j\rangle |v_j\rangle \\
 & \xrightarrow{\text{add auxiliary } |0\rangle} \sum_j |j\rangle |v_j\rangle |0\rangle \\
 & \xrightarrow{\text{use } |v_j\rangle \text{ control-rotate } CR_y \text{ auxiliary}} \sum_j |j\rangle |v_j\rangle (\sqrt{1-v_j^2} |0\rangle + v_j |1\rangle) \\
 & \xrightarrow{\text{measurement auxiliary to } |1\rangle} \sum_j v_j |j\rangle |v_j\rangle |1\rangle \\
 & \xrightarrow{QRAM^\dagger(\text{undo QRAM})} \sum_j v_j |j\rangle
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

通过测量辅助比特, 如果获得 $|1\rangle$, 我们就获得了正确的态 $\sum_i v_i |j\rangle$, 否则我们获得了错误的态 (ill state) $\sum_j \frac{\sqrt{1-v_j^2}|j\rangle}{\sqrt{N-1}}$ 。如果我们获得了 ill state 就需要重新制备。

复数向量

复数向量的 preparation 和实数向量是类似的。不同之处是复数向量的元素拥有辐角，可以通过旋转辅助比特的办法将辐角制备到振幅辐角上。我们以归一化的复数向量 \vec{v} 为例。

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_0 e^{i\phi_0} \\ v_1 e^{i\phi_1} \\ \vdots \\ v_N e^{i\phi_N} \end{pmatrix}$$

制备过程：

$$\begin{aligned}
 & \sum_j |j\rangle \\
 \xrightarrow{QRAM} & \sum_j |j\rangle |v_j\rangle |\phi_j\rangle \\
 \xrightarrow{\text{add auxiliary } |0\rangle} & \sum_j |j\rangle |v_j\rangle |\phi_j\rangle |0\rangle \\
 \xrightarrow{\text{use } |v_j\rangle \text{ control-rotate } CR_y \text{ auxiliary}} & \sum_j |j\rangle |v_j\rangle |\phi_j\rangle (\sqrt{1 - v_j^2} |0\rangle + v_j |1\rangle) \quad (5.4) \\
 \xrightarrow{\text{use } |\phi_j\rangle \text{ control-rotate } CR_z \text{ auxiliary}} & \sum_j |j\rangle |v_j\rangle |\phi_j\rangle (\sqrt{1 - v_j^2} |0\rangle + v_j e^{i\phi_j} |1\rangle) \\
 \xrightarrow{\text{measurement auxiliary to } |1\rangle} & \sum_j v_j e^{i\phi_j} |j\rangle |v_j\rangle |1\rangle \\
 \xrightarrow{QRAM^\dagger(\text{undo QRAM})} & \sum_j v_j e^{i\phi_j} |j\rangle
 \end{aligned}$$

5.4.2 向量操作：内积和距离

内积计算操作是向量的一种重要操作。向量的距离也可以通过内积获得。QBLAS 库实现了一种基于交换测试 (swap test) 的向量内积计算指数加速算法^[86]。然后，两个向量的距离以及两个向量组中心向量的距离算法可以通过此内积算法获得。

swapt test 和内积算法

两个向量（每个向量一个量子比特）的交换测试算法线路图如图5-3所示。线路通过测量辅助比特获取 $|1\rangle$ 的概率 P_{pass} 来估算这两个向量的内积。

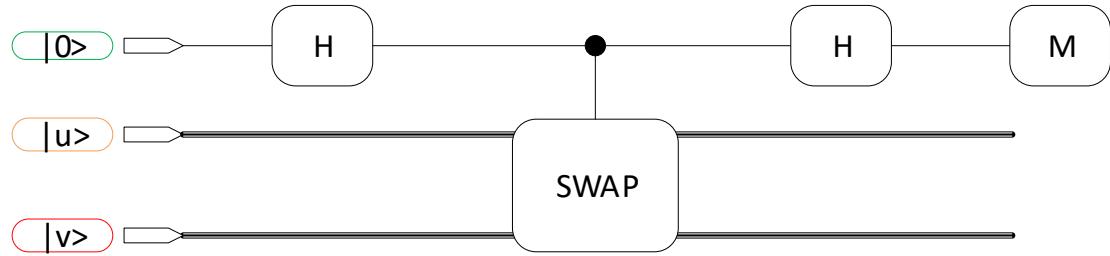


图 5-3: 交换测试 (swap test) 线路图

Swap test 方法^[104]:

$$\begin{aligned}
 |\Phi\rangle = |0\rangle|u\rangle|v\rangle &\xrightarrow{H} \frac{(|0\rangle + |1\rangle)}{\sqrt{2}}|u\rangle|v\rangle \xrightarrow{CSWAP} \frac{(|0\rangle|u\rangle|v\rangle + |1\rangle|v\rangle|u\rangle)}{\sqrt{2}} \\
 &\xrightarrow{H} \frac{|0\rangle(|u\rangle|v\rangle + |v\rangle|u\rangle) + |1\rangle(|u\rangle|v\rangle - |v\rangle|u\rangle)}{2} \\
 P_{pass} &= \frac{(\langle u|v\rangle + \langle v|u\rangle)(|u\rangle|v\rangle + |v\rangle|u\rangle)}{4} \\
 P_{pass} &= \frac{(1 + |\langle u|v\rangle|^2)}{2} \\
 P_{failure} &= 1 - P_{pass} = \frac{(1 - |\langle u|v\rangle|^2)}{2}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

投影概率 $P = |\langle u|v\rangle|^2 = 2P_{pass} - 1$, 投影振幅 $|A_p| = \sqrt{P} = Inner$

$$\text{内积 (Inner): } |\langle u|v\rangle| = \sqrt{P} = \sqrt{2P_{pass} - 1} \tag{5.6}$$

两个向量（每个向量多个量子比特）的交换测试算法和单比特不同的是 CSWAP(controlled SWAP) 门分别作用于向量的每个量子比特。这两个向量的距离为 D .

$$\begin{aligned}
 D^2 &= |||u||u\rangle - |v||v\rangle||^2 = |u|^2 + |v|^2 - 2|u||v|\langle u|v\rangle \\
 &= |u|^2 + |v|^2 - 2|u||v|\sqrt{2P_{pass} - 1}
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

$$\text{或者 } D^2 = |u|^2 + |v|^2 - 2|u||v|\sqrt{1 - 2P_{failure}}$$

两个向量的距离

除了上述方法, 一种计算两个多比特向量内积的更好的 swap test 方法在^[86]中有详细讨论, 将作为下面计算两个向量距离的通用方法。为了计算两个向量 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 的距离, 我们需要首先构造两个量子态 $|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 。这两个向量的距离可以通过对这 $|\varphi\rangle$ 的地址比特和 $|\psi\rangle$ 的交换测试加以估计。这种方法的优点是交换测试部分和向量比特数目无关, 从而简化了操作。

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= (|0\rangle|u\rangle + |1\rangle|v\rangle)/\sqrt{2} \\ |\psi\rangle &= (|u\rangle|0\rangle - |v\rangle|1\rangle)/\sqrt{|u|^2 + |v|^2} \end{aligned} \quad (5.8)$$

投影测量的成功概率 P 可以通过对辅助比特的重复测量获得。

$$\begin{aligned} P &= |\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = 2P_{pass} - 1 \\ &= |((|u\rangle|0\rangle - |v\rangle|1\rangle)/\sqrt{|u|^2 + |v|^2})^\dagger(|0\rangle|u\rangle + |1\rangle|v\rangle)/\sqrt{2}|^2 \\ &= \frac{1}{2}\frac{1}{|u|^2 + |v|^2}|||u\rangle|u\rangle - |v\rangle|v\rangle||^2 \end{aligned} \quad (5.9)$$

D 是向量 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 的距离。所以,

$$\begin{aligned} D^2 &= |||u\rangle|u\rangle - |v\rangle|v\rangle||^2 \\ D &= \sqrt{2p(|u|^2 + |v|^2)} \end{aligned} \quad (5.10)$$

一个向量和一组向量中心的距离

一个向量和一组 (M 个) 向量中心的距离计算, 这 M 个向量的中心为一个中心向量定义为 $|v_c\rangle = \sum_{k=0}^{M-1} |v_k\rangle$ 。故求一个向量和一组向量中心的距离, 就是求该向量和中心向量 $|v_c\rangle$ 的距离, 方法可以参照上面求两个向量的距离, 对应的 $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ 定义如下:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{M+1}}(|0\rangle|u\rangle + \sum_{j=1}^M |j\rangle|v_j\rangle) \\ |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{|u|^2 + \sum_{j=1}^M |v_j|^2}}(|u\rangle|0\rangle - \sum_{j=1}^M |v_j\rangle|j\rangle) \end{aligned} \quad (5.11)$$

两组向量中心的距离

两组向量中心距离就是两组向量中心向量的距离, 方法可以参照上面求两个向量的距离, 对应的 $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ 定义如下:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{k=0}^{M-1} |k\rangle|v_k\rangle \\ |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_k g_k |v_k\rangle|k\rangle, Z = \sum_{k=0}^{M-1} |v_k|^2, g_k = \pm 1 \end{aligned} \quad (5.12)$$

$g_k = \pm 1$ 是代表组号 1, 2, M 是两组所有向量数目, Z 是两组所有向量模方求和。

投影测量概率 p 通过重复测量获取:

$$p = |\langle \psi | \varphi \rangle|^2 = \frac{1}{M} \frac{1}{Z} \| |g_k| v_k |v_k\rangle \| |^2$$

$$p = 2P_{pass} - 1$$

对应投影振幅:

$$A_p = |\langle \psi | \varphi \rangle| = \sqrt{p}$$

两组向量中心距离 D :

$$\begin{aligned} D^2 &= \| |g_k| v_k |v_k\rangle \| |^2 \\ D &= \sqrt{MZp} = \sqrt{MZ(2P_{pass} - 1)} \end{aligned} \tag{5.13}$$

5.5 矩阵量子模拟

矩阵的量子模拟是指给定矩阵 A , 和初态 $|\psi(0)\rangle$, 求给定时间 t 后的末态 $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = U_A |\psi(0)\rangle = e^{-iAt} |\psi(0)\rangle \tag{5.14}$$

U_A 为模拟所对应的幺正运算。对于量子力学要求 A 为厄米矩阵。对于一般的量子算法, A 可能是任意矩阵, 为了套入量子力学的框架, 通常利用 A 构造一个厄米矩阵 \tilde{A} , 通过模拟 \tilde{A} 间接模拟 A 。所以下面讨论的都是厄米矩阵的情况。如果一个矩阵尺寸大小是 $N * N$, 模拟算法所需时间复杂度与 N 的关系是是 $O(\text{Log}(N))$, 则称该模拟是高效的。QBLAS 库实现了几种已经发现的高效可模拟的矩阵的模拟方法。

受控模拟指实现由某控制量子比特 $|r\rangle$ 控制的 U_A 运算 CU_A ,

$$CU_A(a|0\rangle + b|1\rangle)_r |\psi(0)\rangle = a|0\rangle |\psi(0)\rangle + b|1\rangle |\psi(t)\rangle \tag{5.15}$$

通常情况下 U_A 运算能高效实现, 并不意味着 CU_A 也能够同样方法高效实现。

5.5.1 Trotter 哈密顿分解模拟

如果我们可以模拟矩阵 H_1, H_2, \dots, H_q , 那么我们就可以近似模拟 $H = H_1 + H_2 + \dots + H_q$ 。模拟误差为

$$\varepsilon = ||e^{-i(H_1+\dots+H_q)t} - (e^{-iH_1t/n} \dots e^{-iH_qt/n})^n|| = O\left(\frac{qlt^2}{n}\right), \quad (5.16)$$

l 是其中任意两个矩阵的最大不对易模。 t 是模拟时间, n 是模拟步数。此分解称为 Trotter 分解^[24,92], 还有很多提高精度的变体比如下面的对称式 Trotter^[25,97]。

如果一个哈密顿可写为 $H = A + B$ 形式, A, B 可模拟, 则 H 可通过对称式 Trotter 近似模拟误差为

$$\begin{aligned} \varepsilon &= ||e^{-iHt} - (e^{-iA\frac{t}{2n}} e^{-iB\frac{t}{n}} e^{-iA\frac{t}{2n}})^n|| \\ &= \left\| \left(\frac{1}{24} [[A, B], A] + \frac{1}{12} [[A, B], B] \right) \frac{t^3}{n^2} \right\| = O\left(\frac{lt^3}{n^2}\right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

其中 l 是两个哈密顿成分 A, B 对易的模。 t 是总模拟时间, n 是对称式 Trotter 步数。可见对称式 Trotter 将误差推向了第三阶从而提高了精度。沿着该思路还有更多更高阶 Trotter 变体以进一步提升精度^[93]。

5.5.2 稀疏矩阵的量子步模拟

稀疏矩阵是指大量元素为 0, 只有少量非 0 元素的矩阵。稀疏度为 k 的矩阵指矩阵的每一行最多只有 k 个元素。其中稀疏度为 1 的稀疏矩阵可以采用量子步方法^[27,90,91] 精确高效模拟。通过以下通用模拟技术

$$\text{如 } H = U^\dagger VU, \quad \text{则 } e^{-iHt} = e^{-iU^\dagger VU t} = U^\dagger e^{-iVt} U \quad (5.18)$$

稀疏度为 1 的矩阵的模拟可以转换为 T 矩阵的模拟。 T 矩阵就是交换门 $SWAP$ 对应的矩阵。稀疏度为 k 的稀疏矩阵可以采用 Trotter 分解为 k 个稀疏度为 1 的矩阵进行近似模拟^[107]。

T 矩阵模拟

$|a\rangle, |b\rangle$ 为 m 比特态。交换门 $SWAP |a\rangle |b\rangle = |b\rangle |a\rangle$, $T = SWAP$, T 矩阵的量子模拟线路如图5-4所示。

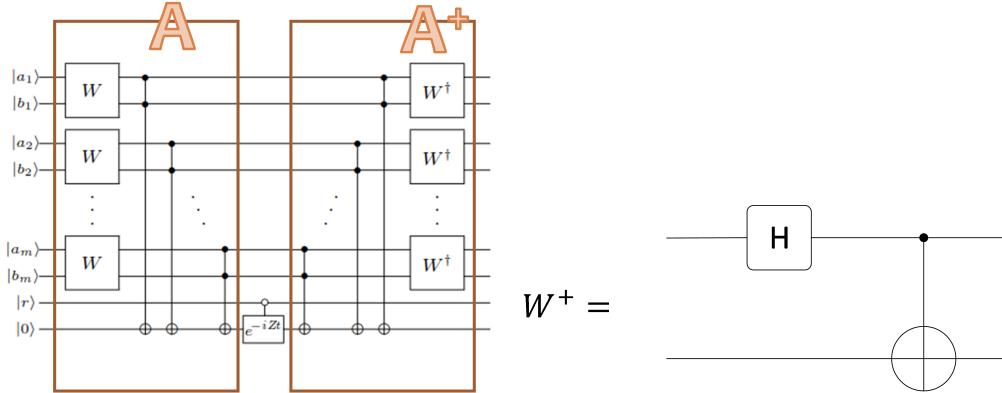


图 5-4: T 矩阵量子模拟线路图

$$T |a\rangle |b\rangle |s\rangle = A^\dagger Z A |a\rangle |b\rangle |s\rangle, Z = \sigma_z \quad (5.19)$$

$$U_T = e^{-iTt} = e^{-iA^\dagger Z A t} = A^\dagger e^{-iZt} A, \quad e^{-iZt} = e^{-i\sigma_z t} = R_z(-2t)$$

$|s\rangle$ 为辅助比特, 开始设为 $|0\rangle$, Z 只作用到辅助比特 $|s\rangle$ 上。可以看到交换矩阵 T 是可以精确模拟的, 被转换成了对辅助单比特 $|s\rangle$ 的 R_z 旋转, 也就是绕 σ_z 轴的旋转量子门操作。对多比特时间的模拟转换为了对附加单比特空间角的旋转。其中, $W^\dagger = CNOT(H \otimes I)$

$$W^\dagger |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad W^\dagger |01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \quad (5.20)$$

$$W^\dagger |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \quad W^\dagger |11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle),$$

可见, W 负责贝尔基和计算基矢之间的转换。

受控版本 CU_T , 如图5-4所示增加控制比特 $|r\rangle$, 将 Z 替换为受 $|r\rangle$ 控制的 CZ ,

$$CU_T = A^\dagger CR_z(-2t)A \quad (5.21)$$

稀疏度为 1 的矩阵模拟

稀疏度为 1 的矩阵是指矩阵每行最多只有一个非 0 元素。如果 $N * N$ 厄米矩阵 H 的稀疏度为 1, 则只有 $H_{x,m(x)} \neq 0, m(x)$ 是第 x 行非 0 元素所在的列。下面将该类矩阵按照非 0 元素种类分为 4 类: 非 0 元素分别为布尔(1), 实数, 虚数布尔(i,-i), 虚数。

内存中此类矩阵的存储只需要存其非零元素的位置和值即可, 每个非 0 元素用一个三元组 $(x, m(x), w(x))$ 表示, $w(x)$ 为非零元素值。定义 QRAM 的取内存

操作 M , 撤销取内存操作就是 M^\dagger 。

$$M|x\rangle|0\rangle|0\rangle = |x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle, \quad M^\dagger|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle = |x\rangle|0\rangle|0\rangle \quad (5.22)$$

M 所作用的三个寄存器分别为, 行寄存器, 列寄存器, 元素值寄存器。 M 功能就是根据行寄存器值从 QRAM 读出列值和元素值。对于布尔型因为 $w(x) \equiv 1$, 所以可以不存储其元组值, $M(x)$ 简化为了 $M|x\rangle|0\rangle = |x\rangle|m(x)\rangle$, $M^\dagger|x\rangle|m(x)\rangle = |x\rangle|0\rangle$

1) 布尔型:

$$H_{x,m(x)} = 1, H|x\rangle = |m(x)\rangle \quad (5.23)$$

$$M^\dagger T M |x\rangle|0\rangle = M^\dagger T |x\rangle|0\rangle = M^\dagger|m(x)\rangle|x\rangle = |m(x)\rangle|0\rangle = H|x\rangle|0\rangle \quad (5.24)$$

故, $H = M^\dagger T M$

因此布尔型 H 的模拟可以通过 M 操作转换为对 T 的模拟, 进而转换为对单个辅助比特 $|s\rangle$ 的 R_z 旋转。

$$e^{-iHt} = e^{-iM^\dagger T M t} = M^\dagger e^{-iTt} M = M^\dagger A^\dagger R_z(-2t) A M \quad (5.25)$$

R_z 只作用于辅助比特 $|s\rangle$, $|s\rangle$ 初始为 $|0\rangle$

受控版本为增加控制比特 $|r\rangle$, 替换 R_z 为受 $|r\rangle$ 控制的 CR_z 。

2) 实数型:

$$H_{x,m(x)} = w(x), H|x\rangle = w(x)|m(x)\rangle, w(x) \text{ 为实数} \quad (5.26)$$

$$\begin{aligned} M^\dagger(T \otimes F)M|x\rangle|0\rangle|0\rangle &= M^\dagger(T \otimes F)|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle|s\rangle \\ &= M^\dagger|m(x)\rangle|x\rangle w(x)|w(x)\rangle \\ &= w(x)|m(x)\rangle|0\rangle|0\rangle \\ &= H|x\rangle|0\rangle|0\rangle \end{aligned} \quad (5.27)$$

故, $H = M^\dagger(T \otimes F)M$

而 $T \otimes F$ 的模拟可通过如下转换变为对辅助比特 $|s\rangle$ 的 R_z 操作。 $|s\rangle$ 初始为

$|0\rangle$ 。

$$\begin{aligned} F|w(x)\rangle &= w(x)|w(x)\rangle \\ e^{-iFt}|w(x)\rangle &= e^{-iw(x)t}|w(x)\rangle \end{aligned} \quad (5.28)$$

$$\begin{aligned} e^{-i(T\otimes F)t}|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle|s\rangle \\ &= A^\dagger e^{-i(Z\otimes F)t}A|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle|s\rangle \\ &= A^\dagger e^{-iZw(x)t}A|x\rangle|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle|s\rangle \\ &= A^\dagger R_z(-2w(x)t)A|x\rangle|x\rangle|m(x)\rangle|w(x)\rangle|s\rangle \end{aligned} \quad (5.29)$$

因此实数型 H 的模拟可以通过 M 操作转换为对 $Z \otimes F$ 的模拟, 进而转换为对单个辅助比特 $|s\rangle$ 的 R_z 旋转。

$$e^{-iHt} = e^{-iM^\dagger A^\dagger (Z\otimes F)AMt} = M^\dagger A^\dagger e^{-iZ\otimes F t} AM = M^\dagger A^\dagger R_z(-2w(x)t)AM \quad (5.30)$$

受控版本为增加控制比特 $|r\rangle$, 替换 R_z 为受 $|r\rangle$ 控制的 CR_z 。

3) 虚数布尔型:

$$H_{x,m(x)} = \pm i, H|x\rangle = \pm i|m(x)\rangle \quad (5.31)$$

不同于布尔型, QRAM 中存储的元素值存放要增加个虚数位标记 $|sbit\rangle, |w(x)\rangle = |sbit\rangle$ 。当元素值为 $+i, sbit = 0$, 当元素值为 $-i, sbit = 1$

和布尔型线路接近, 不同点是 M 读取操作要将 $|sbit\rangle$ 读入辅助比特 $|s\rangle$ 里面, 另外对辅助比特 $|s\rangle$ 的旋转操作要换成绕 σ_y 轴的 R_y 。对应

$$\begin{aligned} T_y &= A^\dagger Y A, Y = \sigma_y \\ e^{-iT_y t} &= A^\dagger e^{-iY t} A = A^\dagger R_y(-2t)A \end{aligned} \quad (5.32)$$

虚数布尔型 H 的模拟可以通过上述 M 操作转换为对 T_y 的模拟。

$$e^{-iHt} = e^{-iM^\dagger T_y M t} = M^\dagger e^{-iT_y t} M = M^\dagger A^\dagger R_y(-2t)AM \quad (5.33)$$

受控版本为增加控制比特 $|r\rangle$, 替换 R_y 为受 $|r\rangle$ 控制的 CR_y 。

2) 虚数型:

$$H_{x,m(x)} = w(x), w(x) \text{ 为虚数} \quad (5.34)$$

QRAM 中存储虚数 $w(x)$ 的格式是 $|w(x)\rangle = ||w(x)||\rangle|sbit\rangle, |sbit\rangle$ 是增加的虚数位正负标记, 当虚数为 $+, sbit = 0$, 当虚数为 $- , sbit = 1$ 参照虚数布尔型和布尔型的关系, 虚数型模拟线路和实数型接近, 不同点是 M 读取操作要将 $|sbit\rangle$ 读入辅助比特 $|s\rangle$ 里面, 另外对辅助比特 $|s\rangle$ 的旋转操作要换成绕 σ_y 轴的 R_y 。

因此虚数型 H 的模拟可以通过 M 操作转换为对 $Y \otimes F$ 的模拟, 进而转换为对单个辅助比特 $|s\rangle$ 的 R_y 旋转。

$$e^{-iHt} = e^{-iM^\dagger A^\dagger (Y \otimes F) A M t} = M^\dagger A^\dagger e^{-iY \otimes F t} A M = M^\dagger A^\dagger R_y(-2w(x)t) A M \quad (5.35)$$

受控版本为增加控制比特 $|r\rangle$, 替换 R_y 为受 $|r\rangle$ 控制的 CR_y 。

稀疏度为 \mathbf{k} 的矩阵模拟

一般稀疏度为 \mathbf{k} 的矩阵 H 总可以化为一系列稀疏度为 1 的上述四种类型矩阵 H_1, H_2, \dots, H_q 的求和, $H = H_1 + H_2 + \dots + H_q$, 从而可以借助 Trotter 分解方法近似模拟。稀疏度为 1 的复数型矩阵, 也可以化为两个稀疏度为 1 的实数矩阵和虚数矩阵之和, 采用 Trotter 分解近似模拟。

5.5.3 密度矩阵模拟

稀疏矩阵可以采用上面量子步方法进行高效模拟, 一般的 $N * N$ 的稠密矩阵如果按照 Trotter 分解为稀疏矩阵模拟, 往往不一定能获得高效的模拟, 因为有的情况下分解出的矩阵数量和 N 是一个量级, 而 N 随量子比特数目指数增加, 意味着 Trotter 复杂度随量子比特指数增加, 这是难于实用的。但稠密的密度矩阵却可以通过某种算法进行高效模拟, 这一算法在^[28] 中首次被引入。

对于密度矩阵 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, 要实现模拟 $U_\rho = e^{-i\rho t}$, 被模拟的态为 $|\phi\rangle$, 其密度矩阵为 $\sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$, 故要实现的任务是 $U_\rho\sigma U_\rho^\dagger = e^{-i\rho t}\sigma e^{i\rho t}$ 。

可以通过如下近似方法模拟

$$\begin{aligned} Tr_\rho(e^{-iT\delta t}\rho \otimes \sigma e^{iT\delta t}) &= (\cos^2 \delta t)\sigma + (\sin^2 \delta t)\rho - i \sin \delta t \cos \delta t [\rho, \sigma] \\ &\approx \sigma - i\delta t [\rho, \sigma] + O(\delta t^2) \\ &\approx e^{-i\rho\delta t} \sigma e^{i\rho\delta t} \end{aligned} \quad (5.36)$$

$$e^{-i\rho t} \sigma e^{i\rho t} = (e^{-i\rho\delta t} \sigma e^{i\rho\delta t})^n, \delta t = \frac{t}{n}$$

其中 $T = SWAP$ 是交换矩阵, $T|\psi\rangle|\phi\rangle = |\phi\rangle|\psi\rangle$, 可以看到通过对 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ 进行交换模拟小的时间 δt 可以近似模拟 $e^{-i\rho\delta t}\phi$ 。模拟步数 $n = O(\frac{t^2}{\epsilon})$ 。当然每个 δt 要消耗一个 $|\psi\rangle$ 。 $|\psi\rangle$ 需要能够高效制备, 因为交换矩阵 T 是可以通过量子步方法精确高效模拟, 因此该方法也是高效的。当然对于 σ 非纯态, 以上仍然有效。

受控版本 CU_ρ , 替换 U_T 为受控制比特控制的 CU_T 即可。

5.5.4 低秩稠密矩阵模拟

借助稠密密度矩阵可高效模拟的方法。另一类稠密矩阵也可以高效模拟，那就是低秩稠密矩阵。该方法首先在^[29] 中提出。 $N * N$ 矩阵 A 为低秩矩阵是指其秩 $\text{Rank}(A)$ 远低于 N 。

模拟任务 $U_{\frac{A}{N}} \sigma U_{\frac{A}{N}}^\dagger = e^{-i\frac{A}{N}t} \sigma e^{i\frac{A}{N}t}, \sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$ 为被模拟态。

首先将 A 的元素对应填入 $N^2 * N^2$ 的交换矩阵 T 中 1 的位置构造一个新的交换矩阵

$$T_A = \sum_{j,k=0}^{N-1} A_{jk} |k\rangle|j\rangle \otimes \langle k|\langle j| \quad (5.37)$$

这样的 T_A 也是稀疏度为 1 的矩阵，可以采用量子步精确高效模拟。然后借鉴密度矩阵模拟的方法，不过取 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, |\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle$ 。这样的 $|\psi\rangle$ 是等权叠加态，是高效可制备的。

$$\begin{aligned} \text{Tr}_\rho(e^{-iT_A\delta t} \rho \otimes \sigma e^{iT_A\delta t}) &= \sigma - i\text{Tr}_\rho\{T_A \rho \otimes \sigma\}\delta t + i\text{Tr}_\rho\{\rho \otimes \sigma T_A\}\delta t + O(\delta t^2) \\ &= \sigma - i\frac{\delta t}{N}[A, \sigma] + O(\delta t^2) \\ &\approx e^{-i\frac{A}{N}\delta t} \sigma e^{i\frac{A}{N}\delta t} \\ e^{-i\frac{A}{N}\delta t} \sigma e^{i\frac{A}{N}\delta t} &= (e^{-i\frac{A}{N}\delta} \sigma e^{i\frac{A}{N}\delta})^n, \delta t = \frac{t}{n} \end{aligned} \quad (5.38)$$

可以看见其思路是借鉴密度矩阵的模拟，制备了新的交换矩阵 T_A ，然后对 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ 进行 T_A 模拟，然后求迹 trace 掉 $|\psi\rangle$ 使得稠密矩阵 $\frac{A}{N}$ 得以模拟。模拟步数 $n = O(\frac{t^2}{\epsilon} \|A\|_{max}^2)$ 。典型情况下， $\|A\|_{max} = O(\text{Rank}(A))$ ，所以 $n = O(\frac{t^2}{\epsilon} \text{Rank}(A))$ 。对于 σ 非纯态，以上仍然有效。

受控版本 $CU_{\frac{A}{N}}$ ，替换 U_{T_A} 为受控制比特控制的 CU_{T_A} 即可。

5.6 矩阵操作：求逆和分解

矩阵求逆的 HHL 算法和各种矩阵分解算法均依赖于矩阵模拟和量子相位估计，而量子相位估计是一个逆傅里叶变换的过程。

5.6.1 量子傅里叶变换 (QFT)

$$|m\rangle \xrightarrow{QFT} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{im\frac{2\pi}{2^n}y} |y\rangle, m\frac{2\pi}{2^n} = \phi \quad (5.39)$$

5.6.2 量子相位估计 (QPE)

量子相位估计分为相位准备和逆傅里叶变换两个部分^[103]

1) 相位准备:

如果 $U = e^{iA}$, $U|u\rangle = e^{i\phi}$, ϕ 就是待估计的相位, 一共 n 个控制比特, CU^{2^j} 为受第 j 个控制比特控制的 U^{2^j} 演化, 可以通过如下过程做相位准备:

$$CU^{2^j} \left(\prod_{j=0}^{n-1} (|0\rangle + |1\rangle)_j \right) |u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2^j\phi} |1\rangle) |u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{i\phi y} |y\rangle |u\rangle \quad (5.40)$$

2) 逆傅里叶变换:

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{im\frac{2\pi}{2^n}y} |y\rangle |u\rangle \rightarrow |m\rangle |u\rangle, m\frac{2\pi}{2^n} = \phi \quad (5.41)$$

通过 m 就可以计算出相位 ϕ 值 $(-\pi, \pi)$, 其中, m 格式:

$$\begin{aligned} |m\rangle &= |m_0 m_1 \dots m_{n-1} m_n\rangle, n+1 \text{ 个量子比特} \\ m_n = 0, \phi &= \frac{\pi}{2^n} (m_0 2^0 + m_1 2^1 + \dots + m_{n-1} 2^{n-1}) \\ m_n = 1, \phi &= \frac{\pi}{2^n} (m_0 2^0 + m_1 2^1 + \dots + m_{n-1} 2^{n-1} - 2^n) \end{aligned} \quad (5.42)$$

5.6.3 矩阵求逆 HHL 算法

矩阵求逆操作是线性代数的关键操作。给一 $N * N$ 可逆矩阵 A , $Ax = b$, x, b 为向量, 求解 $x = A^{-1}b$ 。最好的经典算法的时间复杂度是 $O(N)$ 。量子对应版本就是 $A|x\rangle = |b\rangle$, 求解量子向量 $|x\rangle = A^{-1}|b\rangle$, 文^[88] 借助矩阵模拟, 量子相位估计和量子测量等给出一种量子指数加速(时间复杂度 $O(\log(N))$)的求逆算法, 称为 HHL 算法^[84]。其执行过程如下:

在 A 的表象, A 为对角矩阵:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_{N-1} \end{pmatrix}, A^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_0^{-1} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_0^{-1} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_{N-1}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

在 A 的表象, $|b\rangle, |x\rangle$ 分别为:

$$|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |u_j\rangle, \quad |x\rangle = A^{-1} |b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j \lambda_j^{-1} |u_j\rangle \quad (5.44)$$

$|u_j\rangle$ 为 A 的本征矢, 可以看出求解 $|x\rangle$ 就是制备态 $\sum_{j=0}^{N-1} \beta_j \lambda_j^{-1} |u_j\rangle$ 即可, 其制备步骤如下:

$$\begin{aligned} e^{iAt} |b\rangle &= \sum_{j=0}^{N-1} e^{i\lambda_j t} \beta_j |u_j\rangle \\ \xrightarrow{QPE} &= \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \\ \xrightarrow{\text{add auxiliary qubit } |0\rangle} &= \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle |0\rangle \\ \xrightarrow{C_Ry|\lambda\rangle|0\rangle} &= \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda} |1\rangle \right) \\ \xrightarrow{\text{measure auxiliary qubit to } |1\rangle} &= \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j \lambda_j^{-1} |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \\ \xrightarrow{\text{undo QPE: } QPE^\dagger} &= \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j \lambda_j^{-1} |u_j\rangle \end{aligned} \quad (5.45)$$

C_Ry 表示受 $|\lambda\rangle$ 控制对辅助比特 $|0\rangle$ 绕 σ_y 轴的旋转操作。在辅助比特测量步骤, 和基于测量的量子向量制备一样, 辅助比特测量到 $|0\rangle$ 则制作失败, 需要重新制作直到测到 $|1\rangle$ 。每次运算的时间复杂度是 $O(\log(N))$, 成功率和矩阵本征值 λ 分布有关, 对于某些矩阵^[88], 可以获取很高的成功率, 从而相比于经典矩阵求逆算法实现指数倍提速。

5.6.4 矩阵本征值分解

给一个 $N * N$ 矩阵 A , 其本征值 $\lambda_j, j = 0 \dots N - 1$ 和对应本征向量 $|u_j\rangle$, A 可分解为如下形式

$$A = \sum_{j=0}^{N-1} |u_j\rangle \langle u_j| \quad (5.46)$$

称为 A 的本征值分解。可以看出 HHL 算法中已经出现了求解该问题的步骤:

$$e^{iAt} |b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} e^{i\lambda_j t} \beta_j |u_j\rangle \xrightarrow{QPE} = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \quad (5.47)$$

适当选取 $|b\rangle$ 就可以获得需要求的 λ_j , 且因为 $|\lambda_j\rangle$ 和 $|u_j\rangle$ 的纠缠关系, 通过测量可以同时获取对应的本征向量 $|u_j\rangle$ 。

5.6.5 矩阵奇异值分解(SVD)算法

给一 $M * N$ 矩阵 A , 其奇异值 $\sigma_j, j = 0 \dots R - 1$, 对应右本征向量 $|u_j\rangle$, 对应左本征向量 $|v_j\rangle$, $R = \text{Min}(M, N)$, A 可分解为如下形式

$$A = \sum_{j=0}^{R-1} \sigma_j |u_j\rangle \langle v_j| \quad (5.48)$$

称为 A 的奇异值分解。可以借鉴本征值分解的算法, 不过 A 不一定是方阵, 也不一定厄米, 为了方便量子模拟需要构造一个 $(M + N) * (M + N)$ 厄米方阵 \tilde{A}

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

\tilde{A} 本征值就是 A 的奇异值 $\sigma_j, j = 0 \dots R - 1$, 对应本征向量

$$|\tilde{u}_j\rangle = |u_j\rangle |v_j\rangle, \tilde{A} = \sum_{j=0}^{R-1} \sigma_j |\tilde{u}\rangle \langle \tilde{u}| \quad (5.49)$$

然后仿照本征值分解对 \tilde{A} 进行分解

$$e^{i\tilde{A}t} |b\rangle = \sum_{j=0}^{R-1} e^{i\sigma_j t} \beta_j |\tilde{u}_j\rangle \xrightarrow{QPE} = \sum_{j=0}^{R-1} \beta_j |\sigma_j\rangle |\tilde{u}_j\rangle \quad (5.50)$$

适当选取 $|b\rangle$ 就可以获得需要求的 σ_j , 且因为 $|\sigma_j\rangle$ 和 $|\tilde{u}_j\rangle$ 的纠缠关系, 通过测量可以同时获取对应的本征向量 $|\tilde{u}_j\rangle = |u_j\rangle |v_j\rangle$, 可以看见右本征向量 $|u_j\rangle$ 和其关联的左本征向量 $|v_j\rangle$ 同时得到了。该算法在^[29] 中被引入。

5.6.6 量子主成分分析(PCA)算法

一个量子向量

$$|X\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} w_i |x_i\rangle, \quad |x_i\rangle \text{ 是 } N \text{ 维成分向量}, w_i \text{ 是成分权重} \quad (5.51)$$

构造 $|X\rangle$ 密度矩阵

$$\rho = |X\rangle\langle X| = \sum_{i=0,j=0}^{M-1} w_i w_j^\dagger |x_i\rangle\langle x_j| \quad (5.52)$$

如果存在由 $|x_i\rangle$ 线性组合而组成的一组新的 N 维向量组 $|u_j\rangle, j = 0...R-1, R \ll M$, 使得

$$|X\rangle = \sum_{j=0}^{R-1} \sqrt{\lambda_j} |u_j\rangle, \quad \rho = \sum_{j=0}^{R-1} \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j| \quad (5.53)$$

则 $|u_j\rangle$ 构成了 $|X\rangle$ 的一组新的成分向量, 其中较大的 λ_j 所对应的 $|u_j\rangle$ 就是 $|X\rangle$ 的主成分。求解主成分最好的经典算法复杂度是 $O(MN)$ 。

用 $|X\rangle$ 对密度矩阵 ρ 进行本征值分解

$$|X\rangle = \sum_{j=0}^{R-1} \sqrt{\lambda_j} |u_j\rangle, \quad e^{i\rho t} |X\rangle = \sum_{j=0}^{R-1} e^{i\lambda_j t} \sqrt{\lambda_j} |u_j\rangle \xrightarrow{QPE} \sum_{j=0}^{R-1} \sqrt{\lambda_j} |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \quad (5.54)$$

可见 λ_j 位于振幅位置, 由于其与 $|u_j\rangle$ 纠缠, 其越大测量获得对应主成分 $|u_j\rangle$ 概率越大。 $R \ll M$ 时只需少数几次测量便可获得, 每次量子运算时间复杂度是 $O(\text{Log}(MN))$, 比最好的经典算法有指数倍速度提升, 该算法在^[28] 中首次引入。

5.7 测试

为了演示库代码的正确性和可用性, 用较少的量子比特做一些简单的测试任务。测试代码中的测试任务详细如下。

5.7.1 向量部分

向量 preparation

实向量 preparation 测试: $\vec{v} = [0.3, 0.3, 0.6, 0.9]$

复向量 preparation 测试: $\vec{v} = [0.3, 0.3, 0.6e^{i\pi}, 0.9e^{i2\pi}]$

Swap Test 和两个向量内积

两个单位向量 $\vec{v}_1 = [1, 0], \vec{v}_2 = [0, 1]$

预期结果: 内积为 0, 距离为 $\sqrt{2}$

两组向量中心距离

两组向量组 1 $v_{11} = [e^{i\pi}, 0], v_{12} = [1, 0]$, 组 2 $v_{21} = [0, 1], v_{22} = [0, 1]$

预期结果: $A_p = 0.5, D = 2\sqrt{2}$

5.7.2 矩阵部分

量子相位估计 QPE

相估计任务: $|u\rangle = |0\rangle, A = \sigma_z, t = -1$

$$e^{-iAt} |u\rangle = e^{-i\sigma_z t} |0\rangle = e^{-iR_z 2t} |u\rangle = e^{i\phi} |0\rangle$$

预期结果: $R_z = \frac{\sigma_z}{2}, \phi = 1$

矩阵求逆算法 HHL

任务: $|b\rangle = |1\rangle, A = \sigma_x, A|x\rangle = |b\rangle$

预期结果: $|x\rangle = \sigma_x^{-1} |1\rangle \rightarrow |0\rangle$

密度矩阵模拟

任务: 取密度矩阵 $\rho = |+\rangle\langle +| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \sigma = |0\rangle\langle 0|$, 模拟时间 $t = \frac{\pi}{3}$ 。模拟 $e^{-i\rho t}\sigma e^{i\rho t}$ 。

$$e^{-i\rho t} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2k}}{(2k)!} (\rho t)^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{2k+1}}{(2k+1)!} (\rho t)^{2k+1} = [1 + (\cos(t) - 1)\rho] - i \sin(t)\rho$$

$$= 1 + (e^{-it} - 1)\rho$$

$$\rho |0\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$e^{-i\rho t} |0\rangle = 1 + (e^{-it} - 1)\rho |0\rangle = \frac{e^{-it} + 1}{2} |0\rangle + \frac{e^{-it} - 1}{2} |1\rangle = A |0\rangle + B |1\rangle$$

预期结果: 当 $t = \frac{\pi}{3}$, $|A|^2 = 0.75$

T(Swap)矩阵模拟

任务: 对 $|a\rangle = |11\rangle, |b\rangle = |00\rangle$ 进行 T(Swap) 矩阵模拟, 模拟时间 $t = \frac{\pi}{2}$ 。

$$e^{-iTt} = \cos(t)I - i\sin(t)T = -iT$$

预期结果: $t = \frac{\pi}{2}, e^{-iTt} |a\rangle |b\rangle = -i |b\rangle |a\rangle$

稀疏度为 1 的矩阵模拟

任务: 初态都为 $|0\rangle$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

1) 实布尔矩阵 σ_x , 模拟时间 $t = \frac{\pi}{4}$

$$e^{-i\sigma_x \frac{\pi}{4}} |0\rangle = e^{-iR_x \frac{\pi}{2}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$$

2) 虚布尔矩阵 σ_x , 模拟时间 $t = \frac{\pi}{4}$

$$e^{-i\sigma_y \frac{\pi}{4}} |0\rangle = e^{-iR_y \frac{\pi}{2}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

3) 实整数矩阵 $2\sigma_x$, 模拟时间 $t = \frac{\pi}{8}$

$$e^{-i2\sigma_x \frac{\pi}{8}} |0\rangle = e^{-iR_x \frac{\pi}{2}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$$

4) 虚整数矩阵 $2\sigma_x$, 模拟时间 $t = \frac{\pi}{8}$

$$e^{-i2\sigma_y \frac{\pi}{8}} |0\rangle = e^{-iR_y \frac{\pi}{2}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

低秩稠密矩阵模拟

任务: 选取一个小的低秩稠密矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, 模拟时间 $t = \frac{\pi}{6}$ 。由于 $e^{-iA \frac{\pi}{6}} |0\rangle = e^{-i\rho \frac{\pi}{3}} |0\rangle, \rho = |+\rangle \langle +|$

预期结果: 可参照密度矩阵模拟测试

5.8 代码说明

QBLAS 代码以 Git 版本库形式管理, 采用 GPLv3 开源协议发布于著名的开源网站 Github, 网址为 <https://github.com/xpclove/qblas>。Git 是近年来兴起的优秀代码版本管理软件, 给予了开源工程方便的开发模式和持续的生命力。鉴于量子

算法领域快速的发展势头,一个开放式的代码管理格局是很有益处的。

代码格式,函数命令采用 linux 下划线风格,尽量根据名称知其所在模块和其所具备的功能。另外,函数和变量名称尽量小写,但根据 Q# 语言的命名习惯部分需要大写。

5.9 小结

我们采用微软最新推出的 Q# 量子编程语言完成了一个量子基本线性代数和量子模拟库 QBLAS。该库通过量子代码实现了近年来逐步发展出来的一些主要量子线性代数加速算法和量子模拟算法。量子线性代数部分实现了向量内积和矩阵本征值分解等量子加速算法。量子模拟部分实现量子步,密度矩阵指数, Trotter 分解等模拟算法。通过几个简单的例子,对库中主要的算法进行了测试,获得了和理论相符合的结果,证明了该库的正确性和可用性。

随着量子计算机的逐步来临和量子机器学习的快速发展,量子软件和量子程序将成为重要的课题。该库为量子编程的范式和应用提供了探索。量子模拟作为量子计算在物理领域的重要应用,发展一套通用灵活的量子模拟软件库势在必行。QBLAS 作为抛砖引玉希望能引领开源量子模拟软件的发展。

QBLAS 以 GPLv3 开源协议发布于著名的 GitHub 开源网站,具备开源,模块化和可扩展性等特征,方便了后续的持续开发和软件社区合作。量子计算和量子编程作为信息技术的一次新的革命,必将引领一个新的时代,回顾过去几十年经典计算机发展所造就的各种软件社团和公司,加强软件布局是量子计算机发展的当务之急,和量子计算黎明前的未雨绸缪之举。

第 6 章 结论和展望

6.1 结论

1. 本文基于量子线路实现了一种针对高能物理和凝聚态物理都有重要意义的量子 Z_2 格点规范理论的数字化绝热量子模拟方案。特别地,我们通过在 Nvidia Tesla K40m 和 Nvidia Tesla V100 上运行 QuEST GPU 量子模拟器来高性能地模拟该量子模拟,研究清楚了 $D=2+1$ 和 $D=3+1$ 情况下的量子 Z_2 格点规范理论。当 $D=3+1$ 时,QPT 为一阶, $D=2+1$ 时,QPT 为二阶,临界点 g_c 分别为 $0.986(L = 2)$ 和 $0.380(L = 3)$ 。此外,我们还清楚地观察到该 QPT 的拓扑特征,如不存在局部对称性破缺以及 $D=2+1$ 时依赖于 g 的 vison 激发和退禁闭相简并基态指数能隙等。结果证明了在相对的较小的格子下量子模拟下也能得到主要的模型结果,以及 GPU 并行计算技术可以极大地加速量子模拟任务。

2. 本文采用绝热量子演化方法对量子 Z_2 格点规范理论的格子拓扑由 Torus 缓慢转变到 Klein 瓶的过程进行了研究。研究发现了由于该格子空间拓扑变化引起的拓扑量子相变。该部分内容推动了对格点规范理论的这一新型拓扑量子相变的研究并加深了对 Z_2 规范理论和空间拓扑结构关系的理解。

3. 本文利用 Z_2 拓扑量子相变的闭弦凝聚特性,通过将图映射为格子提出了一种具有时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ 的量子算法可获取图所对应格子的闭弦凝聚态,有助于解决该图的 HCP 问题。利用该算法模型,通过对大量较小随机图的模拟,我们发现图的哈密顿回路的数量对其所映射格子的相变临界参数 g_c 有显著影响。 g_c 均值和 $\sqrt{N_{hc}}$ 以及 $\frac{1}{g_c}$ 均值和 N_e 均呈线性关系。基于此,我们进一步探讨了时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon} N_e^{3/2} (N_v^3 + \frac{N_e}{g_c})})$ 利用 g_c 来推断哈密顿回路数目的算法可能性。其结果是否适用于更大的图仍是一个值得继续研究的问题。

4. 本文基于微软最新的 Q# 量子编程语言开发了量子基本线性代数和量子模拟库 QBLAS。该库可以帮你在量子计算机或者量子模拟器上运行基于量子基本线性代数算法的量子计机器学任务和各种量子系统模拟任务。量子基本线性代数部分实现了量子向量内积和距离算法,矩阵求逆的 HHL 算法,矩阵本征值分解,矩阵奇异值分解,量子主成分分析,量子傅里叶变换,量子相估计等。量子模

拟部分实现了稀疏矩阵的量子步模拟,稠密矩阵的密度矩阵指数方法模拟,Trotter 哈密顿分解模拟等。QBLAS 以 GPLv3 开源协议发布于著名的 GitHub 开源网站,具备开源,模块化和可扩展性等特征,方便了后续的持续开发和软件社区合作。

6.2 展望

1. 在本文工作中,可以看到量子模拟的高性能经典模拟,也可以称为赝量子模拟代表了一种新的计算方式,同时将促进量子软件的快速发展。在量子霸权到来之际,我们的演示方案有望在一台通用量子计算机上编程实现。本文模拟了没有物质场的纯 Z_2 规范理论,作为格点规范理论的下一个挑战性问题,与规范场耦合的费米子问题因常规量子蒙卡方法将面临难以逾越的符号问题而仍未得到充分研究。利用本文的量子模拟方法将有力解决该问题从而促进格点规范理论的进一步深入发展。此外随着 GPU 软硬件技术以及真实量子计算机的快速发展,更大的格子尺寸和更复杂的相互作用的模拟将有望解决。

2. Z_2 格点规范理论里面由于格子拓扑反映了所在空间的拓扑结构,其他各种类型的拓扑结构改变也可以从本研究中得到启发,预期将发现更多丰富多彩的新物理现象。除了 Z_2 格点规范之外,其他如 $SU(2), SU(3)$ 格点规范理论在空间拓扑结构改变下的行为也可成为了新的研究热点问题。

3. 鉴于图论在计算机科学,数学,物理学中的重要地位,本文提出的图量子算法模型有可能在众多领域产生有益的影响。例如基于玻尔兹曼机的深度神经网络为代表的深度学习正与图模型和横场 Ising 模型进行融合^[81-83]。而 $d=2$ Z_2 规范理论和横场 Ising 模型呈现对偶关系。因此,该算法模型对图问题的求解也有利于量子深度学习的发展^[83,85]。此外,该算法模型还连接了图论问题和拓扑量子相变这两个热点领域。相信这两个领域的相互激荡将产生丰富的新成果。

4. 随着可编程实用量子计算机的逐步来临以及量子机器学习和量子模拟的快速发展,量子软件成为重要的研究课题。QBLAS 库为量子编程的范式和应用提供了一些探索。QBLAS 作为抛砖引玉希望能引领开源量子软件的蓬勃发展。鉴于近些年发展出的量子机器学习算法大多是基于本文列出的量子基本线性代数算法,依赖 QBLAS 开发一个量子机器学习库 QML 将成为可能。

总之, Z_2 格点规范理论与粒子物理的规范场论,凝聚态物理的拓扑量子相变,量子信息的长程纠缠和拓扑量子计算,图论算法问题等诸多领域有着深刻联系,对该模型的量子模拟研究必将推动上述诸多领域的进展,也势必将获得丰富的新成果。量子计算和量子编程作为信息技术的一次新的革命,必将引领一个新的时代,回顾过去几十年经典计算机快速发展所造就的各种软件社团和公司,加强软件布局是量子计算机发展的当务之急,也是量子计算黎明前的未雨绸缪之举。

参考文献

- [1] Kogut J, Susskind L. Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories[J]. Physical Review D, 1975, 11:395–408
- [2] Wegner F J. Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters[J]. Journal of Mathematical Physics, 1971, 12(10):2259–&
- [3] Sachdev S. Topological order, emergent gauge fields, and Fermi surface reconstruction[J]. Reports on Progress in Physics, 2018, 82(1):014001
- [4] Wen X G. An introduction to quantum order, string-net condensation, and emergence of light and fermions[J]. Annals of Physics, 2005, 316(1):1 – 29
- [5] Levin M A, Wen X G. String-net condensation: A physical mechanism for topological phases[J]. Physical Review B, 2005, 71:045110
- [6] Kitaev A, Laumann C. Topological phases and quantum computation[J]. eprint arXiv:0904.2771, 2009. arXiv:0904.2771
- [7] Kitaev A. Fault-tolerant quantum computation by anyons[J]. Annals of Physics, 2003, 303(1):2 – 30
- [8] Fowler A G, Mariantoni M, Martinis J M, et al. Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation[J]. Physical Review A, 2012, 86(3)
- [9] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor[J]. Nature, 2019, 574(7779):505–510
- [10] Kogut J B. An introduction to lattice gauge theory and spin Systems[J]. Reviews of Modern Physics, 1979, 51(4):659–713
- [11] Misguich G, Serban D, Pasquier V. Quantum Dimer Model on the Kagome Lattice: Solvable Dimer-Liquid and Ising Gauge Theory[J]. Physical Review Letters, 2002, 89:137202
- [12] Wan Y, Tchernyshyov O. Phenomenological Z_2 lattice gauge theory of the spin-liquid state of the kagome Heisenberg antiferromagnet[J]. Physical Review B, 2013, 87:104408

- [13] Tchernyshyov O. Spin liquids I and II: an introduction to lattice gauge theories. <https://nationalmaglab.org/news-events/events/2015-theory-winter-school>, 2015. [Online; Accessed January 5-9, 2015]
- [14] Bender J, Zohar E, Farace A, et al. Digital quantum simulation of lattice gauge theories in three spatial dimensions[J]. New Journal of Physics, 2018, 20(9):093001
- [15] Creutz M, Jacobs L, Rebbi C. Experiments with a Gauge-Invariant Ising System[J]. Physical Review Letters, 1979, 42(21):1390–1393
- [16] Dong S, Liu J M, Cheong S W, et al. Multiferroic materials and magnetoelectric physics: symmetry, entanglement, excitation, and topology[J]. Advances in Physics, 2015, 64(5-6):519–626
- [17] Fradkin E, Susskind L. Order and disorder in gauge systems and magnets[J]. Physical Review D, 1978, 17(10):2637–2658
- [18] Pfleiderer C. Why first order quantum phase transitions are interesting[J]. Journal of Physics-Condensed Matter, 2005, 17(11):S987–S997
- [19] Young A P, Knysh S, Smelyanskiy V N. First-Order Phase Transition in the Quantum Adiabatic Algorithm[J]. Physical Review Letters, 2010, 104:020502
- [20] Lan T, Wang J C, Wen X G. Gapped Domain Walls, Gapped Boundaries, and Topological Degeneracy[J]. Physical Review Letters, 2015, 114:076402
- [21] Garey M R, Johnson D S. Computers and Intractability; A Guide to the Theory of NP-Completeness[M]. USA: W. H. Freeman & Co., 1990
- [22] Higuchi S. Field theoretic approach to the counting problem of Hamiltonian cycles of graphs[J]. Physical Review E, 1998, 58:128–132
- [23] Hung L Y, Wan Y. Ground-State Degeneracy of Topological Phases on Open Surfaces[J]. Physical Review Letters, 2015, 114:076401
- [24] Lloyd S. Universal Quantum Simulators[J]. Science, 1996, 273(5278):1073
- [25] Childs A M, Su Y, Tran M C, et al. A Theory of Trotter Error[J]. arXiv e-prints, 2019. arXiv:1912.08854
- [26] Sieberer L M, Olsacher T, Elben A, et al. Digital quantum simulation, Trotter errors, and quantum chaos of the kicked top[J]. npj Quantum Information, 2019, 5(1):78
- [27] Childs A M, Cleve R, Deotto E, et al. Exponential algorithmic speedup by quantum walk[J]. eprint arXiv:quant-ph/0209131, 2002. quant-ph/0209131

- [28] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum principal component analysis[J]. *Nature Physics*, 2014, 10(9):631–633
- [29] Rebentrost P, Steffens A, Marvian I, et al. Quantum singular-value decomposition of non-sparse low-rank matrices[J]. *Physical Review A*, 2018, 97:012327
- [30] Wossnig L, Zhao Z K, Prakash A. Quantum Linear System Algorithm for Dense Matrices[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(5):5
- [31] Hamma A, Lidar D A. Adiabatic preparation of topological order[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(3):4
- [32] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, et al. Quantum Computation by Adiabatic Evolution[J]. arXiv e-prints, 2000. quant-ph/0001106
- [33] Bachmann S, De Roeck W, Fraas M. Adiabatic Theorem for Quantum Spin Systems[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 119:060201
- [34] Osterloh K, Baig M, Santos L, et al. Cold Atoms in Non-Abelian Gauge Potentials: From the Hofstadter "Moth" to Lattice Gauge Theory[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95(1):010403
- [35] Byrnes T, Yamamoto Y. Simulating lattice gauge theories on a quantum computer[J]. *Physical Review A*, 2006, 73(2):16
- [36] Lamm H, Lawrence S, Yamauchi Y. General methods for digital quantum simulation of gauge theories[J]. *Physical Review D*, 2019, 100:034518
- [37] Zohar E, Farace A, Reznik B, et al. Digital Quantum Simulation of \mathbb{Z}_2 Lattice Gauge Theories with Dynamical Fermionic Matter[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118:070501
- [38] Chong F T, Franklin D, Martonosi M. Programming languages and compiler design for realistic quantum hardware[J]. *Nature*, 2017, 549:180
- [39] Wilson K G. Confinement of quarks[J]. *Physical Review D*, 1974, 10:2445–2459
- [40] Gattringer C, Lang C B. Quantum chromodynamics on the lattice[M], volume 788. Berlin: Springer, 2010
- [41] Gazit S, Assaad F F, Sachdev S, et al. Confinement transition of $Z(2)$ gauge theories coupled to massless fermions: Emergent quantum chromodynamics and $SO(5)$ symmetry[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2018, 115(30):E6987–E6995
- [42] Scalapino D J, Sugar R L. Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. II[J]. *Physical Review B*, 1981, 24:4295–4308

- [43] Bongiovanni L. Numerical methods for the sign problem in Lattice Field Theory[J]. eprint arXiv:1603.06458, 2016. arXiv:1603.06458
- [44] Gazit S, Randeria M, Vishwanath A. Emergent Dirac fermions and broken symmetries in confined and deconfined phases of Z(2) gauge theories[J]. Nature Physics, 2017, 13(5):484–490
- [45] Troyer M, Wiese U J. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations[J]. Physical Review Letters, 2005, 94:170201
- [46] Li Z X, Yao H. Sign-Problem-Free Fermionic Quantum Monte Carlo: Developments and Applications[J]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2019, 10:337–356
- [47] Chen C, Xu X Y, Qi Y, et al. Metal to Orthogonal Metal Transition[J]. Chinese Physics Letters, 2020, 37(4):047103
- [48] Tagliacozzo L, Celi A, Lewenstein M. Tensor Networks for Lattice Gauge Theories with Continuous Groups[J]. Physical Review X, 2014, 4:041024
- [49] Cirac J I, Zoller P. Goals and opportunities in quantum simulation[J]. Nature Physics, 2012, 8(4):264–266
- [50] Banerjee D, Dalmonte M, Müller M, et al. Atomic Quantum Simulation of Dynamical Gauge Fields Coupled to Fermionic Matter: From String Breaking to Evolution after a Quench[J]. Physical Review Letters, 2012, 109:175302
- [51] Banerjee D, Bögli M, Dalmonte M, et al. Atomic Quantum Simulation of $\mathbf{U}(N)$ and $\mathbf{SU}(N)$ Non-Abelian Lattice Gauge Theories[J]. Physical Review Letters, 2013, 110:125303
- [52] Zohar E, Reznik B. Confinement and Lattice Quantum-Electrodynamic Electric Flux Tubes Simulated with Ultracold Atoms[J]. Physical Review Letters, 2011, 107:275301
- [53] Zohar E, Cirac J I, Reznik B. Simulating Compact Quantum Electrodynamics with Ultracold Atoms: Probing Confinement and Nonperturbative Effects[J]. Physical Review Letters, 2012, 109:125302
- [54] Zohar E, Cirac J I, Reznik B. Cold-Atom Quantum Simulator for $\mathbf{SU}(2)$ Yang-Mills Lattice Gauge Theory[J]. Physical Review Letters, 2013, 110:125304
- [55] Davoudi Z, Hafezi M, Monroe C, et al. Towards analog quantum simulations of lattice gauge theories with trapped ions[J]. Physical Review Research, 2020, 2(2):023015
- [56] Tagliacozzo L, Celi A, Orland P, et al. Simulation of non-Abelian gauge theories with optical lattices[J]. Nature Communications, 2013, 4:8
- [57] Schweizer C, Grusdt F, Berngruber M, et al. Floquet approach to & Z_2 lattice gauge theories with ultracold atoms in optical lattices[J]. Nature Physics, 2019, 15(11):1168–1173

- [58] Kasper V, Hebenstreit F, Jendrzejewski F, et al. Implementing quantum electrodynamics with ultracold atomic systems[J]. *New Journal of Physics*, 2017, 19(2):023030
- [59] Martinez E A, Muschik C A, Schindler P, et al. Real-time dynamics of lattice gauge theories with a few-qubit quantum computer[J]. *Nature*, 2016, 534(7608):516+
- [60] Kokail C, Maier C, Bijnen R, et al. Self-verifying variational quantum simulation of lattice models (vol 569, pg 355, 2020)[J]. *Nature*, 2020, 580(7804):E9
- [61] Jones T, Brown A, Bush I, et al. QuEST and High Performance Simulation of Quantum Computers[J]. eprint arXiv:1802.08032, 2018. arXiv:1802.08032
- [62] Klco N, Dumitrescu E F, McCaskey A J, et al. Quantum-classical computation of Schwinger model dynamics using quantum computers[J]. *Physical Review A*, 2018, 98:032331
- [63] Villalonga B, Lyakh D, Boixo S, et al. Establishing the Quantum Supremacy Frontier with a 281 Pflop/s Simulation[J]. arXiv e-prints, 2019. arXiv:1905.00444
- [64] Senthil T, Fisher M P A. Fractionalization and confinement in the U(1) and Z(2) gauge theories of strongly correlated systems[J]. *Journal of Physics a-Mathematical and General*, 2001, 34(10):L119–L125
- [65] Kitaev A Y. Fault-tolerant quantum computation by anyons[J]. *Annals of Physics*, 2003, 303(1):2–30
- [66] Zohar E, Farace A, Reznik B, et al. Digital Quantum Simulation of Z(2) Lattice Gauge Theories with Dynamical Fermionic Matter[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118(7):5
- [67] Li K R, Wan Y D, Hung L Y, et al. Experimental Identification of Non-Abelian Topological Orders on a Quantum Simulator[J]. *Physical Review Letters*, 2017, 118(8):5
- [68] Luo Z H, Li J, Li Z K, et al. Experimentally probing topological order and its breakdown through modular matrices[J]. *Nature Physics*, 2018, 14(2):160–+
- [69] Fink J M, Dombi A, Vukics A, et al. Observation of the Photon-Blockade Breakdown Phase Transition[J]. *Physical Review X*, 2017, 7(1):9
- [70] Juricic V, Abergel D S L, Balatsky A V. First-order quantum phase transition in three-dimensional topological band insulators[J]. *Physical Review B*, 2017, 95(16):5
- [71] Cui X, Yang J C, Shi Y. Quantum Simulation of Quantum \mathbb{Z}_2 Gauge Theory demonstrated in a GPU Simulator[J]. arXiv e-prints, 2019. arXiv:1910.08020
- [72] Armstrong M. Basic Topology[M]. Undergraduate Texts in Mathematics, Springer New York, 2013

- [73] Mages S, Tóth B C, Borsányi S, et al. Lattice QCD on nonorientable manifolds[J]. Physical Review D, 2017, 95:094512
- [74] Barends R, Shabani A, Lamata L, et al. Digitized adiabatic quantum computing with a superconducting circuit[J]. Nature, 2016, 534:222
- [75] Shi Y, Wu Y S. Perturbative formulation and nonadiabatic corrections in adiabatic quantum-computing schemes[J]. Physical Review A, 2004, 69(2):024301
- [76] Leeuwen J, (eds.). Handbook of Theoretical Computer Science (Vol. B): Formal Models and Semantics[M]. Cambridge, MA, USA: MIT Press, 1991
- [77] Bellman R. Dynamic Programming Treatment of the Travelling Salesman Problem[J]. J. ACM, 1962, 9(1):61–63
- [78] Björklund A. Determinant Sums for Undirected Hamiltonicity[C]// Proceedings of 2010 IEEE 51st Annual Symposium on Foundations of Computer Science, 2010. 173–182
- [79] Shor P W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring[C]// Proceedings of Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, 1994. 124–134
- [80] Mahasinghe A, Hua R, Dinneen M J, et al. Solving the Hamiltonian Cycle Problem Using a Quantum Computer[C]// Proceedings of Proceedings of the Australasian Computer Science Week Multiconference, New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2019
- [81] Johnson M J, Duvenaud D, Wiltschko A e B, et al. Composing graphical models with neural networks for structured representations and fast inference[J]. arXiv e-prints, 2016. arXiv:1603.06277
- [82] Wang H, Yeung D. Towards Bayesian Deep Learning: A Framework and Some Existing Methods[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2016, 28(12):3395–3408
- [83] Amin M H, Andriyash E, Rolfe J, et al. Quantum Boltzmann Machine[J]. Physical Review X, 2018, 8:021050
- [84] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, et al. Quantum machine learning[J]. Nature, 2017, 549(7671):195–202
- [85] Wiebe N, Kapoor A, Svore K M. Quantum Deep Learning[J]. arXiv e-prints, 2014. arXiv:1412.3489
- [86] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning[J]. arXiv e-prints, 2013. arXiv:1307.0411

- [87] Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. Quantum Support Vector Machine for Big Data Classification[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113:130503
- [88] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum Algorithm for Linear Systems of Equations[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 103:150502
- [89] Wossnig L, Zhao Z, Prakash A. Quantum Linear System Algorithm for Dense Matrices[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(5):050502
- [90] Ahokas G. Improved algorithms for approximate quantum fourier transforms and sparse hamiltonian simulations[C]//. 2004
- [91] Childs A M, Farhi E, Gutmann S. An Example of the Difference Between Quantum and Classical Random Walks[J]. *Quantum Information Processing*, 2002, 1(1):35–43
- [92] Trotter H F. On the Product of Semi-Groups of Operators[J]. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 1959, 10(4):545–551
- [93] Hatano N, Suzuki M. Finding Exponential Product Formulas of Higher Orders[M]. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005: 37–68
- [94] Kennedy A D, Clark M A, Silva P J. Force-gradient integrators[C]// Proceedings of Symposium on Lattice Field Theory, 2009. 21
- [95] Omelyan I P, Mryglod I M, Folk R. Optimized Verlet-like algorithms for molecular dynamics simulations[J]. *Physical Review E*, 2002, 65:056706
- [96] Yoshida H. Symplectic Integrators for Hamiltonian Systems: Basic Theory[J]. *Symposium - International Astronomical Union*, 1992, 152:407–411
- [97] Hut P, Makino J, McMillan S. Building a better leapfrog[J]. *Astrophys Journal*, 1995, 443:L93
- [98] Blote H W J, Deng Y J. Cluster Monte Carlo simulation of the transverse Ising model[J]. *Physical Review E*, 2002, 66(6):8
- [99] Hamer C J. Finite-size scaling in the transverse Ising model on a square lattice[J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2000, 33(38):6683–6698
- [100] Evenbly G, Vidal G. Entanglement Renormalization in Two Spatial Dimensions[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102:180406
- [101] Tagliacozzo L, Vidal G. Entanglement renormalization and gauge symmetry[J]. *Physical Review B*, 2011, 83:115127
- [102] Bhanot G, Creutz M. Variant actions and phase structure in lattice gauge theory[J]. *Physical Review D*, 1981, 24:3212–3217

-
- [103] Benenti G, Casati G, Strini G. Principles of Quantum Computation And Information - Volume I: Basic Concepts[M]. USA: World Scientific Publishing Co., Inc., 2004
 - [104] Garcia-Escartin J C, Chamorro-Posada P. swap test and Hong-Ou-Mandel effect are equivalent[J]. Physical Review A, 2013, 87(5):052330
 - [105] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. Quantum Random Access Memory[J]. Physical Review Letters, 2008, 100:160501
 - [106] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. Architectures for a quantum random access memory[J]. Physical Review A, 2008, 78:052310
 - [107] Berry D W, Ahokas G, Cleve R, et al. Efficient Quantum Algorithms for Simulating Sparse Hamiltonians[J]. Communications in Mathematical Physics, 2007, 270(2):359–371

攻读博士学位期间撰写的论文情况

- [1] Xiaopeng Cui, Yu Shi and Ji-Chong Yang. Circuit-based digital adiabatic quantum simulation and pseudoquantum simulation as new approaches to lattice gauge theory[J]. Journal of High Energy Physics, 2020 (已接收)
- [2] Xiaopeng Cui, Yu Shi. Trotter errors in digital adiabatic quantum simulation of quantum Z_2 lattice gauge theory[J], International Journal of Modern Physics B, 2020 (已接收)
- [3] Xiaopeng Cui, Yu Shi and Ji-Chong Yang. Topological quantum phase transition of quantum Z_2 lattice gauge theory induced by lattice topology change (投稿中)
- [4] Xiaopeng Cui, Yu Shi. Application of quantum Z_2 gauge theory in graph theory HCP problem (投稿中)
- [5] Xiaopeng Cui, Yu Shi. QBLAS: a quantum basic linear algebra and simulation library (投稿中)

致谢

本文是在导师施郁教授的悉心指导下完成的。承蒙施郁老师的亲切关怀和精心指导，虽然有繁重的科研和教学工作，但仍抽出时间给予我学术上积极的引导和鼓励。本人硕士期间是做凝聚态方向的研究，抱着对量子计算的浓厚兴趣转而报考了复旦大学施老师的理论物理课题组。施老师包容的风格和热心的引导，得以让我进入该课题组从事自己所喜欢的研究。研究方向的转换是困难的，然而施老师严谨的科研态度、广博的知识积累、勤勉的工作作风以及宽松活跃的科研风格给予了我诸多研究上的支持以及学术道路上的引导，从而得以完成本文研究。在本文研究进行期间，施老师关于规范场论的详细介绍以及在量子计算方向深入浅出的教导给予本文研究予以了启发，奠定了基础。施老师不辞辛劳地对研究加以指导，调整方案，优化内容，也在发表论文的写作上花费大量精力，才使得最终的文章呈现更加严密和完善。在此，谨向施老师致以深深的敬意和由衷的感谢。

另外，特别感谢杨冀翀博后的合作研究给予本文前两部分内容提供的理论支持。前两部分内容研究期间，曾于杨冀翀博后进行了广泛的交流和探讨，其也对研究的方向和方法给出了很多良好建议。也要感谢吴大维，毛卿卿，汤山昌等课题组同学平日科研生活中的积极讨论和互相启发，以及毛卿卿同学在入学阶段给予的生活上的多方面照料。同时感谢 USTC GPU 超算集群提供的高性能计算支持。本文工作受益于 GPU 并行加速技术良多。也要感谢如 QuEST, Q# 等优秀开源软件项目和开源社区的支持，其基础性的量子模拟器及开源代码工作加速了本文的研究进程。

特别地，要感谢我的家人在生活上给予我的支持和鼓励，多年来，是他们给予我信心和力量使得我能够坚持完成自己的研究和学业。家人的力量总是最特殊的激励，时时刻刻伴随左右。

最后，感谢生活学习上多次给予帮助的辅导员们和其他所有关心、支持和帮助我的同学、朋友、老师们。如涓涓细流汇成大河，是你们的帮助汇聚为强大的支持力量。

复旦大学 学位论文独创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。论文中除特别标注的内容外，不包含任何其他个人或机构已经发表或撰写过的研究成果。对本研究做出重要贡献的个人和集体，均已在论文中作了明确的声明并表示了谢意。本声明的法律结果由本人承担。

作者签名: 崔晓鹏 日期: 2020.8.10

复旦大学 学位论文使用授权声明

本人完全了解复旦大学有关收藏和利用博士、硕士学位论文的规定，即：学校有权收藏、使用并向国家有关部门或机构送交论文的印刷本和电子版本；允许论文被查阅和借阅；学校可以公布论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其它复制手段保存论文。涉密学位论文在解密后遵守此规定。

作者签名: 崔晓鹏 导师签名: 施仰 日期: 2020.8.10