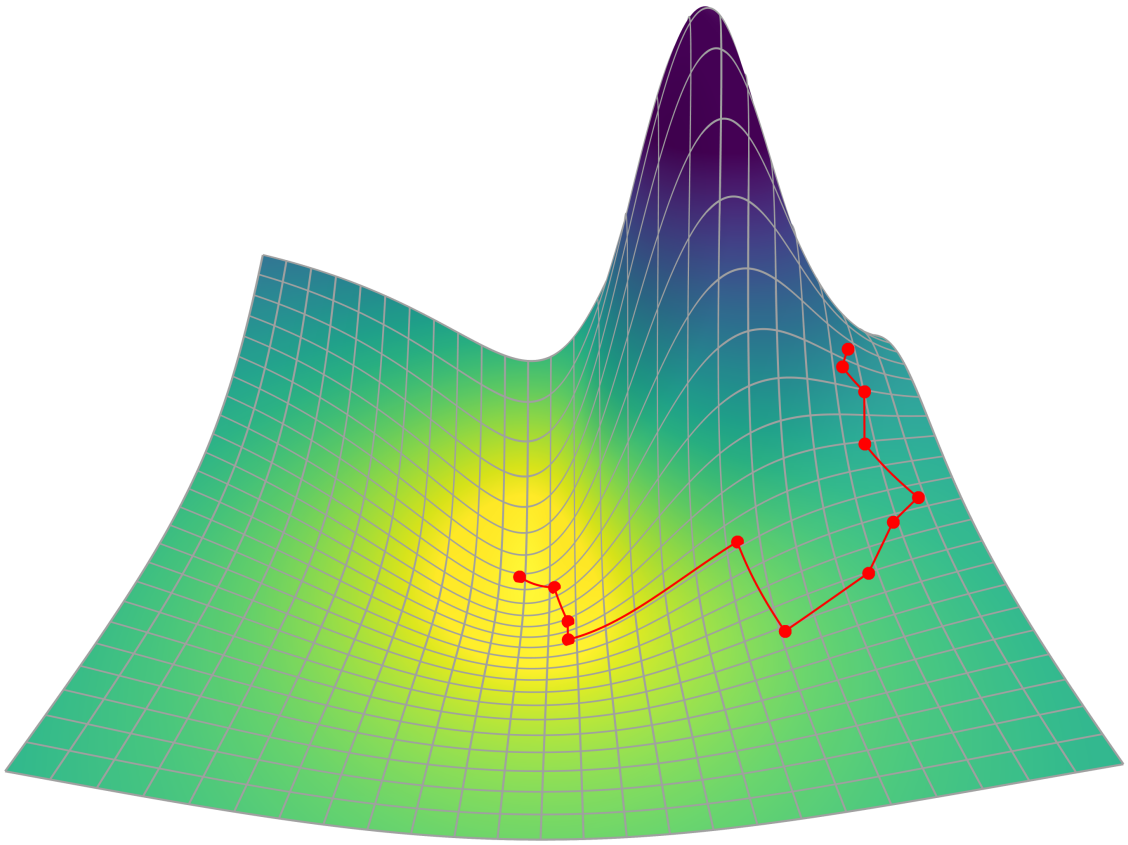
CHALMERS



Simulering av mångpartikelsystem på en emulerad kvantdator

Variational Quantum Eigensolver-algoritmen applicerad på Lipkinmodellen

Kandidatarbete inom Teknisk fysik

CARL EKLIND SEBASTIAN HOLMIN JOEL KARLSSON

AXEL NATHANSON ERIC NILSSON

Institutionen för Fysik
CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
Göteborg, Sverige 2019

Kandidatarbete inom Teknisk fysik

Simulering av mångpartikelsystem på en emulerad kvantdator

Variational Quantum Eigensolver-algoritmen applicerad på Lipkinmodellen

Carl Eklind
Sebastian Holmin
Joel Karlsson
Axel Nathanson
Eric Nilsson



CHALMERS

Institutionen för fysik
Avdelningen för subatomär fysik och plasmafysik
Chalmers tekniska högskola
Göteborg, Sverige 2019

Simulering av mångpartikelsystem på en emulerad kvantdator
Variational Quantum Eigensolver-algoritmen applicerad på Lipkinmodellen

Carl Eklind
Sebastian Holmin
Joel Karlsson
Axel Nathanson
Eric Nilsson

© Carl Eklind, Sebastian Holmin, Joel Karlsson, Axel Nathanson, Eric Nilsson, 2019.

Handledare: Andreas Ekström, Christian Forssén, Institutionen för fysik
Examinator: Jan Swenson, Institutionen för fysik

Kandidatarbete inom Teknisk fysik
Institutionen för fysik
Avdelningen för subatomär fysik och plasmafysik
Chalmers tekniska högskola
SE-412 96 Göteborg
Telefon +46 31 772 1000

Omslagsbild: Illustration av 13 utvalda optimeringssteg utförda med Nelder-Mead- och Variational Quantum Eigensolver-algoritmen för att bestämma grundtillståndsenergin för ett system i Lipkinmodellen med 5 partiklar. En interaktiv version av figuren återfinns på `https://plot.ly/~nieric/20.embed`.

Göteborg, Sverige 2019

Simulating Many-Particle Systems on an Emulated Quantum Computer
The Variational Quantum Eigelsolver Algorithm Applied on the Lipkin Model

Carl Eklind
Sebastian Holmin
Joel Karlsson
Axel Nathanson
Eric Nilsson

Department of Physics
Division of Subatomic and Plasma Physics
Chalmers University of Technology

Abstract

In this study we apply the Variational Quantum Eigensoler (VQE) algorithm on systems in the Lipkin model to solve for the ground state energies, using an emulated quantum computer developed by Rigetti Computing. The variational parameters are optimized with the Nelder-Mead method and a Bayesian optimization algorithm.

By exploiting the quasi-spin symmetry of the Hamiltonian, we reduce the dimension of the Hamiltonian matrix, and subsequently apply the VQE algorithm on up to 4×4-matrices, corresponding to a seven-particle Lipkin model. Furthermore, we construct tailored ansätze and compare them to the established Unitary Coupled-Cluster ansatz.

We perform an extensive study of how to distribute the measurements on the Quantum Virtual Machine (QVM) to minimize the error. Using the optimal combination of optimization algorithm, ansatz and number of samples per expectation value estimate, we calculate the ground state energy, given a total of 3 million measurements on the QVM, for different values of the interaction parameter V/ϵ. We conclude that both the Nelder-Mead and Bayesian optimization algorithm are able to calculate the ground state energy for the seven-particle Lipkin model within 1.2 % and 0.7 % of the analytical energy, respectively.

We find that the Bayesian optimization algorithm performs significantly better for a lower number of total measurements on the QVM while, for a higher number, the Nelder-Mead algorithm exhibits a more stable behaviour. Therefore, we predict that a combination of the two optimization algorithms might be more efficient than using each on their own.

The thesis is written in Swedish.

Keywords: Quantum Computing, VQE, Lipkin model, Nelder-Mead method, Bayesian optimization, UCC, many-body theory.

Simulering av mångpartikelsystem på en emulerad kvantdator
Variational Quantum Eigensolver-algoritmen applicerad på Lipkinmodellen

Carl Eklind
Sebastian Holmin
Joel Karlsson
Axel Nathanson
Eric Nilsson

Institutionen för fysik
Avdelningen för subatomär fysik och plasmafysik
Chalmers tekniska högskola

Sammandrag

I denna studie applicerar vi Variational Quantum Eigensolver-algoritmen (VQE) på system i Lipkinmodellen för att bestämma grundtillståndsenergierna, med hjälp av en emulerad kvantdator utvecklad av Rigetti Computing. Variationsparametrarna optimeras med Nelder-Meadalgoritmen såväl som en Bayesiansk optimeringsalgoritm.

Genom att utnyttja Hamiltoninanens kvasispinnsymmetri, reducerar vi Hamiltonianmatrisens dimension, varpå vi applicerar VQE-algoritmen på upp till 4×4-matriser, vilket svarar mot ett Lipkinsystem med sju partiklar. Utöver detta konstruerar vi nya ansatser och jämför dessa med den etablerade Unitary Coupled-Clusteransatsen.

Vi genomför en omfattande analys av hur mätningarna på den emulerade kvantdatorn bör fördelas för att minimera felet. Med den optimala kombinationen av optimeringsalgoritm, ansats och antal samplingar per väntevärdesskattning, bestämmer vi grundtillståndsenergin, givet totalt 3 miljoner mätningar på den emulerade kvantdatorn, för olika värden på interaktionsparametern V/ϵ. Nelder-Meadalgoritmen och den Bayesianska optimeringsalgoritmen lyckas här beräkna grundtillståndsenergin för ett Lipkinsystem med sju partiklar inom 1.2 % respektive 0.7 % av den analytiska energin.

Vidare observerar vi att den Bayesianska optimeringsalgoritmen presterar betydligt bättre för mindre totala antal mätningar på den emulerade kvantdatorn medan Nelder-Meadalgoritmen uppvisar ett mer stabilt beteende med fler mätningar. Baserat på detta tror vi att en kombination av de två algoritmerna kan vara att föredra framför var och en för sig.

Nyckelord: Kvantdatorer, VQE, Lipkinmodellen, Nelder-Meadmetoden, Bayesiansk optimering, UCC, mångkropparsfysik.

Förord

Vi vill tacka våra handledare Andreas Ekström och Christian Forssén för deras engagerande möten, entusiasm och stöd i arbetet med detta projekt. Vidare vill vi tacka Håkan Johansson för teknisk support och assistans som besparade oss många timmar, samt hela gruppen vid teoretisk subatomär fysik för att vi fick använda deras datorer till simuleringarna.

Författarna, Göteborg, 9 juni 2019

Innehållsförteckning

1 Introduktion **1**

2 Lipkinmodellen **3**
2.1 Systemets Hamiltonian . . . 3
2.2 Hamiltonianen i kvasispinnformulering . . . 5

3 Variational Quantum Eigensolver **7**
3.1 Kvantbitar och kvantdatorer . . . 7
3.2 Algoritmens uppbyggnad . . . 8
3.3 Från matris till operator . . . 10
3.3.1 Enpartikelkodning med Jordan-Wignertransform . . . 10
3.3.2 Binär kvantbitkodning . . . 11
3.4 Ansatser . . . 12
3.4.1 Unitary Coupled-Clusteransats . . . 13
3.4.2 Quantum State Generator-ansats . . . 14
3.5 Implementation . . . 15
3.5.1 Optimeringsalgoritmer . . . 15
3.5.2 Variansskattning . . . 16

4 Resultat **17**
4.1 Omstart av Nelder-Meadalgoritmen . . . 18
4.2 Jämförelse av metod . . . 20
4.2.1 Matriskodning och ansatser . . . 20
4.2.2 Optimeringsalgoritmer och ansatser . . . 21
4.2.3 Slutsats . . . 23
4.3 Demonstration med ett Lipkinsystem med sju partiklar . . . 24

5 Diskussion **26**

Referenser **28**

A Beteckningar

B Lipkinmodellen

C VQE

D Kodstruktur

E Kompletterande resultat

1. Introduktion

Utvecklingen av den digitala datorn på 1940-talet medförde nya möjligheter att i detalj undersöka fysikaliska fenomen. Datorernas beräkningskraft, mätt i antalet transistorer som får plats på ett beräkningschip, har nästan fördubblats vartannat år sedan 1900-talets andra hälft [1], men tekniska begränsningar innebär att denna tillväxt riskerar att avstanna inom några år. Dessutom förutspådde Richard Feynman redan 1982 att transistorbaserade datorer aldrig kommer bli tillräckligt kraftfulla för att simulera kvantmekaniska system [2]. Han föreslog istället att konstruera en dator bestående av komponenter med kvantmekaniska egenskaper: en så kallad kvantdator.

Stora resurser satsas i dagsläget på att utveckla och förbättra kvantdatorer, med framtida potential att användas inom allt från kemi- och nanoteknik till kryptering och maskininlärning [3]. Nyligen har Chalmers tekniska högskola påbörjat en forskningssatsning med målet att utveckla en kvantdator med en beräkningskapacitet större än dagens superdatorer, det vill säga att uppnå *quantum supremacy*.

Kvantdatorer utnyttjar manipulation av kvantfenomen, via så kallade kvantbitar, för att göra beräkningar. Till skillnad från vanliga digitala bitar kan kvantbitar befinna sig i superpositioner och sammanflätade tillstånd. Dessa egenskaper tros kunna effektivisera lösningen av vissa problem, vilka i dagsläget är alltför beräkningstunga för klassiska datorer.

Två exempel på nya, mer effektiva, algoritmer väl lämpade för kvantdatorer är *Quantum Fourier Transform* och *Quantum Searching* [4, kap. 4], där den första tillämpas i *Shors algoritm* för heltalsfaktorisering och den senare kan användas inom bland annat statistik och kryptografi. Dessa algoritmer ger en exponentiell respektive kvadratisk förbättring i tidskomplexitet, jämfört med klassiska algoritmer för likvärdiga problem.

Exempel på fysikaliska problem som är svåra att lösa med klassiska datorer är just kvantsystem med många starkt växelverkande partiklar. I den här studien undersöker vi möjligheten att använda en kvantdator för att bestämma grundtillståndsenergin till idealiserade mångpartikelsystem definierade av Lipkinmodellen [5]. Denna har tidigare använts för att modellera ett flertal fenomen som fasövergångar och kollektiv dynamik av mångfermionsystem [6].

Många fysikaliska problem kan reduceras till egenvärdesproblem, vilka kan lösas med den kvant-klassiska hybridalgoritmen *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) [7], [8]. Metoden bygger på variationsprincipen, där en kvantdator används för att beräkna väntevärdet av Hamiltonianen för en variationsansats, medan en klassisk algoritm optimerar variationsparametrarna.

I den här studien emulerar vi en kvantdator med ett fåtal kvantbitar på en klassisk dator med en så kallad *Quantum Virtual Machine* (QVM). För detta ändamål används *Forest SDK* (*Software Development Kit*) [9] utvecklat av Rigetti Computing.

Syfte
Denna studie syftar till att analysera olika metoder för att beräkna grundtillståndsenergin för ett mångpartikelsystem definierad av Lipkinmodellen med hjälp av VQE-algoritmen på en ideal kvantdator. Energiegenvärdena för Lipkinsystem kan bestämmas analytiskt, vilket tillåter oss att analysera hur väl grundtillståndsenergin kan beräknas med VQE-algoritmen, där i synnerhet val av ansats och optimeringsalgoritm utvärderas.

Rapportstruktur
I kapitel 2 introduceras Lipkinmodellen där Hamiltonianen blockdiagonaliseras via kvasi-spinnformalism. Kapitel 3 inleds med en introduktion till kvantdatorer och VQE-algoritmen, varpå både ett antal metoder för att beräkna väntevärdet av hermiteska operatorer och för att konstruera ansatser presenteras. Därefter introduceras två klassiska optimeringsmetoder: Nelder-Meadalgoritmen och en Bayesiansk optimeringsalgoritm.

I avsnitt 4.1 utvärderas och vidareutvecklas Nelder-Meadalgoritmen. Därefter, i avsnitt 4.2, analyseras ansatsmetoderna utifrån realiserbarheten på verkliga kvantdatorer och optimeringsalgoritmernas prestation. Slutligen beräknas grundtillståndsenergin för ett Lipkinsystem med sju partiklar. I kapitel 5 diskuteras både resultatet och förslag på fortsatta studier.

I denna studie undersöks enbart ideala kvantbitar och kvantdatorer, där alla kvantbitar är sammankopplade. Ytterligare avgränsningar med avseende på bland annat parametrar och antal partiklar i Lipkinmodellen, antalet mätningar på kvantdatorn och optimeringsalgoritmer presenteras i tillhörande kapitel. En beteckningslista över de mest frekvent förekommande beteckningarna som används återfinns i appendix A.

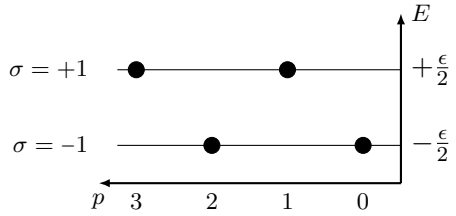
2. Lipkinmodellen

Lipkinmodellen beskriver ett kvantmekaniskt mångpartikelsystem och publicerades 1964 [5]. Denna modell behandlar ett system bestående av N fermioner, där varje partikel populerar en av två N-faldigt degenererade energinivåer, separerade med energin ϵ. Varje enpartikeltillstånd kan beskrivas med två kvanttal, σ och p. Kvanttalet $\sigma = \pm 1$ representerar de två energi-nivåerna, med energier $\pm\epsilon/2$, och $p = 0, 1, 2, ..., N-1$, som är unikt och bevarat för varje partikel, numrerar den N-faldiga degenerationen inom varje energinivå. Modellen beskriver således ett system med $2N$ enpartikeltillstånd som kan kombineras till 2^N ortogonala N-partikeltillstånd.

Vi använder andrakvantiseringsformalismen med Focktillstånd som bas* för att beskriva de olika tillstånden i Lipkinmodellen. Låt $|n_1, n_2, ..., n_{2N}\rangle$ beteckna Focktillståndet med $n_k \in \{0, 1\}$ fermioner i enpartikeltillstånd k, där k räknar över de $2N$ olika kombinationerna av σ och p. Dessa Focktillstånd utgör en ortonormalbas till Hilbertrummet [10, s. 17] och uppfyller alltså

$$\langle n_1, ..., n_{2N} | n'_1, ..., n'_{2N} \rangle = \prod_{k=1}^{2N} \delta_{n_k n'_k} .$$

Genom att sortera p stigande från höger till vänster i ket-vektorn kan representationen av bastillstånden reduceras till ett binärt tal. Tillståndet betecknas då $|i_N\rangle$, där antalet partiklar N bestämmer längden av det binära talet. Med denna representation svarar talet 1 (0) på position p i ket-vektorn mot att enpartikeltillståndet med p och $\sigma = 1$ ($\sigma = -1$) är ockuperat av en partikel. Exempelvis svarar vektorn $|10_4\rangle = |1010\rangle$ mot ett bastillstånd där partiklarna med kvanttal $p = 1$ och $p = 3$ är exciterade. En illustration av detta tillstånd återfinns i figur 2.1.



Figur 2.1: *Illustration av bastillståndet $|10_4\rangle = |1010\rangle$ med $N = 4$. Varje prick representerar ett ockuperat enpartikeltillstånd. Här är partiklarna med kvanttal $p = 1$ och $p = 3$ exciterade.*

2.1 Systemets Hamiltonian

För att beskriva systemets Hamiltonian introducerar vi skapelse- och förintelseoperatorerna $a^\dagger$ och a vars algebraiska definition [10, s. 19] är att de uppfyller antikommutationsrelationerna‡

*Läs mer i exempelvis *Advanced Quantum Mechanics*, Franz Schwabl [10, kap. 1].

‡Antikommutatorn och kommutatorn, för två operatorer A och B, definieras av $\{A, B\} = AB + BA$ respektive $[A, B] = AB - BA$.

$$\{a_k^\dagger, a_l^\dagger\} = \{a_k, a_l\} = 0\,, \quad \{a_k^\dagger, a_l\} = \delta_{kl}.$$

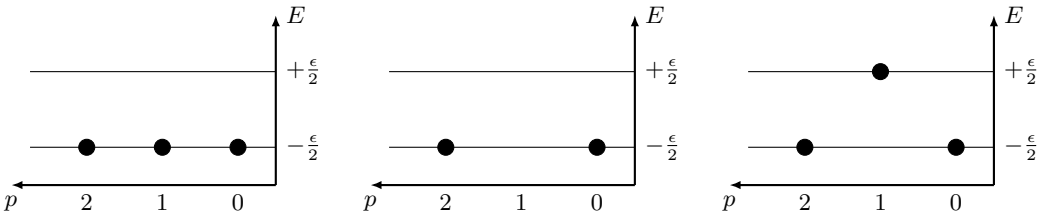
Dessa operatorer verkar på ett fermioniskt Focktillstånd [10, s. 18] enligt

$$a_k^\dagger|..., n_{k-1}, n_k, n_{k+1}, ...\rangle = (1 - n_k)\, \exp(\mathrm{i}\pi\varphi)\, |..., n_{k-1}, n_k + 1, n_{k+1}, ...\rangle,$$
$$a_k|..., n_{k-1}, n_k, n_{k+1}, ...\rangle = n_k\, \exp(\mathrm{i}\pi\varphi)\, |..., n_{k-1}, n_k - 1, n_{k+1}, ...\rangle,$$

där fasen $\varphi = \sum_{l<k} n_l$. I enlighet med ovan svarar k mot kvanttalen σ och p i Lipkinmodellen varför operatorerna hädanefter indexeras $a_{\sigma p}^\dagger$ och $a_{\sigma p}$. Exempelvis opererar $a_{11}^\dagger a_{\text{-}11}$ på trepartikeltillståndet $|000\rangle$ enligt

$$a_{11}^\dagger a_{\text{-}11}\, |000\rangle = |010\rangle\,, \tag{2.1}$$

där $a_{\text{-}11}$ först förintar partikeln med $p = 1$ som befinner sig i grundtillståndet ($\sigma = -1$), varpå $a_{11}^\dagger$ skapar en exciterad partikel på samma position. En illustration av hur operatorerna i (2.1) verkar på tillståndet $|000\rangle$ presenteras i figur 2.2.



a) *Tillståndet* $|000\rangle$. b) *Tillståndet* $a_{\text{-}11}\,|000\rangle$ c) *Tillståndet* $|010\rangle$.

Figur 2.2: *Illustration av exemplet i* (2.1). *Notera att tillståndet i b) endast är en artefakt av andrakvantiseringsberäkningar och ligger utanför systemets Hilbertrum.*

Hamiltonianen för Lipkinmodellen definieras på andrakvantiseringsform enligt [5]

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2}\,\epsilon \sum_{\sigma p} \sigma\, a_{\sigma p}^\dagger\, a_{\sigma p}}_{\equiv \mathcal{H}_\epsilon} + \underbrace{\frac{1}{2}\, V \sum_{\sigma p p'} a_{\sigma p}^\dagger\, a_{\sigma p'}^\dagger\, a_{\text{-}\sigma p'}\, a_{\text{-}\sigma p}}_{\equiv \mathcal{H}_V}, \tag{2.2}$$

där parametern ϵ beskriver enpartikelenergin medan V är ett mått på styrkan av växelverkan mellan par av partiklar inom samma energinivå. Utan inskränkning betraktas $\epsilon > 0$ då σ kan omnumreras, medan V antas positiv. Givet antalet partiklar N bildar vi nu Hamiltonianmatrisen H via

$$H_{ij} = \langle i_N|\mathcal{H}|j_N\rangle, \tag{2.3}$$

där $|i_N\rangle$ och $|j_N\rangle$ är bastillstånd med $i, j \in \{0, 1, ..., 2^N - 1\}$. Enpartikeloperatorn $\mathcal{H}_\epsilon$ motsvarar den totala enpartikelenergin, då den räknar antalet partiklar i de två energinivåerna. Bastillstånden $\{|i_N\rangle\}$ är därför egentillstånd till $\mathcal{H}_\epsilon$ vilket genererar element på diagonalen i matrisrepresentationen av $\mathcal{H}$. Tvåpartikeloperatorn $\mathcal{H}_V$ ger ett nollskilt bidrag för varje par av partiklar inom samma energinivå och kan därför tolkas som en repulsion. Operatorn flyttar partiklarna till motsatt energinivå, exempelvis $\mathcal{H}_V\,|0011\rangle = V\,|1111\rangle + V\,|0000\rangle$*. Egentillstånd till operatorn $\mathcal{H}$ motsvarar egenvektorer till matrisen H med samma energiegenvärde. Exempel på framtagna matriser för Lipkinmodellen enligt (2.3) för två och tre partiklar återfinns i appendix B.1.

*Varje tillstånd räknas dubbelt i summan, varför det är en faktor 1/2 i $\mathcal{H}_V$.

2.2 Hamiltonianen i kvasispinnformulering

Matriserna genererade enligt (2.3) ökar snabbt i storlek med växande N och att bestämma egenvärdena blir beräkningstungt. För att reducera storleken av matriserna inför vi så kallade *kvasispinnoperatorer*

$$\mathcal{J}_z \equiv \frac{1}{2} \sum_{\sigma p} \sigma \, a^\dagger_{\sigma p} \, a_{\sigma p} \,, \quad \mathcal{J}_\pm \equiv \sum_p a^\dagger_{\pm 1\, p} \, a_{\mp 1\, p} \,, \quad \mathcal{J}^2 \equiv \frac{1}{2} \left(\mathcal{J}_+ \, \mathcal{J}_- + \mathcal{J}_- \, \mathcal{J}_+ \right) + \mathcal{J}_z^2 \,. \tag{2.4}$$

$\mathcal{J}$-operatorerna uppfyller de kanoniska kommutationsrelationerna för spinnoperatorer [5], vilka lyder

$$[\mathcal{J}_\alpha, \mathcal{J}_\beta] = \mathrm{i} \, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \, \mathcal{J}_\gamma \,, \qquad [\mathcal{J}_z, \, \mathcal{J}_\pm] = \pm \mathcal{J}_\pm \,, \qquad [\mathcal{J}_+, \mathcal{J}_-] = 2 \, \mathcal{J}_z \,.$$

där $\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$, ε betecknar Levi-Civitatensorn och $\mathcal{J}_\pm = \mathcal{J}_x \pm \mathrm{i} \, \mathcal{J}_y$. Detta medför att operatorn $\mathcal{J}^2$ uppfyller

$$[\mathcal{J}^2, \, \mathcal{J}_z] = [\mathcal{J}^2, \mathcal{J}_\pm] = 0 \,.$$

Vidare existerar det simultana egentillstånd $|J\, m\rangle$ till $\mathcal{J}^2$ och $\mathcal{J}_z$ [11, ss. 8-9] som uppfyller

$$\begin{cases} \mathcal{J}^2 |J\, m\rangle & = J(J+1) \, |J\, m\rangle \,, \\ \mathcal{J}_z |J\, m\rangle & = m \, |J\, m\rangle \,, \\ \mathcal{J}_\pm |J\, m\rangle & = \sqrt{(J \mp m)(J \pm m + 1)} \, |J \, (m \pm 1)\rangle \,, \end{cases} \tag{2.5}$$

där $m \in \{-J, -J+1, \ldots, J\}$. Hamiltonianen definierad i (2.2) kan uttryckas med hjälp av kvasispinnoperatorerna enligt

$$\mathcal{H} = \epsilon \, \mathcal{J}_z + \frac{1}{2} V \left(\mathcal{J}_+^2 + \mathcal{J}_-^2 \right) .$$

Då operatorn $\mathcal{J}^2$ kommuterar med $\mathcal{J}_z$, $\mathcal{J}_+$ och $\mathcal{J}_-$ kommuterar den även med $\mathcal{H}$, varför

$$\mathcal{J}^2 \mathcal{H} \, |J\rangle = \mathcal{H} \mathcal{J}^2 \, |J\rangle = J(J+1) \mathcal{H} \, |J\rangle \,.$$

Således avbildar $\mathcal{H}$ egentillstånd till $\mathcal{J}^2$ på andra egentillstånd till $\mathcal{J}^2$ med samma egenvärde och kan därmed skrivas som en direkt summa

$$\mathcal{H} = \bigoplus_J \mathcal{H}_J \,, \tag{2.6}$$

där $\mathcal{H}_J$ är Hamiltonianen inskränkt till egenrummet till $\mathcal{J}^2$ med egenvärde $J(J+1)$. Uttryckt i en bas av egentillstånd till $\mathcal{J}^2$ blir Hamiltonianmatrisen alltså blockdiagonal med matriser av dimension $2J+1$ för varje möjligt J.

Vi undersöker nu vilka J i (2.6) som förekommer i Lipkinsystemet med N partiklar. Notera att $\mathcal{J}_z$, definierad i (2.4), kan tolkas som halva skillnaden mellan antalet exciterade partiklar och antalet partiklar i grundtillståndet, eftersom $a^\dagger_{\sigma p} \, a_{\sigma p}$ räknar antalet partiklar i σp-tillståndet. Det största värdet som m kan anta är därför $N/2$, vilket erhålls när alla partiklar är exciterade. Från denna tolkning inses även att då N är jämnt eller udda antar m endast heltals- respektive halvtalsvärden. Då $m \in \{-J, -J+1, \ldots, J\}$ gäller därför att $J \in \{N/2 - \lfloor N/2 \rfloor, ..., N/2 - 1, N/2\}$*.

*$\lfloor \cdot \rfloor$ och $\lceil \cdot \rceil$ betecknar golvfunktionen (*floor*) respektive takfunktionen (*ceiling*).

Eftersom antalet egentillstånd $|J\,m\rangle$ till $\mathcal{J}^2$ och $\mathcal{J}_z$ med unika värden på J och m växer kvadratiskt med N, medan dimensionen på Hilbertrummet är 2^N, måste det finnas flera egentillstånd med samma egenvärden. Vi introducerar nu temporärt ett kvanttal K, med tillhörande operator $\mathcal{K}$, så att $|J\,m\,K\rangle$ betecknar ett unikt tillstånd. Vi har att

$$\mathcal{J}_\pm\mathcal{J}_\mp = \mathcal{J}^2 - \mathcal{J}_z^2 \pm \mathcal{J}_z,$$

där $|J\,m\,K\rangle$ är ett egentillstånd till operatorerna i högerledet och därför även till $\mathcal{J}_\pm\mathcal{J}_\mp$. Således kan vi definiera K så att det bevaras av $\mathcal{J}_\pm$, vilket ger en uppsättning bastillstånd med $m \in \{-J, -J+1, ..., J-1, J\}$ för varje kombination av K och J. Detta innebär att $[\mathcal{K}, \mathcal{J}^2] = [\mathcal{K}, \mathcal{J}_z] = [\mathcal{K}, \mathcal{J}_\pm] = 0$ varför även $[\mathcal{K}, \mathcal{H}_J] = 0$. Följaktligen är $\mathcal{H}_J$ sluten på egenrum till $\mathcal{K}$ och kan delas upp i en direkt summa

$$\mathcal{H}_J = \bigoplus_K \mathcal{H}_{JK}\,,$$

där $\mathcal{H}_{JK}$ är en ytterligare inskränkning av Hamiltonianen till egenrum till $\mathcal{K}$ med egenvärde K. Eftersom Hamiltonianen kan uttryckas i kvasispinnoperatorerna, som är oberoende av $\mathcal{K}$, är $\mathcal{H}_{JK}$ för ett givet J identisk för alla K.

Låt oss nu studera Hamiltonianmatrisen H_{JK} i rummet som spänns upp av $|J\,m\,K\rangle$ för fixt J och K. Från (2.5) fås

$$\mathcal{J}_\pm^2\,|J\,m\,K\rangle = \sqrt{(J\mp m)(J\pm m+1)(J\mp m-1)(J\pm m+2)}\;|J\,(m\pm 2)\,K\rangle\,.$$

Notera att $\mathcal{J}_\pm^2$ endast höjer respektive sänker m-kvanttalet två steg; om vi först numrerar tillstånden med alla element som är separerade med ett jämnt antal steg från $m = -J$ i stigande ordning följt av resterande tillstånd, också i stigande ordning, får vi en blockdiagonal matris. Beteckna dessa med H_J^ν så att $H_{JK} = H_J^1 \oplus H_J^2$ för alla K. Storleken på H_J^1 och H_J^2 ges av $\lceil (2J+1)/2 \rceil$ respektive $\lfloor (2J+1)/2 \rfloor$. Matrisen för fallet $J = 2$, det vill säga ett block till Lipkinsystem med $N \geq 4$ partiklar, i kvasispinnbasen $\{|Jm\rangle\}$ blir då

$$H_2^1 \oplus H_2^2 = \left[\begin{array}{ccc:cc} -2\epsilon & \sqrt{6}V & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{6}V & 0 & \sqrt{6}V & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6}V & 2\epsilon & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & -\epsilon & 3V \\ 0 & 0 & 0 & 3V & \epsilon \end{array}\right]. \tag{2.7}$$

Hamiltonianen i (2.2) kan alltså skrivas som

$$\mathcal{H} = \bigoplus_J \left(\mathcal{H}_J^1 \oplus \mathcal{H}_J^2\right)^{\oplus c_J}, \quad c_J = \binom{N}{N/2-J} - \binom{N}{N/2-J-1}, \tag{2.8}$$

med motsvarande matriser H_J^ν, där c_J betecknar multipliciteten av underrummen och svarar mot antalet K-värden för olika J. Hamiltonianmatriser upp till $J = 5$ återfinns i appendix B.3, medan härledningen av uttrycket för c_J samt värden för N upp till 10, presenteras i appendix B.2.

Att bestämma egenvärdena till $\mathcal{H}$ har således reducerats från att hitta egenvärden till en matris av storlek 2^N till motsvarande problem för varje enskilt block i matrisen, där det största blocket är av storlek $\lceil (N+1)/2 \rceil$. Vidare förekommer egenvärdena i par om ett positivt och ett negativt med samma belopp inom varje $H_J^1 \oplus H_J^2$ [5], varför det är tillräckligt att studera egenvärden med ett bestämt tecken*. Symmetriargumenten ovan resulterar i en betydande reduktion av nödvändig beräkningskraft och poängterar vikten av att utnyttja symmetrier i alla beräkningar så långt det är möjligt.

*I fallet då $\dim(H_J^1 \oplus H_J^2) = 2J+1$ är udda måste alltså 0 vara ett egenvärde.

3. Variational Quantum Eigensolver

Kvantmekaniska mångpartikelproblem har förblivit svårlösta på grund av utmaningen i att representera kvantmekaniska vågfunktioner på klassiska datorer, då problemets dimension växer exponentiellt med antalet partiklar [7]. Kvantdatorer presenterar en möjlig lösning till detta då de förväntas vara bättre på att representera mångpartikelvågfunktioner. Nedan presenteras en introduktion till kvantdatorer och den kvant-klassiska hybridalgoritmen VQE, samt hur denna har implementerat för att beräkna grundtillståndsenergin för Lipkinsystem i programspråket Python.

3.1 Kvantbitar och kvantdatorer

En kvantbit, till skillnad från en klassisk bit, kan befinna sig i en superposition av 0 och 1, varför dess kvantmekaniska tillstånd betecknas

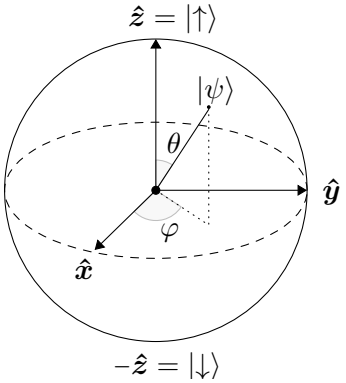
$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \doteq \begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}, \quad \alpha,\beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \tag{3.1}$$

Här svarar kvadraterna av amplitudernas absolutbelopp $|\alpha|^2$ och $|\beta|^2$ mot sannolikheten att vågfunktionen kollapsar till tillståndet $|0\rangle$ respektive $|1\rangle$ vid en mätning av systemet. Ett sätt att representera en kvantbit i verkligheten är att använda spinn-$\frac{1}{2}$ partiklar, så att $|0\rangle$ svarar mot $|\uparrow\rangle$ och $|1\rangle$ mot $|\downarrow\rangle$*. Hädanefter använder vi denna beteckning för att skilja kvantbitarna från bastillstånden i Lipkinmodellen.

En användbar representation av tillståndet för en kvantbit är den så kallade *Blochsfären* [4, s. 15], vilket är en sfär med enhetsradie där varje punkt motsvarar ett val av α och β enligt

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)\,|\uparrow\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin(\theta/2)\,|\downarrow\rangle\,.$$

Superpositionens globala fas saknar fysikalisk betydelse varför α utan inskränkning kan antas vara reell. I denna representation svarar $|\uparrow\rangle$ mot nordpolen på sfären och $|\downarrow\rangle$ mot sydpolen, se figur 3.1.



Figur 3.1: *Representation av tillståndet för en kvantbit med hjälp av Blochsfären. Här är θ och φ de kanoniska sfäriska vinklarna, som bestämmer α och β i* (3.1).

En kvantdator består av ett antal sammankopplade kvantbitar där varje kvantbit initialt befinner sig i det rena tillståndet $|\uparrow\rangle$ så att $|\psi_0\rangle = |\uparrow \ldots \uparrow\rangle$.

Kvantbitarnas tillstånd kan manipuleras med så kallade kvantgrindar, vars operation svarar mot unitära operatorer U. Ett kvantdatorprogram består av en serie av G kvantgrindar som

*Denna representation kan verka kontraintuitiv, men är konvention inom kvantinformatik.

modifierar initialtillståndet enligt*

$$|\psi\rangle = U_G \cdot U_{G-1} \cdot ... \cdot U_1 |\psi_0\rangle$$

och avslutas med en mätning av det resulterande tillståndet, varpå varje kvantbit kollapsar till $|\uparrow\rangle$ eller $|\downarrow\rangle$. För att erhålla en skattning av amplitudernas belopp i kvantbittillståndet behöver kvantdatorprogrammet köras upprepade gångar och resultatet medelvärdesbildas.

Exempel på kvantgrindar är de som svarar mot Paulioperatorerna‡ X, Y och Z. För en enskild kvantbit svarar dessa operatorer mot följande 2×2-matriser:

$$X \doteq \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad Y \doteq \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} \quad Z \doteq \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \text{där} \quad |\uparrow\rangle \doteq \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\downarrow\rangle \doteq \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Följaktligen verkar dessa enligt

$$\begin{aligned} X|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle & X|\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ Y|\uparrow\rangle &= \mathrm{i}|\downarrow\rangle & Y|\downarrow\rangle &= -\mathrm{i}|\uparrow\rangle, \\ Z|\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle & Z|\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle, \end{aligned}$$

vilket kan tolkas som 180°-rotationer kring x-, y- respektive z-axeln på Blochsfären. Vi inkluderar även identiteten I bland Paulioperatorerna, av skäl som framgår senare. Andra exempel på kvantgrindar är rotationsgrindarna $R^\alpha(\theta)$, vilka roterar tillståndet en vinkel θ kring axeln $\alpha \in (x, y, z)$ på Blochsfären [4, ss. xxx-xxxi].

För system av flera kvantbitar, kan vi för en enkvantbitsoperator U välja att betrakta motsvarande operator U_q, definierad för hela systemet men som endast påverkar kvantbit q och lämnar resterande oberörda§. Till exempel ges programmet som utför identiteten I på kvantbit 0, Y på kvantbit 1 och X på kvantbit 2 av $X_2Y_1I_0$, så att

$$X_2Y_1I_0|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = (X|\uparrow\rangle) \otimes (Y|\uparrow\rangle) \otimes (I|\uparrow\rangle) = \mathrm{i}|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle. \tag{3.2}$$

I en verklig kvantdator tillkommer alltid kvantmekaniskt brus som i dagsläget huvudsakligen består av defekter i de unitära grindarna och dekoherens [12]. Detta ger ett fel vid mätning som måste kompenseras för i verkliga applikationer. Det är möjligt att inkludera modeller för olika typer av brus vid emulering av en kvantdator [13], vilket vi i denna studie väljer att avstå från. Tiden under vilken ett system av kvantbitar kan manipuleras innan det blir dekoherent kallas *koherenstid* och sätter en övre gräns på antalet kvantgrindar genom vilka en kvantbit kan passera innan den mäts för att information om amplituderna ska kunna extraheras [4, s. 278].

3.2 Algoritmens uppbyggnad

VQE är en kvant-klassisk hybridalgoritm för att beräkna grundtillståndsenergin hos ett kvantmekaniskt system. Algoritmen bygger på variationsprincipen, vilken innebär att problemet att finna det minsta egenvärdet till en Hamiltonianmatris H kan formuleras som ett

*Produkt av operatorer betecknar, i denna rapport, sammansättning motsvarande matrismultiplikation.
‡Dessa relaterar till spinnoperatorerna S enligt $X = 2S^x$, $Y = 2S^y$ och $Z = 2S^z$.
§För en mer stringent beskrivning av flerkvantbitsystem, se appendix C.1.

optimeringsproblem för en uppsättning variationsparametrar θ. Enligt variationsprincipen är nämligen grundtillståndsenergin $E_0 \leq \langle\psi| \mathcal{H} |\psi\rangle$ med likhet endast då $|\psi\rangle$ är grundtillståndet. För att beräkna E_0 kan således Hamiltonianens väntevärde minimeras enligt

$$E_0 = \min_\theta \langle\psi(\theta)| \mathcal{H} |\psi(\theta)\rangle ,$$

där θ parametriserar tillståndet*.

Givet θ skattas väntevärdet på kvantdatorn för varje term i Hamiltonianen med hjälp av QEE-algoritmen (*Quantum Expectation Estimator*) [8]. En klassisk optimeringsalgoritm uppdaterar sedan parametrarna i ett försök att närma sig ett variationsminimum, se figur 3.2. Eftersom kvantbitarna har ett fördefinierat initialtillstånd $|\psi_0\rangle$ krävs ett ansatskvantdatorprogram vilket definieras av variationsparametrarna θ och svarar mot en operator $A(\theta)$ som verkar enligt

$$|\psi(\theta)\rangle = A(\theta) |\psi_0\rangle ,$$

för att generera det önskade tillståndet $|\psi(\theta)\rangle$. Att kvantdatorprogram svarar mot unitära operatorer försäkrar att $|\psi(\theta)\rangle$ är normerad.

Quantum Expectation Estimator
QEE är en algoritm för att skatta väntevärdet av en Hamiltonian, förutsatt att den är uttryckt som en *Paulisumma*

$$\mathcal{H} = \sum_k c_k \mathcal{P}_k , \quad \mathcal{P}_k = \prod_q P_q^k , \quad P_q^k \in \{I, X, Y, Z\} , \tag{3.3}$$

där c_k är komplexa koefficienter och $\mathcal{P}_k$, fortsättningsvis kallade Paulitermer, sammansättningar av Paulioperatorer P_q^k vilka opererar på kvantbit q.

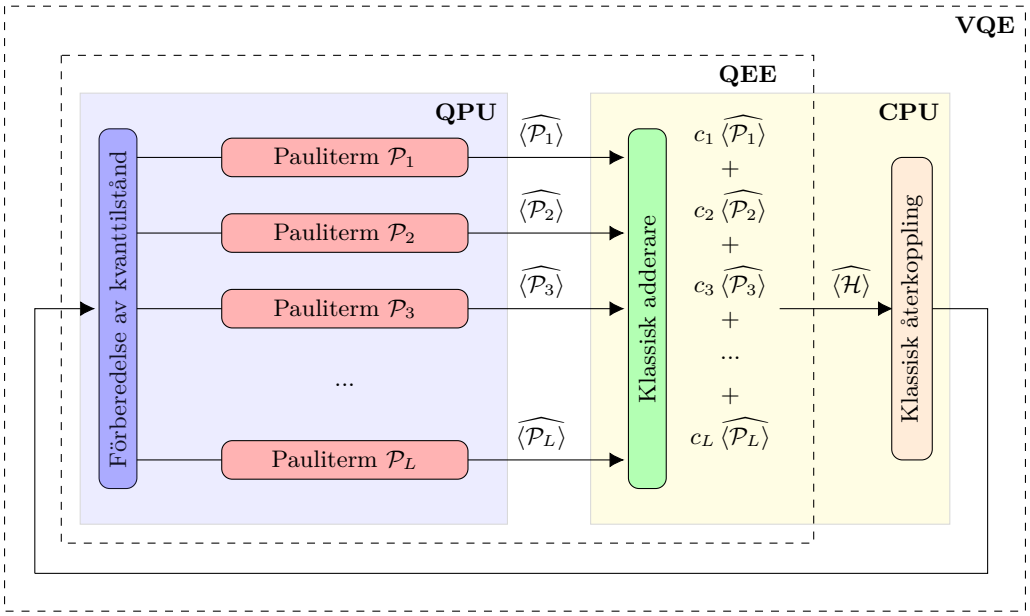
En mätning av observabeln som svarar mot Paulioperatorn Z är ekvivalent med en mätning av kvantbiten, då Z har egentillstånd $|\uparrow\rangle$ och $|\downarrow\rangle$. Vid mätning av Paulioperatorerna X och Y utförs först en rotation som avbildar deras egentillstånd på $|\uparrow\rangle$ och $|\downarrow\rangle$, varpå Z mäts. Nödvändiga rotationer kan realiseras med hjälp av rotationsgrindarna $R^y(-\pi/2)$ och $R^x(\pi/2)$ för X respektive Y. Exempelvis är en mätning av Paulitermen $X_0Y_1Z_2$ för tillståndet $|\psi(\theta)\rangle = A(\theta) |\psi_0\rangle$ ekvivalent med att utföra operationen $R_0^y(-\pi/2)R_1^x(\pi/2)A(\theta)$ på en kvantdator, för att därefter mäta kvantbitarna och bilda produkten av de enskilda egenvärdena.

Ett antal mätningar M_k av en Pauliterm medelvärdesbildas, för att erhålla en skattning $\widehat{\langle\mathcal{P}_k\rangle}$ av Paulitermens väntevärde. Hamiltonianens väntevärde beräknas slutligen som

$$\widehat{\langle\mathcal{H}\rangle} = \sum_k c_k \widehat{\langle\mathcal{P}_k\rangle}. \tag{3.4}$$

Det totala antalet mätningar $M = \sum_k M_k$ som används för att skatta väntevärdet av Hamiltonianen, benämner vi som antalet *samplingar*.

*Om inte θ parametriserar hela Hilbertrummet kan likhet i allmänhet inte garanteras.



Figur 3.2: *Schematisk bild över VQE-algoritmen, översatt och modifierad version av figur från [7]. Tillståndet $|\psi(\theta)\rangle$ förbereds på QPU:n, varpå väntevärdet av Hamiltonianen skattas med QEE-algoritmen. Notera att $\langle \mathcal{P}_k \rangle$ skattas genom att den mäts M_k gånger. Därefter beräknas väntevärdet av Hamiltonian enligt* (3.4)*. Denna skattning av väntevärdet minimeras sedan klassiskt på en CPU genom variation av parametrarna θ.*

3.3 Från matris till operator

Som nämnt måste Hamiltonianen uttryckas som en Paulisumma för att dess väntevärde ska kunna skattas med QEE-algoritmen. Vi utgår här från reducerade matriser från Lipkinmodellen, varför en metod för att konvertera en godtycklig matris till denna form söks. Givet ett underrum av dimension n till kvantbitarnas Hilbertrum, med bas $\{|i\rangle\}_{i=0}^{n-1}$, ges operatorn med matrisrepresentation H i detta underrum av

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} H_{ij} \, |i\rangle\langle j| \ . \tag{3.5}$$

Således är det tillräckligt att uttrycka $|i\rangle\langle j|$ som en Paulisumma. Notera att $|i\rangle\langle j|$ avbildar $|j\rangle$ på $|i\rangle$ och resterande basvektorer på 0, vilket kommer vara en viktig tolkning för de två konstruktionerna som presenteras nedan.

3.3.1 Enpartikelkodning med Jordan-Wignertransform

Lipkinmodellens ursprungliga Hamiltonian uttrycktes i termer av fermioniska operatorer, innan denna reducerades med hjälp av kvasispinnformuleringen till mindre matriser i avsnitt 2.2. Dessa kan uttryckas i en ny uppsättning fermioniska operatorer $\{a_i\}_{i=0}^{n-1}$, för att sedan konverteras till Paulisummor via Jordan-Wignertransformen [14].

Den fermioniska operatorn $a_i^\dagger a_j$ är ekvivalent med $|i\rangle \langle j|$ för ett system med en fermion och n enpartikeltillstånd där Focktillståndet $|0, ..., 0, 1_i, 0, ..., 0\rangle$ är bastillstånd $|i\rangle$. I denna bas kan Hamiltonian alltså uttryckas som

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} H_{ij} a_i^\dagger a_j.$$

På detta uttryck kan Jordan-Wignertransformen appliceras för att transformera $a_i^\dagger$ och a_i till Paulioperatorerna X_i, Y_i och Z_i [11, ss. 62-67] enligt

$$a_i^\dagger \to \frac{1}{2}\left[\prod_{j=0}^{i-1} Z_j\right](X_i - \mathrm{i}Y_i), \quad a_i \to \frac{1}{2}\left[\prod_{j=0}^{i-1} Z_j\right](X_i + \mathrm{i}Y_i)\,.$$

Som exempel betraktar vi fallet med matrisen $H^1_{3/2}$ från Lipkinmodellen:

$$H^1_{3/2} = \begin{bmatrix} -3\epsilon/2 & \sqrt{3}V \\ \sqrt{3}V & \epsilon/2 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{H} = \frac{\epsilon}{2}\left(-3a_0^\dagger a_0 + a_1^\dagger a_1\right) + \sqrt{3}V\left(a_1^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_1\right). \tag{3.6}$$

Hamiltonianen transformeras sedan till en Paulisumma enligt

$$\mathcal{H} = \frac{\epsilon}{4}\left(-2I + 3Z_0 - Z_1\right) + \frac{\sqrt{3}\,V}{2}\left(X_0X_1 + Y_0Y_1\right). \tag{3.7}$$

Denna kodning använder ett underrum till kvantbitarnas Hilbertrum som spänns upp av bastillstånd där exakt en kvantbit är $|\downarrow\rangle$. För att koda en $n \times n$-matris som en operator krävs således $Q \geq n$ kvantbitar. Kodningen utnyttjar alltså ett mycket litet underrum av kvantbitarnas Hilbertrum, vilket har dimension 2^Q, varför en alternativ kodning som ämnar att mer effektivt använda de möjliga konfigurationerna presenteras nedan.

3.3.2 Binär kvantbitkodning

Betrakta nu ett annat underrum där inte nödvändigtvis exakt en kvantbit är $|\downarrow\rangle$ och låt $|i\rangle$ beteckna bastillståndet där kvantbitarna befinner sig i tillståndet som svarar mot det binära talet i^*. Vi inför följande operatorer

$$S^\pm = \frac{X \pm \mathrm{i}\,Y}{2}\,, \qquad C^{\uparrow\downarrow} = \frac{I \pm Z}{2}\,.$$

Det gäller att

$$\begin{cases} S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \\ S^-|\downarrow\rangle = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} S^+|\uparrow\rangle = 0 \\ S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \end{cases}$$

$$\begin{cases} C^\uparrow|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \\ C^\uparrow|\downarrow\rangle = 0 \end{cases} \qquad \begin{cases} C^\downarrow|\uparrow\rangle = 0 \\ C^\downarrow|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle\,. \end{cases}$$

Från detta framgår att vi kan tolka $S^\pm$ som stegoperatorer, medan $C^\uparrow$ och $C^\downarrow$ kontrollerar att kvantbiten befinner sig i ett visst tillstånd. Minns att operatorn $|i\rangle\langle j|$ avbildar $|j\rangle$ på $|i\rangle$ och övriga basvektorer på 0, varför denna kan konstrueras som

$$|i\rangle\langle j| = \prod_v C_v^\uparrow \prod_u C_u^\downarrow \prod_s S_s^+ \prod_r S_r^-\,, \tag{3.8}$$

där r betecknar de kvantbitar som är $|\uparrow\rangle$ i $|j\rangle$ men $|\downarrow\rangle$ i $|i\rangle$, s de som är $|\downarrow\rangle$ i $|j\rangle$ men $|\uparrow\rangle$ i $|i\rangle$ medan u och v betecknar de som är $|\uparrow\rangle$ respektive $|\downarrow\rangle$ i både $|j\rangle$ och $|i\rangle$. Låt oss som ett exempel betrakta

$$|5\rangle\langle 6| = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle\,\langle\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow| = C_3^\uparrow C_2^\downarrow S_1^+ S_0^-\,,$$

*Minns att $|\uparrow\rangle = |0\rangle$ och $|\downarrow\rangle = |1\rangle$ så att exempelvis $|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = |010\rangle = |2\rangle$.

som verkar enligt

$$|5\rangle\langle 6|\,|6\rangle = C_3^{\uparrow}C_2^{\downarrow}S_1^{+}S_0^{-}\,|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = C_3^{\uparrow}C_2^{\downarrow}S_1^{+}\,|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle = C_3^{\uparrow}C_2^{\downarrow}\,|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = C_3^{\uparrow}\,|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |5\rangle,$$

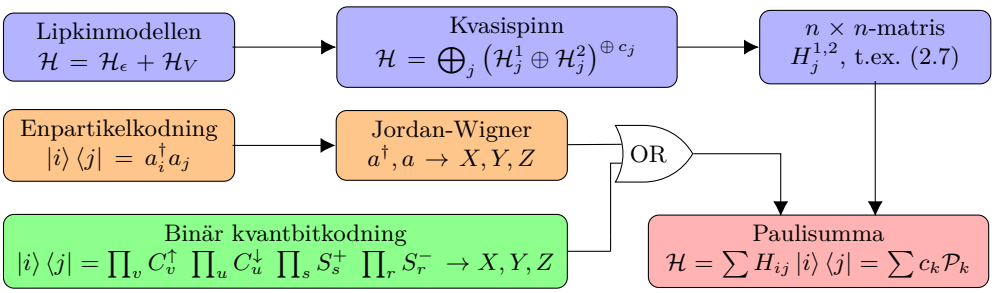
och avbildar resterande basvektorer på 0 då minst en av operatorerna $C_3^{\uparrow}$, $C_2^{\downarrow}$, S_1^{+} och S_0^{-} har egenvärde 0 för alla basvektorer förutom $|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$.

Den binära kvantbitkodningen av exempelmatrisen $H_{3/2}^{1}$ i (3.6) blir

$$\mathcal{H} = \frac{\epsilon}{2}\left(-3C_0^{\uparrow} + C_0^{\downarrow}\right) + \sqrt{3}\,V\left(S_0^{+} + S_0^{-}\right) = \frac{\epsilon}{2}\left(-I - 2Z_0\right) + \sqrt{3}VX_0\,. \tag{3.9}$$

Denna kodning använder underrummet till kvantbitarnas Hilbertrum som spänns upp av $\{|i\rangle\}_{i=0}^{n-1}$, där $n \times n$ är storleken på H i (3.5). Detta innebär att $n \leq 2^Q$ eller ekvivalent $Q \geq \log_2 n$. Antalet kvantbitar som krävs växer alltså logaritmiskt med matrisstorleken*.

Sammanfattningsvis har vi funnit två sätt att översätta en matris till en Paulisumma för användning i VQE. Hur Lipkinmodellens Hamiltonian först reduceras till mindre block genom kvasispinnformuleringen för att sedan kodas som en Paulisumma presenteras schematiskt i figur 3.3.



Figur 3.3: *Schematisk representation över stegen som leder från Lipkinmodellens Hamiltonian i* (2.2) *till en Paulisumma som kan användas i VQE-algoritmen.*

3.4 Ansatser

För att kunna variera tillståndet i VQE-algoritmen krävs, som nämnt i avsnitt 3.2, en ansats i form av ett kvantdatorprogram som definieras av variationsparametrarna θ. Denna svarar mot en operator $A(\theta)$ som avbildar kvantbitarnas initialtillstånd på variationstillståndet enligt $|\psi(\theta)\rangle = A(\theta)\,|\psi_0\rangle$. Minns att kodningarna av Hamiltonianen $\mathcal{H}$ som en Paulisumma utnyttjar olika antal kvantbitar och endast motsvarar den hermiteska matrisen H på ett underrum av kvantbitarnas Hilbertrum. Ansatsen måste därför anpassas efter kodningen för att använda rätt antal kvantbitar och så att $|\psi(\theta)\rangle$ är begränsad till det relevanta underrummet, eftersom nya egenvärden annars kan introduceras. Nedan presenteras två metoder för att konstruera ansatsprogram $A(\theta)$. Den första bygger på att konstruera en unitär operator genom exponentiering medan den andra är en generell metod för att konstruera godtyckliga kvantbitstillstånd.

*Notera att endast en kvantbit krävs i exempel (3.9), jämfört med (3.7) som kräver två.

3.4.1 Unitary Coupled-Clusteransats

Kvantbitarnas initialtillstånd $|\psi_0\rangle$ tillhör inte nödvändigtvis kodningens underrum. Vi inleder därför ansatsen med att, genom operatorn R, överföra $|\psi_0\rangle$ på ett referenstillstånd som vi väljer till $|0\rangle$ i basen som tillhör kodningen. Detta eftersom $|0\rangle$ är egentillståndet i Lipkinmodellen med lägst energi i underrummet där $\mathcal{H}_J^\nu$ verkar, oberoende av J och ν då $V = 0$.

En unitär operator som avbildar $|0\rangle$ på ett godtyckligt tillstånd $|\psi(\theta)\rangle$ ges av

$$U(\theta) \equiv \mathrm{e}^{T(\theta)-T(\theta)^\dagger}, \quad T(\theta) = \sum_u \theta_u \, |u\rangle\langle 0| \, , \tag{3.10}$$

där summan går över resterande basvektorer, det vill säga $u \in \{1, ..., n-1\}$. Konstruktionen $T - T^\dagger$ försäkrar att operatorn är unitär*, vilket krävs för att den ska svara mot ett kvantdatorprogram. Ansatsen ges då av $A(\theta) = U(\theta)R$ och är en så kallad *Unitary Coupled-Clusteransats* (UCC-ansats) [15].

Det är dock inte trivialt att konstruera ett kvantdatorprogram som svarar mot e^B för en godtycklig anti-hermitesk operator B. Detta är däremot möjligt för operatorer på formen $e^{ic\mathcal{P}}$ där $\mathcal{P}$ är en Pauliterm och c en reell koefficient‡ [4, s. 210]. Om ansatsen kan skrivas på formen

$$U = \prod_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}c_k\mathcal{P}_k}, \tag{3.11}$$

kan således ett kvantdatorprogram som motsvarar U konstrueras. För att nå denna form används en generaliserad första ordningens Trotterexpansion

$$\exp\left(\sum_k A_k\right) = \lim_{n\to\infty}\left(\prod_k \mathrm{e}^{\frac{A_k}{n}}\right)^n \, ,$$

där A_k är anti-hermiteska operatorer. Denna trunkeras genom att sätta $n = 1$, vilket är en relativt grov approximation som snarare bör ses som en omdefinition§. Applicerat på (3.10) ger detta

$$U(\theta) \equiv \prod_u \mathrm{e}^{\theta_u|u\rangle\langle 0|-(\theta_u)^\dagger|0\rangle\langle u|} \, .$$

Då Hamiltonianmatriserna vi behandlar är hermiteska och reella, existerar en bas av egentillstånd med reella amplituder. För att endast erhålla superpositioner med reella amplituder kan θ_u begränsas till $\mathbb{R}$, varför U kan skrivas som

$$U(\theta) = \prod_u \mathrm{e}^{\theta_u\left(|u\rangle\langle 0|-|0\rangle\langle u|\right)} \, . \tag{3.12}$$

Med samma metoder som i avsnitt 3.3 kan $|u\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle u|$ i exponenten uttryckas som en Paulisumma, varpå ytterligare en Trotterexpansion tar U till formen i (3.11). Hur detta ser ut för de två kodningarna presenteras nedan.

*Operatorer på formen e^B där $B^\dagger = -B$ är unitära.

‡En funktion som konstruerar sådana kvantdatorprogram finns implementerad i Rigetti Computings Pythonmodul pyQuil, kallad `exponentiate`.

§Detta motiveras mer utförligt i [8].

Enpartikelkodning
Med enpartikelkodningen svarar referenstillståndet $|0\rangle$ mot $|\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle$ varför $R = X_0$ kan användas för att överföra kvantbitarnas initialtillstånd $|\psi_0\rangle$ till referenstillståndet. Genom enpartikelkodningen som använder Jordan-Wignertransformen, presenterad i avsnitt 3.3.1, kan $|u\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle u|$ skrivas om som

$$|u\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle u| = a_u^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_u = \left[\prod_{j=1}^{u-1} Z_j\right](-\mathrm{i}X_0Y_u + \mathrm{i}Y_0X_u)\,.$$

Med denna omskrivning, (3.12) och ännu en Trotterexpansion kan U slutligen omdefinieras enligt

$$U(\theta) \equiv \prod_{u=1}^{n-1} \exp\left(-\mathrm{i}\,\theta_u \left[\prod_{j=1}^{u-1} Z_j\right] X_0Y_u\right) \exp\left(\mathrm{i}\,\theta_u \left[\prod_{j=1}^{u-1} Z_j\right] Y_0X_u\right).$$

Binär kvantbitkodning
Med den binära kvantbitkodningen sammanfaller referenstillståndet $|0\rangle$ med kvantbitarnas initialtillstånd $|\psi_0\rangle$. Genom att använda den binära kvantbitkodningen skrivs (3.12) om till

$$U(\theta) = \prod_u \mathrm{e}^{\theta_u B_u}\,, \quad B_u = |0\rangle\langle u| - |u\rangle\langle 0| = \sum_k \mathrm{i}\,c_k^u \mathcal{P}_k^u\,,$$

där $\mathcal{P}_k^u$ är Paulitermer och c_k^u reella koefficienter som fås av (3.8). Likt ovan används en Trotterexpansion och U omdefinieras enligt

$$U(\theta) \equiv \prod_{uk} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_u c_k^u \mathcal{P}_k^u}\,.$$

3.4.2 Quantum State Generator-ansats

Den andra metoden för att konstruera ansatskvantdatorprogram använder tillvägagångssättet som presenteras i [16]. Metoden kallas fortsättningsvis för *Quantum State Generator* (QSG)*, vilken konstruerar kvantdatorprogram som tar initialtillståndet $|\psi_0\rangle$ till ett godtyckligt tillstånd $|\psi(\alpha)\rangle$. Givet en normerad vektor $\alpha = (\alpha_0, ..., \alpha_{n-1})$ kan QSG-metoden användas för att konstruera ett kvantdatorprogram A som verkar enligt

$$A(\alpha)\,|\psi_0\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i\,|i\rangle\,,$$

där $|i\rangle$ är bastillstånden med samma notation som i den binära kvantbitkodningen, se avsnitt 3.3.2. Eftersom α är en normerad vektor med n komponenter är antalet frihetsgrader $n-1$. Optimeringsalgoritmerna som används, vilka presenteras i avsnitt 3.5.1, är dock inte designade för att optimera på hypersfärer. Istället kan optimeringen utföras i $\mathbb{R}^{n-1}$ där parametervektorn θ avbildas till en normerad vektor $\alpha \in \mathbb{R}^n$ med en inverterad stereografisk projektion. Eftersom global fas saknar fysikalisk mening motsvarar antipodala punkter på sfären samma tillstånd. Med den stereografiska projektionen innebär detta att alla tillstånd återfinns en gång innanför och en gång utanför enhetssfären i $\mathbb{R}^{n-1}$.

Denna metod kan direkt användas med den binära kvantbitkodningen eftersom de utgår från samma bas. Med enpartikelkodningen används dock en annan bas där $|i\rangle$ =

*QSG finns implementerad i Rigetti Computings Pythonmodul Grove, kallad `create_arbitrary_state`.

$|\uparrow, ..., \uparrow, \downarrow_i, \uparrow, ..., \uparrow\rangle$, istället för att tolka kvantbittillståndet som ett binärt tal. Detta innebär att $|i\rangle$ i enpartikelkodningen svarar mot $|2^i\rangle$ i den binära kodningen. Efter den stereografiska projektionen som tar $\theta \in \mathbb{R}^{n-1}$ till en normerad vektor $\beta \in \mathbb{R}^n$ avbildas därför denna till $\alpha \in \mathbb{R}^{2^n}$ genom $\alpha_{2^k} = \beta_k$ och $\alpha_i = 0$ för i som inte är exakta tvåpotenser.

3.5 Implementation

För att implementera de tidigare nämnda metoderna emuleras en kvantdator med *Forest SDK* [17]. Förutom pythonmodulerna pyQuil och Grove som ingår i *Forest SDK*, används även OpenFermion [18]. En översiktlig beskrivning av kodstrukturen samt en länk till vårt Github-repository återfinns i appendix D.

3.5.1 Optimeringsalgoritmer

Att använda VQE-algoritmen för att bestämma det minsta egenvärdet till en $n \times n$-matris innebär att en stokastisk funktion ska minimeras i ett $(n-1)$-dimensionellt rum. Detta ställer stora krav på optimeringsalgoritmerna, då exempelvis derivataberäkningar blir instabila. Vi begränsar oss därför till två optimeringsalgoritmer som inte kräver derivataberäkning.

Nelder-Meadalgoritmen
Nelder-Meadalgoritmen är en simplexbaserad, direkt sökalgoritm som kan användas för att optimera icke-linjära funktioner [19]. Metoden, som finns implementerad i Pythonmodulen SciPy, tillämpas i detta projekt för att den är väl beprövad, har använts i flera tidigare kvantdatorstudier [15] och, som nämnt ovan, inte använder derivataberäkningar. För att förbättra skattningen av Hamiltonianens väntevärde vid slutparametrarna, medelvärdesbildas mätdata från närliggande punkter. Om sökalgoritmen tidigt närmar sig sina slutparametrar $\hat{\theta}_{\text{min}}$ utnyttjas resterande mätningar, som då sker nära denna, effektivt sett som fler samplingar. Vi definierar därför en tolerans θ_{tol} och medelvärdesbildar de funktionsevalueringar som motsvarar de parametrar som uppfyller

$$\left\| \theta - \hat{\theta}_{\text{min}} \right\| < \theta_{\text{tol}}. \tag{3.13}$$

Algoritmens stoppkriterier uppfylls då både parameter- och funktionsdifferensen mellan två på varandra följande optimeringssteg är mindre än förbestämda toleransvärden. Funktionstoleransen f_{tol} väljs enligt

$$f_{\text{tol}} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_k |c_k| \,, \tag{3.14}$$

där c_k är koefficienterna i Paulisumman och M antalet samplingar. Detta är, som vi snart kommer se i (3.15), en övre gräns till kvadratroten av väntevärdesskattningens varians.

Nelder-Meadalgoritmen kräver initialparametrar till ansatsen. För QSG-ansatserna väljs initialparametrarna så att dessa, genom den stereografiska projektionen, svarar mot amplituder med alternerande tecken men samma storlek. Vi motiverar valet med en förmodan om att grundtillståndet då $V/\epsilon \to \infty$ befinner sig i samma hyperoktant*. Dock är det för UCC-ansatserna inte uppenbart hur parametrarna svarar mot amplituderna. Initialparametrarnas komponenter väljs därför till $\theta_k = (-1)^{k+1}$ då detta förmodas resultera i alternerande tecken för amplituderna, likt initialparametrarna för QSG-ansatserna.

*Hyperoktanter är generaliseringen av kvadranter till godtycklig dimension.

Bayesiansk optimering
Bayesiansk optimering lämpar sig för att optimera kontinuerliga, stokastiska funktioner på ett slutet intervall, där varje funktionsevaluering är kostsam [20]. Denna beskrivning passar mycket väl in på kvantdatorberäkningar och har därför valts som en metod i denna studie. Här betraktas en Bayesiansk optimeringsalgoritm som finner minimum med hjälp av Gaussiska processer, vilken vi förkortar BOGP. Vi använder den variant som är implementerad i Pythonmodulen Scikit-Optimize [21].

För den Bayesianska optimeringsalgoritmen behöver vi definiera ett intervall inom vilket optimeringen ska ske. För de ansatser som använder QSG sätts detta till $[-1, 1]$ för varje komponent av parametern, då den stereografiska projektionen garanterar att det finns ett minimum innanför enhetssfären, se avsnitt 3.4.2. Ett sådant väldefinierat intervall känner vi inte till för UCC-ansatserna, varför vi väljer det större intervallet $[-3, 3]$.

3.5.2 Variansskattning

Som nämnt i avsnitt 3.2 skattar QEE-algoritmen väntevärdet av Hamiltonianen uttryckt som en Paulisumma, genom att skatta väntevärdet av varje Pauliterm $\mathcal{P}_k$ med ett medelvärde av ett antal samplingar M_k. Då Paulioperatorna X, Y, och Z har egenvärden ± 1 ges variansen av ett sådant medelvärde av

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{P}_k \rangle}\right) = \frac{1 - \langle \mathcal{P}_k \rangle^2}{M_k} \,.$$

Genom (3.3) fås variansen av Hamiltonianens väntevärdesskattning som

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{H} \rangle}\right) = \sum_k |c_k|^2 \, \frac{1 - \langle \mathcal{P}_k \rangle^2}{M_k} \leq \sum_k \frac{|c_k|^2}{M_k} \,.$$

Denna varians kan skattas genom att använda skattningarna av $\langle \mathcal{P}_k \rangle$. För att minimera den övre begränsningen på $\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{H} \rangle}\right)$ väljs antalet mätningar per Pauliterm enligt

$$M_k = M \frac{|c_k|}{\sum_j |c_j|} \,,$$

för ett totalt antal samplingar M, se härledning i appendix C.2. Med detta val blir variansen av väntevärdesskattningen och den övre begränsningen

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{H} \rangle}\right) = \frac{1}{M} \sum_j |c_j| \cdot \sum_k |c_k| \, \left(1 - \langle \mathcal{P}_k \rangle^2\right) \leq \frac{1}{M} \left(\sum_k |c_k| \right)^2 . \tag{3.15}$$

Antalet samplingar per Pauliterm, M_k, måste avrundas till heltal, vilket görs så att M bevaras.

Som nämnt ovan medelvärdesbildas funktionsevalueringar med parametrar nära den slutliga för Nelder-Meadalgoritmen. Variansen av detta nya medelvärde ges av

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{H} \rangle}\right) = \frac{1}{L^2} \sum_{\ell=1}^{L} \mathrm{Var}\left(\widehat{\langle \mathcal{H} \rangle}_\ell\right) \,,$$

där L är antalet punkter som medelvärdesbildas [22, s. 229].

4. Resultat

I detta kapitel analyserar vi olika metoder för att beräkna grundtillståndsenergin hos Lipkinsystem med VQE-algoritmen, genom att jämföra ansatserna och optimeringsalgoritmerna beskrivna i avsnitt 3.4 och avsnitt 3.5.1. Vi behandlar fyra ansatser med tillhörande kodning:

- enpartikelkodad UCC-ansats (E-UCC)
- enpartikelkodad QSG-ansats (E-QSG)
- binär kvantbitkodad UCC-ansats (B-UCC)
- binär kvantbitkodad QSG-ansats (B-QSG).

Utöver detta betraktas även två olika optimeringsalgoritmer:

- Nelder-Meadalgoritmen (NM)
- Bayesiansk optimering med Gaussiska processer (BOGP).

Innan vi jämför ansatserna och optimeringsalgoritmerna, presenteras i avsnitt 4.1 noggrannheten av egenvärdesberäkningar för tre matriser av olika storlek från Lipkinmodellen med VQE-algoritmen. Detta resultat används för att illustrera ett problem med Nelder-Meadalgoritmen då den appliceras på stokastiska funktioner.

Ansatserna och optimeringsalgoritmerna kan kombineras till åtta olika metoder. Därför presenterar vi, i avsnitt 4.2.1, underlag för att reducera antalet ansatser i ett tidigt stadium av analysen, då en fullständig analys av alla kombinationer ligger utanför ramen för denna studie.

I tidigare studier av verkliga kvantdatorer har experiment utförts med upp mot 3 miljoner mätningar [23], varför vi väljer att sätta detta som en övre gräns för det totala antalet mätningar. Det totala antalet mätningar relaterar till antalet samplingar och antalet funktionsevalueringar enligt

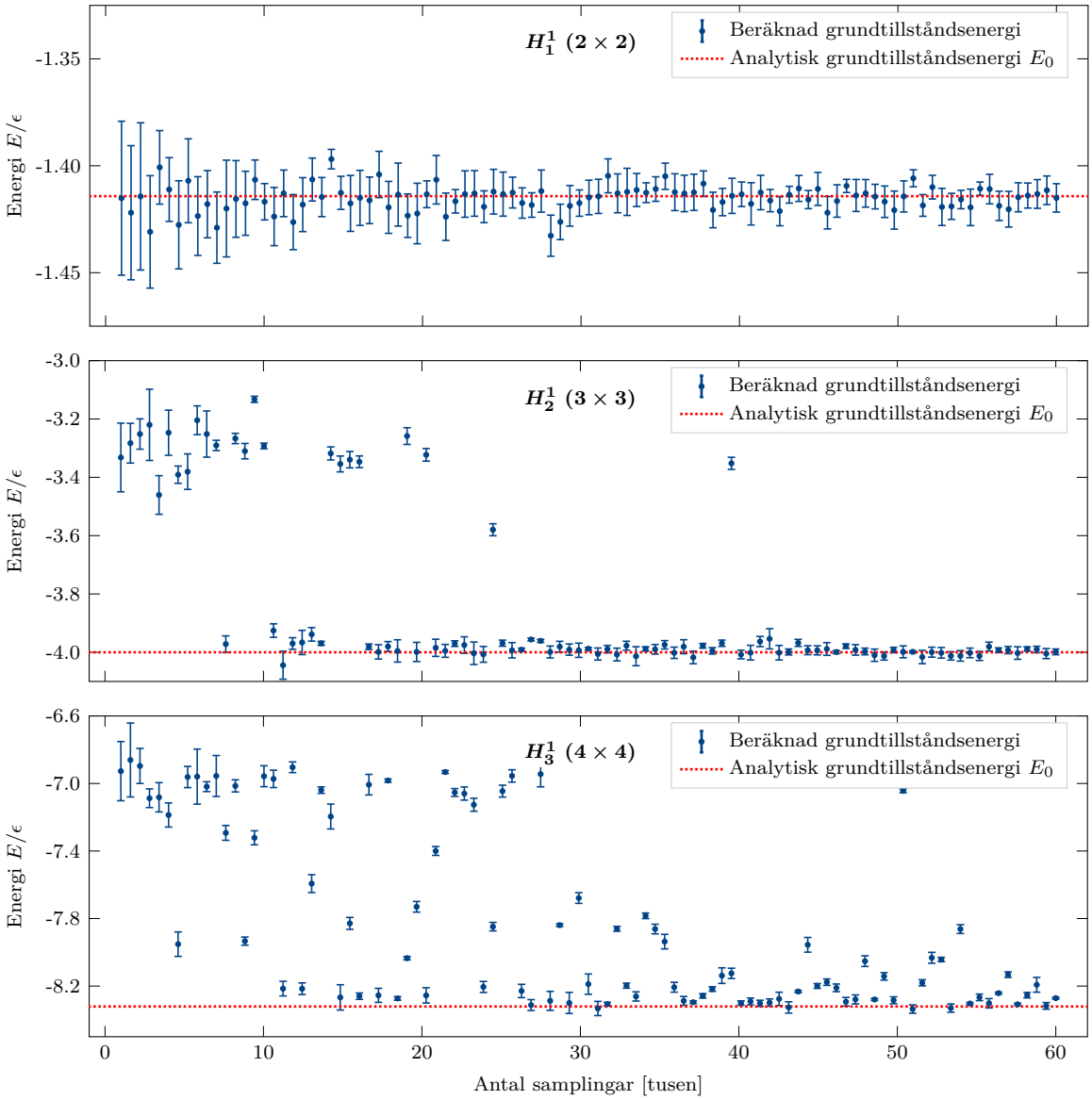
$$\text{Totalt antal mätningar} = (\text{Antal funktionsevalueringar}) \cdot (\text{Antal samplingar}) \,. \tag{4.1}$$

Givet ett totalt antal mätningar, undersöker vi vilket antal samplingar som ger det minsta egenvärdesfelet med de två optimeringsalgoritmerna. Slutligen demonstreras den framtagna strategin genom att beräkna de minsta egenvärdena till varje matris som förekommer i ett Lipkinsystem med $N = 7$ partiklar.

Alla matriser från Lipkinmodellen vars minsta egenvärde beräknas med VQE-algoritmen i denna studie, återfinns i appendix B.3. Om inget annat anges, används interaktionsparametern $V/\epsilon = 1$ i (2.2).

4.1 Omstart av Nelder-Meadalgoritmen

Till att börja med betraktar vi några tidiga egenvärdesberäkningar med VQE-algoritmen på den emulerade kvantdatorn. Vi valde godtyckligt ansatsen B-QSG och lät Nelder-Meadalgoritmen optimera på tre matriser med storlek 2, 3 och 4 i Lipkinmodellen: H_1^1, H_2^1 och H_3^1. Figur 4.1 visar det beräknade egenvärdet med olika antal samplingar, jämfört med det analytiska värdet. Algoritmen används med stoppkriterier, med f_{tol} enligt (3.14) och parametertolerans 0.01, samt med maximalt 200 funktionsevalueringar. I dessa mätningar sätter vi toleransen för medelvärdesbildningar i (3.13) till $\theta_{\text{tol}} = 0.01$.

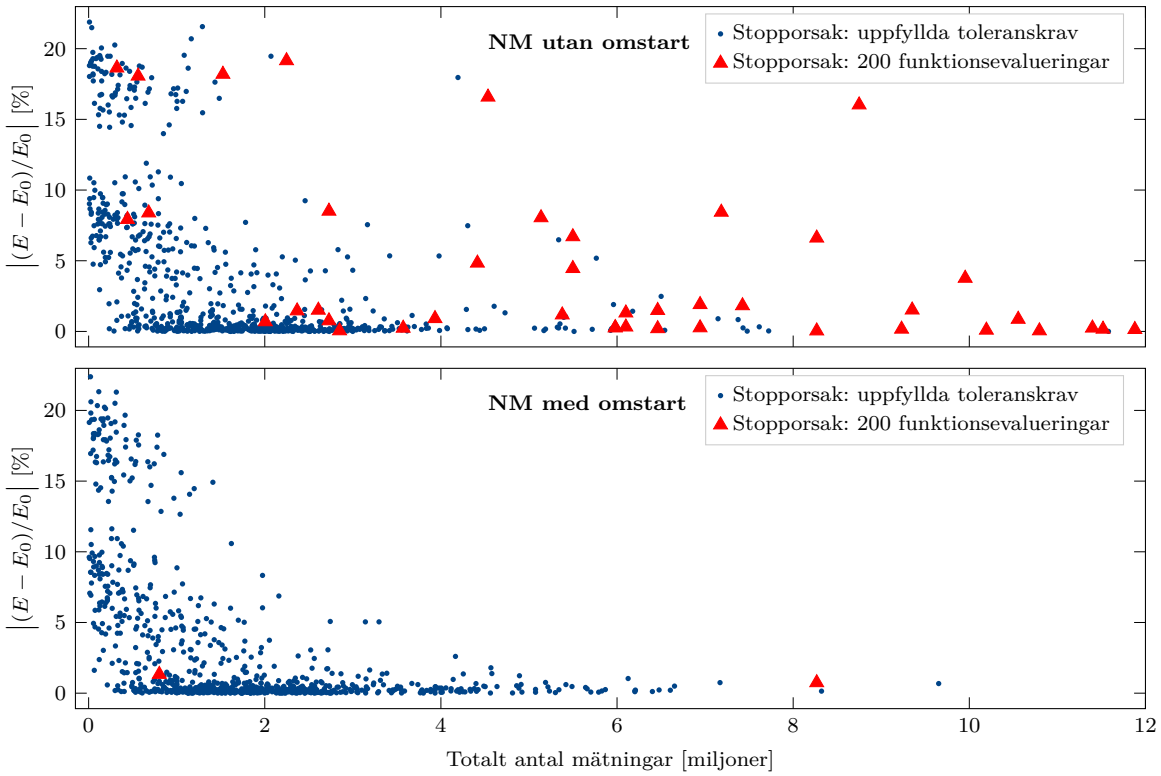


Figur 4.1: *Det minsta energiegenvärdetberäknat med VQE- och Nelder-Meadalgoritmen för olika antal samplingar mellan* 1000 *och* 60 000. *Energin är beräknad för tre matriser i Lipkinmodellen,* H_1^1, H_2^1 *och* H_3^1, *med* $V/\epsilon = 1$, *vilka är av storlek 2, 3 respektive 4. Notera att den utmarkerade osäkerheten, vilken motsvarar två standardavvikelser, är osäkerheten i väntevärdesskattningen i slutparametrarna och inte i det beräknade egenvärdet. Ökad matrisstorlek medför i regel större standardavvikelse (observera de olika skalorna på y-axlarna) och ökad tendens för algoritmen att hitta fel parametervärde.*

Notera att avvikande värden på det beräknade minsta energiegenvärdet uppstår mer frekvent för större matriser. Dessa fel antas komma från användandet av Nelder-Meadalgoritmen på stokastiska funktioner, där algoritmen fastnar och evaluerar funktionen i samma parametrar upprepade gånger. Även variansen ökar i regel för större matriser, vilket beror på att summan av beloppen av koefficienterna i Paulisumman i regel ökar, se (3.15).

En enkel åtgärd till problemet att Nelder-Meadalgoritmen fastnar är att starta om den ifall funktionen evalueras i samma parametrar flera gånger i följd, vilket vi väljer att göra efter tre gånger*. Två uppsättningar parametrar anses i detta sammanhang ha samma värde då normen av skillnaden är mindre än 0.001.

För att illustrera effekten av omstart låter vi Nelder-Meadalgoritmen optimera på de fyra 3×3-matriserna $H_2^1, H_{5/2}^1, H_{5/2}^2$ och H_3^2 från Lipkinmodellen med samma toleranskrav som i figur 4.1. Istället för att begränsa det totala antalet mätningar till 3 miljoner, begränsar vi antalet funktionsevalueringar till maximalt 200. För varje matris och antal samplingar beräknas egenvärdet fem gånger, där antalet samplingar varieras i 100 punkter mellan 400 och 60 000. I figur 4.2 presenteras skillnaden i stopporsak för Nelder-Meadalgoritmen med och utan omstart. Här observerar vi en klar förbättring då algoritmen startas om, där betydligt färre beräkningar stannar på grund av de når det maximala antalet funktionsevalueringar.



Figur 4.2: *Det procentuella felet i det minsta energiegenvärdet hos Lipkinmodellens* 3×3*-matriser med* $V/\epsilon = 1$ *beräknat med VQE- och Nelder-Meadalgoritmen. Antalet samplingar har varierats mellan* 400 *och* 60 000*, där det totala antalet mätningar har beräknats enligt* (4.1)*. Notera att antalet optimeringar som har avbrutits då de nått 200 funktionsevalueringar är betydligt fler utan omstart.*

*En mer utförlig motivering till detta återfinns i appendix E.1.

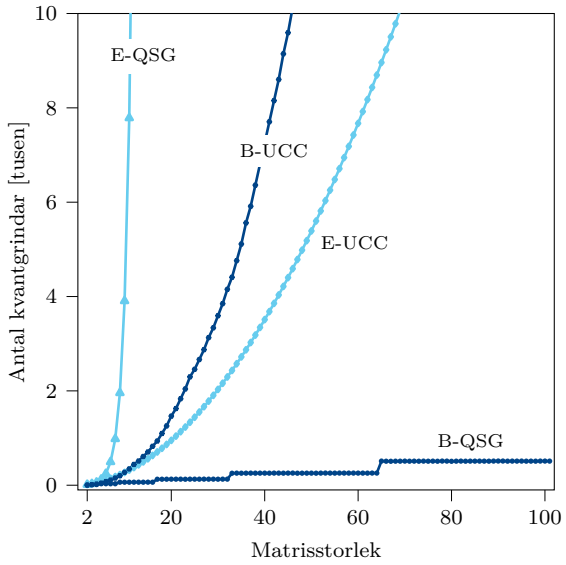
4.2 Jämförelse av metod

Två viktiga poänger illustreras i figur 4.2: den första är att det totala antalet mätningar överskrider vår gräns på 3 miljoner mätningar och den andra att uppfyllda toleranskrav inte nödvändigtvis resulterar i korrekt egenvärde. Därför använder vi oss inte fortsättningsvis av stoppkriterierna i Nelder-Meadalgoritmen, utan fixerar istället både antalet samplingar och det totala antalet mätningar. Detta resulterar i att algoritmen fortsätter tills det totala antalet mätningar har genomförts, varpå resultat inom toleransen $\theta_{\text{tol}} = 0.001$ medelvärdesbildas enligt (3.13).

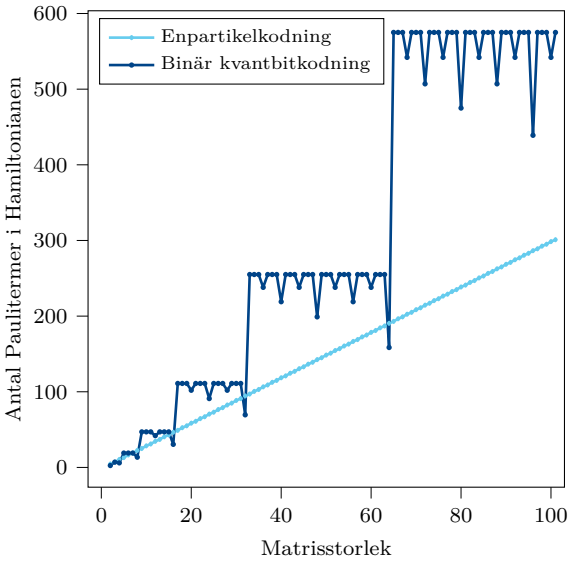
4.2.1 Matriskodning och ansatser

Ansatserna analyseras utifrån antalet kvantbitar och kvantgrindar som krävs för att implementera dem, samt antalet Paulitermer i tillhörande Hamiltonian. Det minsta antalet kvantbitar som krävs, för en $n \times n$-matris, är n för enpartikelkodade ansatser men endast $\lceil \log_2 n \rceil$ för de binärt baserade ansatserna.

Figur 4.3 presenterar medelvärden av antalet kvantgrindar i ansatserna mot matrisstorlek, från vilken det observeras att antalet grindar varierar kraftigt mellan ansatserna. Detta har stor betydelse för realiserbarheten på verkliga kvantdatorer, se avsnitt 3.1. I figur 4.4 presenteras det genomsnittliga antalet Paulitermer i Hamiltonianen mot matrisens storlek för de två kodningarna, där det kan noteras att den binära kvantbitkodningen för vissa matrisstorlekar använder upp till drygt två gånger så många. Till synes ökar detta antal kraftigt då matrisstorleken passerar 2^m för något heltal m, vilket troligen är relaterat till att antalet kvantbitar då ökar. Antalet Paulitermer växer dock linjärt för båda kodningarna. Utifrån resultaten i figur 4.3 och figur 4.4 begränsar vi oss fortsättningsvis till B-QSG och E-UCC. Den uppvisade överlägsenheten för B-QSG i avseende på antalet kvantgrindar och kvantbitar tas i åtanke i fortsatt analys.



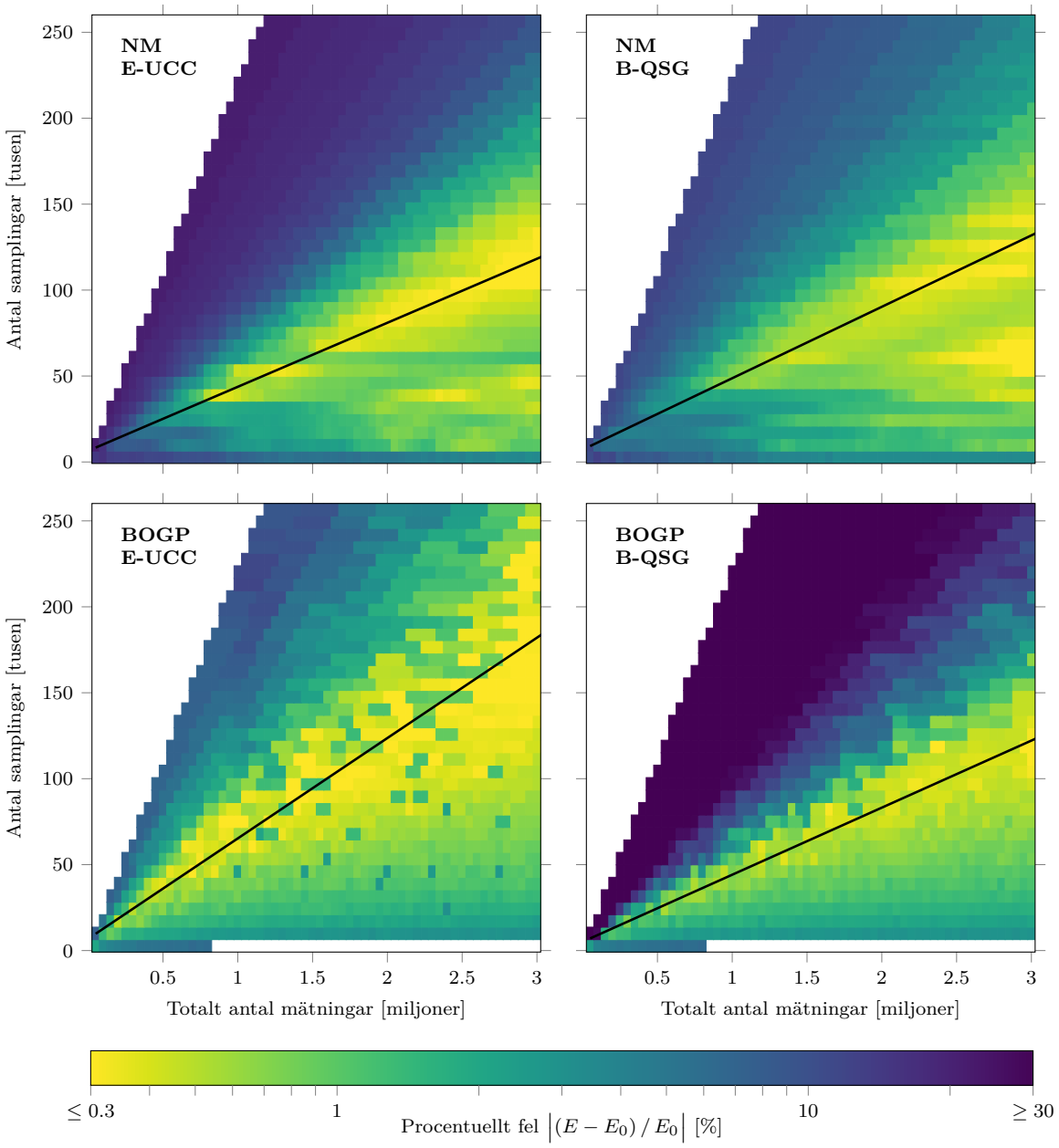
Figur 4.3: *Genomsnittligt antal kvantgrindar som ansatserna använder för att generera ett variationstillstånd $|\psi(\theta)\rangle$ som funktion av matrisstorlek. Antalet varierar något med θ varför 100 normalfördelade parametrar har medelvärdesbildats över.*



Figur 4.4: *Genomsnittligt antal Paulitermer i Hamiltonianer för enpartikel- och binär kvantbitkodning som funktion av matrisstorlek. Det exakta antalet skiljer sig mellan olika matriser, varför ett medelvärde över 100 matriser, från Lipkinmodellen, med samma storlek har utförts.*

4.2.2 Optimeringsalgoritmer och ansatser

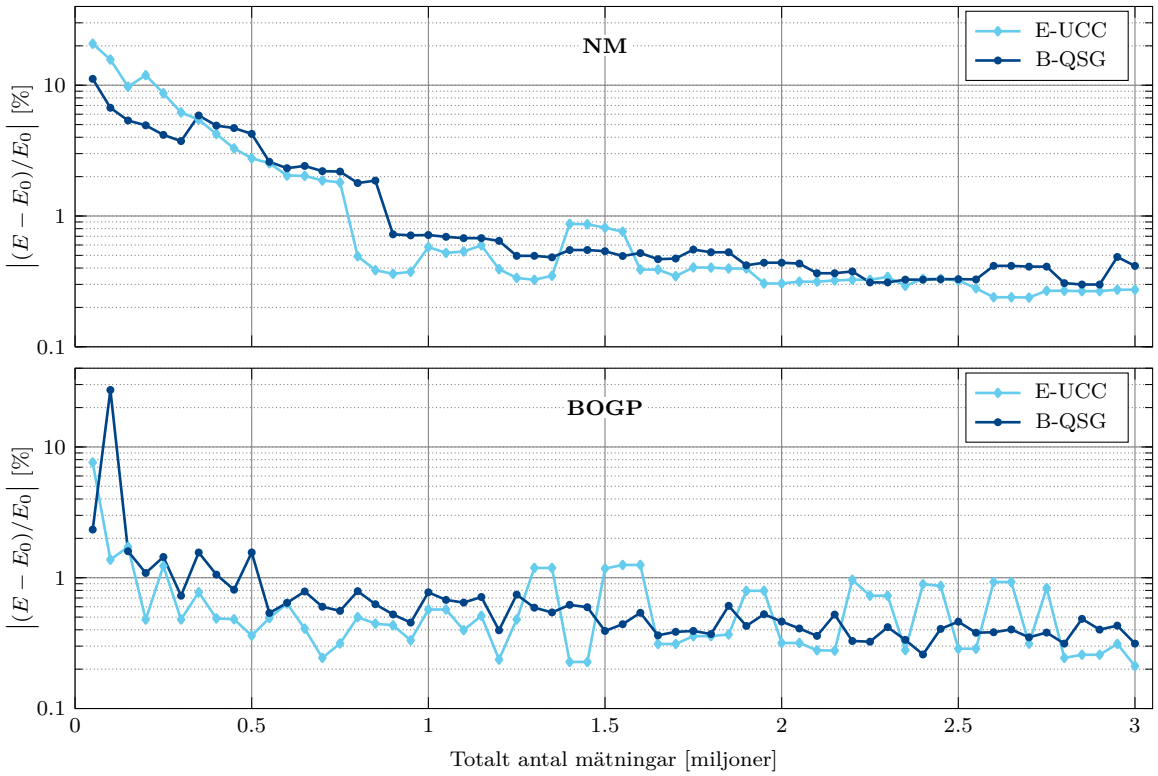
Vi har hittills endast beräknat energiegenvärden för Lipkinsystem med $V/\epsilon = 1$ i (2.2). Då förhållandet mellan V och ϵ varieras kommer även matrisernas utseende att ändras. Vi har observerat att hur väl olika kombinationer av ansatser och optimeringsalgoritmer lyckas bestämma energin beror på utseendet av matrisen. I ett försök att undvika att detta speglas i resultaten väljer vi att beräkna det minsta egenvärdet för alla fyra matriser av samma storlek från den symmetrireducerade Lipkinmodellen som erhålls med $V/\epsilon = 1$. De två algoritmerna undersöks utifrån hur det beräknade minsta egenvärdet E avviker från det analytiskt bestämda E_0. Jämförelserna av algoritmerna begränsas till matriser av storlek 3×3, samma som i avsnitt 4.1, då beräkningstiden snabbt ökar med matrisstorleken.



Figur 4.5: *Procentuellt fel av det minsta energiegenvärdet som funktion av antalet samplingar och det totala antalet mätningar på den emulerade kvantdator med VQE-algoritmen. Här betraktas alla fyra 3×3-matriser i Lipkinmodellen för $V/\epsilon = 1$. Notera att färgskalan är logaritmisk samt att alla värden utanför skalan antar samma färg som ändpunkterna. De svarta linjerna motsvarar en linjär kurvanpassning mot det minsta felet för varje antal mätningar.*

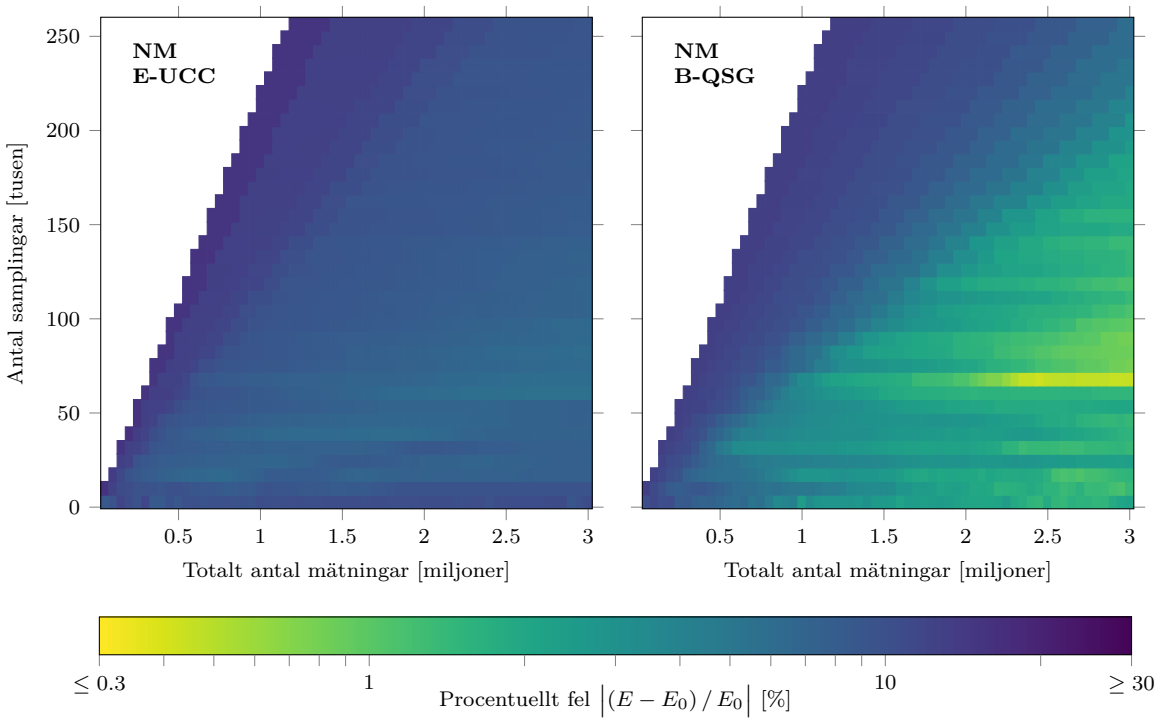
I figur 4.5 illustreras hur det procentuella egenvärdesfelet utvecklas som funktion av antalet samplingar och totala antalet mätningar på den emulerade kvantdatorn för båda optimeringsalgoritmerna och de två ansatserna, B-QSG och E-UCC. De vita delarna i de övre vänstra hörnen motsvarar mätningar med färre än fem funktionsevalueringar och har därför inte undersökts. För den Bayesianska optimeringsalgoritmen har även en övre gräns satts vid 300 funktionsevalueringar, vilket motsvarar de vita områdena nederst i figurerna, då beräkningstiden ökar kubiskt med antalet funktionsevalueringar [24, s. 6]. De räta linjerna i figurerna är anpassade efter det minsta felet; kurvanpassningen återfinns i detalj i appendix E.2.

I figur 4.5 noterar vi att BOGP, jämfört med Nelder-Meadalgoritmen, uppnår bättre precision för mindre totala antal mätningar. Givet förhållandet mellan antalet samplingar och funktionsevalueringar längs linjerna i figuren kan egenvärdet beräknas inom 1 % vid redan 500 000 mätningar för BOGP, medan det krävs närmare 1 000 000 för Nelder-Meadalgoritmen. Detta faktum illustreras tydligare i figur 4.6.



Figur 4.6: *Procentuellt fel av det minsta energiegenvärdet längs den kurvanpassade linjen i figur 4.5. Observera den logaritmiska skalan på y-axeln. Notera att BOGP, speciellt med E-UCC, ger ett mindre fel med färre mätningar. Uppmärksamma att Nelder-Meadalgoritmen uppvisar ett mer stabilt beteende medan felet fluktuerar mer för BOGP, speciellt vid användning av E-UCC.*

I figur 4.6 presenteras egenvärdesfelen längs de svarta linjerna i figur 4.5. Båda figurerna illustrerar att E-UCC tillsammans med BOGP uppvisar ett mer instabilt beteende. Detta beteende observeras som mörkare fläckar längs den svarta linjen i figur 4.5 samt fluktuationer i figur 4.6. I detta avseende är således B-QSG en bättre lämpad ansats för att beräkna egenvärdet med BOGP. Dock kan ingen tydlig slutsats dras angående E-UCC och B-QSG för Nelder-Meadalgoritmen, varför vi härnäst jämför hur dessa presterar för Lipkinmodellens fyra symmetrireducerade 4×4-matriser $H_3^1, H_{7/2}^1, H_{7/2}^2$ och H_4^2. Detta presenteras i figur 4.7, där vi noterar att B-QSG beräknar egenvärdet med betydligt högre precision jämfört med E-UCC.



Figur 4.7: *Procentuellt fel av det minsta energiegenvärdet som funktion av antalet sampling per funktionsevaluering och totalt antal mätningar på den emulerade kvantdator med VQE-algoritmen. Här betraktas alla fyra matriser av storlek 4×4 i Lipkinmodellen för $V/\epsilon = 1$. Notera att färgskalan är logaritmisk samt att alla värden utanför skalan antar den samma färg som ändpunkterna.*

Liknande färgdiagram för Lipkinmodellens symmetrireducerade 2×2- och 5×5-matriser visar att antalet optimeringsparametrar kraftigt påverkar precisionen av energiegenvärdesberäkningarna. I fallet med 5×5-matriserna lyckas Nelder-Meadalgoritmen aldrig beräkna energiegenvärdet inom 9 % av det analytiska, medan 2×2-matrisernas minsta energiegenvärde kan beräknas med hög precision för nästan godtyckligt val av antal samplingar och totalt antal mätningar. Dessa färgdiagram återfinns i figur E.3.

4.2.3 Slutsats

Vi väljer att fortsätta studien med B-QSG, utifrån två huvudsakliga argument. Det första argumentet är precisionen och stabiliteten vid energiberäkningarna presenterade i avsnitt 4.2.2. De oregelbundna mörka områdena för E-UCC kombinerat med BOGP i figur 4.5, vilka presenteras mer tydligt i figur 4.6, visar på ett instabilt beteende. Med 4×4-matriser och Nelder-Meadalgoritmen visar figur 4.7 att E-UCC aldrig bestämmer det minsta energiegenvärdet mer exakt än till 5.5 % av det analytiska värdet, medan B-QSG når 0.5 % då drygt 2 miljoner mätningar används. Således bedömer vi att B-QSG är mer lämpad för att bestämma det minsta egenvärdet för 4×4-matriser med Nelder-Meadalgoritmen.

Det andra argumentet är antalet kvantbitar och kvantgrindar som krävs för att implementera ansatserna, en aspekt i vilken B-QSG presterar bättre. Vid realisation av en kvantdator kommer varje grind att bidra med brus, varför man strävar mot att minimera antalet. Då vi i denna studie endast betraktar ideala grindar utan brus har detta inte någon inverkan på resultaten men vid implementeringen av verkliga kvantgrindar torde därför E-UCC påverkas mer negativt än B-QSG.

Det som talar för E-UCC tillsammans med BOGP är det större gula området som framgår i figur 4.5, vilket tyder på en mindre känslighet för valet av antal samplingar. Utöver detta uppvisar E-UCC i figur 4.6 mindre fel för låga antal mätningar. Resultatet i figuren tyder dock på att likvärdig precision kan uppnås med båda ansatserna vid större totala antal mätningar, varför vi anser att argumenten om stabilitet väger tyngre.

Avvägningen mellan de två optimeringsalgoritmerna reduceras till det totala antalet mätningar på kvantdatorn som kan genomföras. För de mindre matriserna uppvisar båda algoritmerna likvärdig precision men som framgår från figur 4.5 presterar den Bayesianska optimeringsalgoritmen bättre med färre mätningar medan Nelder-Meadalgoritmen, i figur 4.6, uppvisar större stabilitet då precision väl uppnåtts. Då algoritmerna uppvisar olika fördelar väljer vi att fortsätta med båda.

4.3 Demonstration med ett Lipkinsystem med sju partiklar

Baserat på resultaten ovan demonstreras nu de framtagna strategierna för att bestämma grundtillståndsenergin för ett Lipkinsystem med sju partiklar, givet upp till totalt 3 miljoner mätningar per egenvärde. I figur 4.8 och 4.9 illustreras beräknade samt analytiska egenvärden som funktion av interaktionsparametern V/ϵ i (2.2). Det minsta energiegenvärdet för varje reducerad matris beräknas, där systemets grundtillståndsenergi svarar mot det minsta av dessa. Minns att egenvärden från mindre matriser även representerar energitillstånd för mindre partikelantal, varför grundtillståndsenergin för flera system kan utläsas ur figuren.

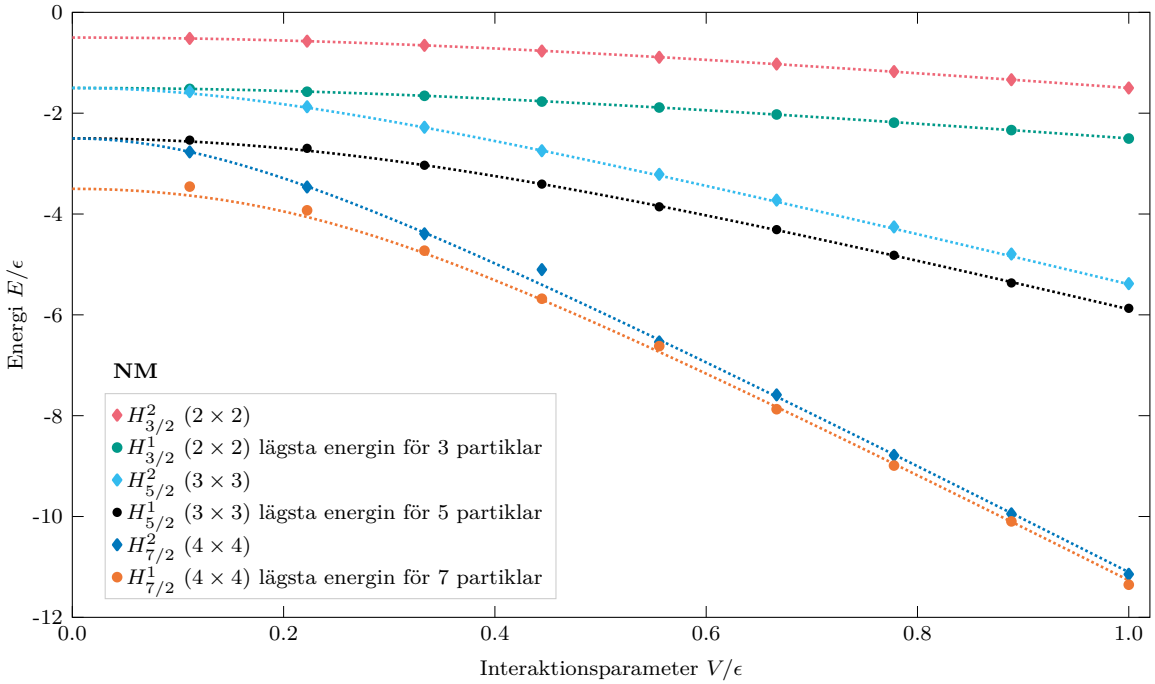
För att representera skillnaderna mellan optimeringsalgoritmerna används olika totala antal mätningar, där fördelningen av samplingar gentemot det totala antalet mätningar presenteras i tabell 4.1.

Tabell 4.1: *Val av samplingar och totalt antal mätningar för varje beräknat energiegenvärde vid lösning av ett Lipkinsystem med sju partiklar som presenteras i figur 4.8 och 4.9.*

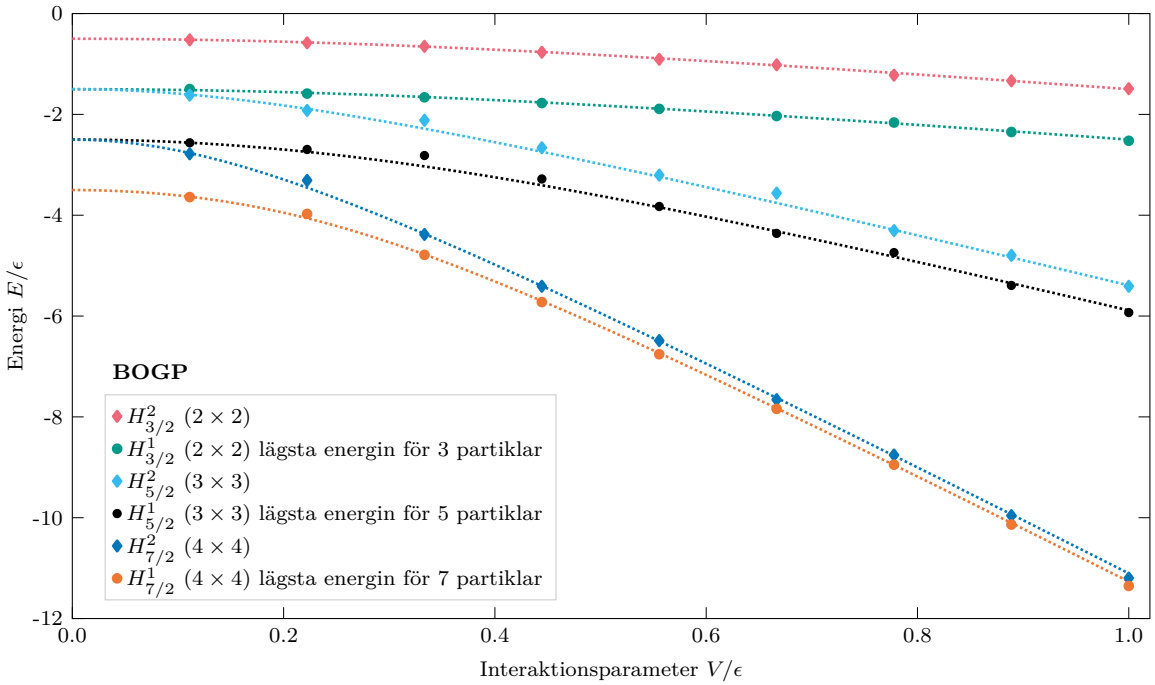
	Bayesiansk optimering			Nelder-Meadalgoritmen		
Matrisstorlek	2×2	3×3	4×4	2×2	3×3	4×4
Antal samplingar	9000	25 000	68 000	97 000	132 000	68 000
Totalt antal mätningar	100 000	500 000	3 000 000	3 000 000	3 000 000	3 000 000

Ett Lipkinsystem med sju partiklar har, bortsett från de triviala 1×1-matriserna, åtta unika negativa egenvärden, där samtliga har en positiv motsvarighet, se avsnitt 2.2. Vår metod tillåter oss att bestämma sex av dessa då vi kan reducera Lipkinmodellens ursprungliga Hamiltonian till sex unika matriser. Kom ihåg att egenvärdena är degenererade och dess multiplicitet kan beräknas enligt (2.8).

En noterbar aspekt i figur 4.9 är hur väl den Bayesianska optimeringsalgoritmen beräknar energiegenvärdet till 2×2- och 3×3-matriserna med såpass få mätningar. Valet av antalet samplingar och mätningar för 4×4-matriserna är detsamma för båda algoritmerna då vi saknar data för att kunna bestämma den mest fördelaktiga kvoten för den Bayesianska optimeringsalgoritmen. I fallet med 4×4-matriserna beräknar Nelder-Meadalgoritmen och BOGP energiegenvärdena med ett genomsnittligt fel på 1.2 % respektive 0.7 %.



Figur 4.8: *Beräknade energiegenvärden för ett Lipkinsystem med sju partiklar med Nelder-Mead-algoritmen. De uppmätta egenvärdena presenteras med markörer medan motsvarande analytiska visas som streckade linjer i samma färg. Egenvärdena presenteras för varierande värden på interaktionsparametern V/ϵ. Standardavvikelserna har utelämnats då de är för små för att synas.*



Figur 4.9: *Beräknade energiegenvärden för ett Lipkinsystem med sju partiklar med den Bayesianska optimeringsalgoritmen. De uppmätta egenvärdena presenteras med markörer medan motsvarande analytiska visas som streckade linjer i samma färg. Egenvärdena presenteras för varierande värden på interaktionsparametern V/ϵ. Standardavvikelserna har utelämnats då de är för små för att synas.*

5. Diskussion

Studiens syfte att analysera olika metoder för att beräkna grundtillståndsenergin hos Lipkinsystem har resulterat i att vi utifrån fyra olika ansatser bedömer att B-QSG presterar bäst med avseende på precision, stabilitet samt antalet kvantbitar och kvantgrindar. Jämförelsen av optimeringsalgoritmerna visar att dessa har olika för- och nackdelar, vilket ger anledning att tro att en kombination av dem kan vara gynnsam.

Optimeringsalgoritmer
Den Bayesianska optimeringsalgoritmen presterar bättre vid få antal mätningar, något som är förväntat då den till skillnad från Nelder-Meadalgoritmen är konstruerad för att hantera stokastiska funktioner. I framtida studier finns eventuellt potential i att undersöka hur den Bayesianska optimeringsalgoritmen presterar på en kvantdator med icke-ideala kvantgrindar. Vi noterar dock i figur 4.6 att då 3 miljoner mätningar används uppvisar båda algoritmerna liknande precision för Lipkinmodellens symmetrireducerade 3×3-matriser. Presenterat resultat tyder på att Nelder-Meadalgoritmen medför en något ökad stabilitet, med en kontinuerlig förbättring då antal mätningar ökar. Vidare noterar vi att Nelder-Meadalgoritmens precision skalar dåligt med matrisstorlek enligt färgdiagrammen i resultatet och kan ses ännu tydligare då figurerna i avsnitt 4.2.2 och figur E.3 jämförs.

Den Bayesianska optimeringsalgoritmen lagrar alla n tidigare datapunkter den evaluerat och utför matrisoperationer med samma tidskomplexitet som matrismultiplikation [24, s. 6], [25], varför den på sikt blir för tidskrävande att använda. Vidare är den inte nödvändigtvis konstruerad för att finna det exakta minimat [20], varför det kan vara av intresse att undersöka metoder där optimeringsalgoritmer av denna typ kombineras med klassiska. Att variera antalet samplingar under optimeringsprocessens gång är en strategi som använts tidigare [23], där funktionsvärdet slutligen evalueras för $\hat{\theta}_{\text{min}}$ med betydligt fler samplingar. I enlighet med våra resultat skulle detta vara väl lämpat för en kombination av optimeringsalgoritmerna. Då den Bayesianska optimeringsalgoritmen presterar bra med få samplingar kan den användas för att beräkna lämpliga initialparametrar till exempelvis Nelder-Meadalgoritmen.

Ansatser och initialparametrar
En viktig aspekt att understryka är att vi använder goda initialparametrar, speciellt för B-QSG. Utan bra gissningar ställs stora krav på optimeringsalgoritmen, vilka möjligtvis kan bli orimligt stora när dessa kombineras med funktionens stokastiska beteende. Notera att vi använt olika initialparametrar för de två ansatserna, vilket innebär en sammanblandning av orsaksfaktorer gällande beslutet att fortgå med B-QSG över E-UCC. Jämförelsen i avsnitt 4.2 bör således ses som en jämförelse mellan kombinationerna av ansats och initialparametrar. Med ökande antal variationsparametrar borde rimligtvis detta innebära att skillnaden mellan ansatsernas prestation ökar.

Möjliga effektiviseringar
Det finns strategier för att mer effektivt utnyttja antalet samplingar [23]. Givet flera Paulitermer som ej innehåller olika Paulioperatorer, bortsett från identiteten, som verkar på samma kvantbitar, kan dessa Paulitermer mätas samtidigt. En sådan gruppering av Paulitermer skulle potentiellt kunna öka precisionen betydligt. Dock kan brus i samband med detta leda till kovarians mellan mätningarna, så att variansskattningen av Hamiltonianens väntevärde försämras.

Mätningarna kan även parallelliseras [23] på andra sätt i de fall kvantdatorn har fler kvantbitar än vad som behöver användas för att modellera problemet. I dessa fall kan exempelvis hälften av mätningarna ske på hälften av kvantbitarna, medan den andra halvan simultant kör resten av mätningarna. Detta innebär ytterligare en fördel för ansatser kodade likt den binära.

I avsnitt 4.3 beräknades grundtillståndsenergin av ett Lipkinsystem med sju partiklar genom att utföra VQE-algoritmen på samtliga symmetrireducerade matriser tillhörande den totala Hamiltonianen. Om en överslagsräkning kan avgöra vilken av dessa matriser som innehåller det minsta egenvärdet effektiviseras problemet väsentligt, vilket illustrerar vikten av symmetrireduceringar. För de problem där endast grundtillståndsenergin är intressant är detta en avsevärd reduktion av problemets storlek då matrisen som störst blir av storlek $\lceil (N+1)/2 \rceil$. Våra observationer antyder att det största blocket i Lipkinmodellens reducerade matriser innehåller det minsta egenvärdet, men en mer rigorös analys krävs.

Prestationen av VQE-algoritmen beror starkt på dessa typer av teoretiska approximationer som kan utnyttjas för att förenkla beräkningen. En ytterligare reduktion av antalet variationsparametrar utöver systemets kvasispinnsymmetri kan åstadkommas genom ansatser som ej spänner upp hela Hilbertrummet. Om man utgående från en klassisk approximation utför en störningsräkning kring denna, kan potentiellt en variationsansats med avsevärt färre variationsparametrar erhållas. I dessa fall är möjligtvis UCC-baserade ansatser mer lämpade än QSG-ansatser då det inte är uppenbart hur de senare skulle konstrueras.

Icke-ideala kvantdatorer
En viktig aspekt för studiens relevans är VQE-algoritmens konkurrenskraft jämfört med klassiska approximationsmetoder. Moderna metoder för egenvärdesberäkningar på klassiska datorer har samma tidskomplexitet som matrismultiplikation [25]. Denna komplexitet har VQE-algoritmen inte visats kunna uppnå i dagsläget. En väsentlig faktor för applicerbarheten av denna studie är anknytningen till de faktiska begränsningar som tillkommer kvantdatorer. I avsnitt 3.1 presenterades en kortfattad diskussion av kvantmekaniskt brus och dekoherens, vilka måste tas hänsyn till vid simuleringar på verkliga kvantdatorer. Vid en mer ingående analys krävs även diskussion av koncept som kvantdatorns topologi, vilket påverkar antalet grindar som krävs för att realisera kvantdatorprogram. Denna studie har endast skrapat på ytan av vad som är möjligt att genomföra på en kvantdator och mycket arbete återstår innan *quantum supremacy* kan uppnås.

Referenser

[1] G. E. Moore, ”Cramming more components onto integrated circuits,” *IEEE Solid-State Circuits Society Newsletter*, vol. 11, nr. 3, ss. 33–35, sep. 2006, doi: 10.1109/N-SSC.2006.4785860. [Online]. Tillgänglig: http://ieeexplore.ieee.org, hämtad: 2019-05-12.

[2] R. P. Feynman, ”Simulating physics with computers,” *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 21, nr. 6-7, ss. 467–488, juni 1982, doi: 10.1007/BF02650179. [Online]. Tillgänglig: http://link.springer.com, hämtad: 2019-05-10.

[3] I. Roos, ”Nu ska kvantdatorn bli verklighet,” *Chalmers magasin*, nr. 1, ss. 16–20, 2018. [Online]. Tillgänglig: https://www.chalmers.se/sv/nyheter/magasin, hämtad: 2019-01-31.

[4] M. A. Nielsen och I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, 7 uppl., New York, USA: Cambridge University Press, 2010.

[5] H. J. Lipkin, N. Meshkov, och A. J. Glick, ”Validity of many-body approximation methods for a solvable model. (I). Exact solutions and perturbation theory,” *Nuclear Physics*, vol. 62, nr. 2, ss. 188–198, feb. 1965, doi: 10.1016/0029-5582(65)90862-X. [Online]. Tillgänglig: https://www.sciencedirect.com, hämtad: 2019-01-27.

[6] C. Providencia, J. da Providencia, Y. Tsue, och M. Yamamura, ”The Lipkin Model in Many-Fermion System as an Example of the su(1,1) x su(1,1)-Algebraic Model,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 116, s. 87, 2006, doi: 10.1143/PTP.116.87. [Online]. Tillgänglig: https://academic.oup.com/ptp/, hämtad: 2019-05-12.

[7] A. Peruzzo *et al.*, ”A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor,” *Nature Communications*, vol. 5, nr. 4213, juli 2014, doi: 10.1038/ncomms5213. [Online]. Tillgänglig: https://www.nature.com, hämtad: 2019-01-31.

[8] J. R. McClean, J. Romero, R. Babbush, och A. Aspuru-Guzik, ”The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms,” *New Journal of Physics*, vol. 18, nr. 2, ss. 1–20, feb. 2016, doi: 10.1088/1367-2630/18/2/023023. [Online]. Tillgänglig: https://iopscience.iop.org, hämtad: 2019-02-06.

[9] Rigetti Computing, ”Forest SDK,” 2019. [Online]. Tillgänglig: https://www.rigetti.com/forest, hämtad: 2019-01-31.

[10] F. Schwabl, *Advanced Quantum Mechanics*, 4 uppl., Berlin, Tyskland: Springer, 2008, (på Tyska). [Online]. Tillgänglig: https://link.springer.com, hämtad: 2019-02-26.

[11] J. B. Parkinson och D. J. J. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems*, Berlin, Tyskland: Springer, 2010. [Online]. Tillgänglig: https://link.springer.com, hämtad: 2019-04-12.

[12] A. Kandala, K. Temme, A. D. Córcoles, A. Mezzacapo, J. M. Chow, och J. M. Gambetta, ”Error mitigation extends the computational reach of a noisy quantum processor,”

Nature, vol. 567, nr. 7749, ss. 491–495, mars 2019, doi: 10.1038/s41586-019-1040-7. [Online]. Tillgänglig: http://www.nature.com, hämtad: 2019-05-10.

[13] Rigetti Computing. Noise and Quantum Computation — pyQuil 2.7.2 documentation. [Online]. Tillgänglig: http://docs.rigetti.com/en/stable/noise.html, hämtad: 2019-05-14.

[14] P. Jordan och E. Wigner, "Über das paulische äquivalenzverbot," *Zeitschrift für Physik*, vol. 47, nr. 9, ss. 631–651, sep. 1928, doi: 10.1007/BF01331938. [Online]. Tillgänglig: https://link.springer.com, hämtad: 2019-04-11.

[15] J. Romero, R. Babbush, J. R. McClean, C. Hempel, P. J. Love, och A. Aspuru-Guzik, "Strategies for quantum computing molecular energies using the unitary coupled cluster ansatz," *Quantum Science and Technology*, vol. 4, nr. 1, s. 014008, okt. 2018, doi: 10.1088/2058-9565/aad3e4. [Online]. Tillgänglig: https://iopscience.iop.org, hämtad: 2019-05-13.

[16] P. Niemann, R. Datta, och R. Wille, "Logic synthesis for quantum state generation," *2016 IEEE 46th International Symposium on Multiple-Valued Logic (ISMVL)*, Sapporo, Japan, ss. 247–252, maj 2016, doi: 10.1109/ISMVL.2016.30. [Online]. Tillgänglig: https://ieeexplore.ieee.org, hämtad: 2019-05-13.

[17] R. S. Smith, M. J. Curtis, och W. J. Zeng, "A practical quantum instruction set architecture," 2016. [Online]. Tillgänglig: https://arxiv.org, hämtad: 2019-05-16.

[18] J. R. McClean *et al.*, "OpenFermion: The Electronic Structure Package for Quantum Computers," okt. 2017, icke-publiserad. [Online]. Tillgänglig: https://arxiv.org, hämtad: 2019-05-16.

[19] J. A. Nelder och R. Mead, "A Simplex Method for Function Minimization," *The Computer Journal*, vol. 7, nr. 4, ss. 308–313, jan. 1965, doi: 10.1093/comjnl/7.4.308. [Online]. Tillgänglig: https://academic.oup.com, hämtad: 2019-01-27.

[20] P. I. Frazier, "A Tutorial on Bayesian Optimization," juli 2018, icke-publiserad. [Online]. Tillgänglig: https://arxiv.org, hämtad: 2019-05-13.

[21] "Scikit-optimize," 2018. [Online]. Tillgänglig: https://github.com/scikit-optimize/scikit-optimize, hämtad: 2019-04-05.

[22] J. A. Rice, *Mathematical Statistics and Data Analysis*, 3 uppl., Boston, USA: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2007.

[23] A. Kandala *et al.*, "Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets," *Nature*, vol. 549, s. 242, sep. 2017, doi: 10.1038/nature23879. [Online]. Tillgänglig: www.nature.com, hämtad: 2019-05-13.

[24] C. E. Rasmussen och C. K. I. Williams, *Gaussian processes for machine learning*, 2 uppl., Cambridge, USA: MIT Press, 2006.

[25] J. Demmel, I. Dumitriu, och O. Holtz, "Fast linear algebra is stable," *Numerische Mathematik*, dec. 2006, doi: 10.1007/s00211-007-0114-x. [Online]. Tillgänglig: https://arxiv.org, hämtad: 2019-05-13.

Appendix A: Beteckningar

Beteckning	Begrepp och förklaring
$\mathcal{H}$	Hamiltoinanoperator, definierad i (2.2)
H	Hamiltonianmatris ($H_{ij} = \langle i \vert \mathcal{H} \vert j \rangle$)
$\sigma \ = \pm 1$	Kvanttal som särskiljer de två energinivåerna
$p \ \in \{0, 1, 2, ...\}$	Kvanttal som numrerar enpartikeltillstånden inom samma energinivå
ϵ	Energiseparationen mellan de två energinivåerna
V	Styrkan av växelverkan mellan partiklar inom samma energinivå
$a^\dagger_{\sigma p}$	Fermionisk skapelseoperator
$a_{\sigma p}$	Fermionisk förintelseoperator
$\mathcal{J}$	Kvasispinnoperatorer
J	Kvanttal, $J(J+1)$ är egenvärden till $\mathcal{J}^2$
m	Kvanttal, m är egenvärden till $\mathcal{J}_z$
H^ν_J	Symmetrireducerade matriser i Lipkinmodellen
θ	Uppsättning variationsparametrar till ansatserna
$A(\theta)$	Operator som svarar mot ansatskvantdatorprogram
$I, \ X, \ Y, \ Z$	Paulioperatorer, exempel på hermiteska unitära operatorer
P	Godtycklig Paulioperator ($X, \ Y, \ Z$ eller I)
$\mathcal{P}$	Pauliterm, sammansättning av Paulioperatorer
M	Antal samplingar
θ_{tol}	Tolerans inom vilka funktionsevalueringar medelvärdesbildas
f_{tol}	Funktionstoleransen för Nelder-Meadalgoritmen
QSG	Quantum State Generator
UCC	Unitary Coupled-Cluster
E-UCC	Enpartikelkodad UCC-ansats
B-UCC	Binär kvantbitkodad UCC-ansats
E-QSG	Enpartikelkodad QSG-ansats
B-QSG	Binär kvantbitkodad QSG-ansats
NM	Nelder-Meadalgoritmen
BOGP	Bayesiansk optimeringsalgoritm med Gaussiska processer

Appendix B: Lipkinmodellen

B.1 Exempel på Hamiltonianmatriser i Lipkinmodellen

För två partiklar ges den oreducerade Hamiltonianmatrisen i Lipkinmodellen, se (2.2), av

$$H = \begin{bmatrix} -\epsilon & 0 & 0 & V \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ V & 0 & 0 & \epsilon \end{bmatrix} \qquad D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \qquad \text{där } \lambda = \sqrt{\epsilon^2 + V^2},$$

där D är matrisen efter diagonalisering. Egenvärdena är således 0 med degeneration 2 samt $\pm\lambda$. På samma sätt blir matrisen för tre partiklar

$$H = \begin{bmatrix} -\frac{3\epsilon}{2} & 0 & 0 & V & 0 & V & V & 0 \\ 0 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & V \\ 0 & 0 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & V \\ V & 0 & 0 & \frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & V \\ V & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 \\ V & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\epsilon}{2} & 0 \\ 0 & V & V & 0 & V & 0 & 0 & \frac{3\epsilon}{2} \end{bmatrix} \qquad D = \begin{bmatrix} -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\epsilon}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{bmatrix}$$

med dubbelt degenererade egenvärden $\pm\epsilon/2$ samt egenvärdena

$$\lambda_{1,2} = \mp\frac{\epsilon}{2} - \sqrt{\epsilon^2 + 3V^2},$$
$$\lambda_{3,4} = \mp\frac{\epsilon}{2} + \sqrt{\epsilon^2 + 3V^2}.$$

B.2 Multiplicitet av reducerade Hamiltonianer

Vi härleder här ett uttryck för multipliciteten c_J för $\mathcal{H}''_J$-operatorerna efter symmetrireducering av Lipkinmodellens ursprungliga Hamiltonian, se (2.8). Beteckna dimensionen på egenrummet med egenvärde m till $\mathcal{J}_z$ med d_m. Minns att $\mathcal{J}_z$ kan tolkas som halva skillnaden mellan antalet exciterade partiklar och antalet partiklar i grundtillståndet samt att $J \in \{N/2 - \lfloor N/2 \rfloor, ..., N/2 - 1, N/2\}$. Från detta inses att

$$d_m = \binom{N}{N/2 - m},$$

där binomialkoefficienterna ska tolkas som 0 om det nedre värdet inte är ett heltal. Multipliciteten c_J är dimensionen på det gemensamma egenrummet till $\mathcal{J}^2$ och $\mathcal{J}_z$ med $\mathcal{J}^2$-egenvärde $J(J+1)$*. Det gäller att

$$d_J = c_J + d_{J+1}\,, \tag{B.1}$$

eftersom egenvärdet m förekommer en gång per gemensamt underrum till $\mathcal{J}^2$ och $\mathcal{K}$ med $J \geq m$. Genom (B.1) erhåller vi slutligen

$$c_J = \binom{N}{N/2 - J} - \binom{N}{N/2 - J - 1}.$$

Värden på c_J för N upp till 10 återfinns i tabell B.1.

Tabell B.1: *Värden på c_J för N från 1 till 10; utelämnade värden är implicit 0.*

N \ J	0	1/2	1	3/2	2	5/2	3	7/2	4	9/2	5
0	1										
1		1									
2	1		1								
3		2		1							
4	2		3		1						
5		5		4		1					
6	5		9		5		1				
7		14		14		6		1			
8	14		28		20		7		1		
9		42		48		27		8		1	
10	42		90		75		35		9		1

*c_J är oberoende av $\mathcal{J}_z$-egenvärdet.

B.3 Matriser i kvasispinnformuleringen

Nedan följer matriserna H_J^ν från kvasispinnformuleringen av Lipkinmodellen, upp till och med $J = 5$. Detta inkluderar alla matriser som förekommer i Lipkinsystem med upp till $N = 10$ partiklar och är de matriser som analyserats i studien.

$$H_1^1 = \begin{bmatrix} -\epsilon & V \\ V & \epsilon \end{bmatrix} \qquad H_1^2 = 0$$

$$H_{3/2}^1 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}\epsilon & \sqrt{3}V \\ \sqrt{3}V & 0 \end{bmatrix} \qquad H_{3/2}^2 = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}V \\ \sqrt{3}V & \sqrt{2}\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_2^1 = \begin{bmatrix} -2\epsilon & \sqrt{6}V & 0 \\ \sqrt{6}V & 0 & \sqrt{6}V \\ 0 & \sqrt{6}V & 2\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_2^2 = \begin{bmatrix} -\epsilon & 3V \\ 3V & \epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_{5/2}^1 = \begin{bmatrix} -\sqrt{6}\epsilon & \sqrt{10}V & 0 \\ \sqrt{10}V & 0 & \sqrt{18}V \\ 0 & \sqrt{18}V & \sqrt{2}\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_{5/2}^2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}\epsilon & \sqrt{18}V & 0 \\ \sqrt{18}V & 0 & \sqrt{10}V \\ 0 & \sqrt{10}V & \sqrt{6}\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_3^1 = \begin{bmatrix} -3\epsilon & \sqrt{15}V & 0 & 0 \\ \sqrt{15}V & -\epsilon & 6V & 0 \\ 0 & 6V & \epsilon & \sqrt{15}V \\ 0 & 0 & \sqrt{15}V & 3\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_3^2 = \begin{bmatrix} -2\epsilon & \sqrt{30}V & 0 \\ \sqrt{30}V & 0 & \sqrt{30}V \\ 0 & \sqrt{30}V & 2\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_{7/2}^1 = \begin{bmatrix} -\sqrt{12}\epsilon & \sqrt{21}V & 0 & 0 \\ \sqrt{21}V & -\sqrt{2}\epsilon & \sqrt{60}V & 0 \\ 0 & \sqrt{60}V & 0 & \sqrt{45}V \\ 0 & 0 & \sqrt{45}V & \sqrt{6}\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_{7/2}^2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{6}\epsilon & \sqrt{45}V & 0 & 0 \\ \sqrt{45}V & 0 & \sqrt{60}V & 0 \\ 0 & \sqrt{60}V & \sqrt{2}\epsilon & \sqrt{21}V \\ 0 & 0 & \sqrt{21}V & \sqrt{12}\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_4^1 = \begin{bmatrix} -4\epsilon & \sqrt{28}V & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{28}V & -2\epsilon & \sqrt{90}V & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{90}V & 0 & \sqrt{90}V & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{90}V & 2\epsilon & \sqrt{28}V \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{28}V & 4\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_4^2 = \begin{bmatrix} -3\epsilon & \sqrt{63}V & 0 & 0 \\ \sqrt{63}V & -\epsilon & 10V & 0 \\ 0 & 10V & \epsilon & \sqrt{63}V \\ 0 & 0 & \sqrt{63}V & 3\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_{9/2}^1 = \begin{bmatrix} -\sqrt{20}\epsilon & 6V & 0 & 0 & 0 \\ 6V & -\sqrt{6}\epsilon & \sqrt{126}V & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{126}V & 0 & \sqrt{150}V & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{150}V & \sqrt{2}\epsilon & \sqrt{84}V \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{84}V & \sqrt{12}\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_{9/2}^2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{12}\epsilon & \sqrt{84}V & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{84}V & -\sqrt{2}\epsilon & \sqrt{150}V & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{150}V & 0 & \sqrt{126}V & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{126}V & \sqrt{6}\epsilon & 6V \\ 0 & 0 & 0 & 6V & \sqrt{20}\epsilon \end{bmatrix}$$

$$H_5^1 = \begin{bmatrix} -5\epsilon & \sqrt{45}V & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{45}V & -3\epsilon & \sqrt{168}V & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{168}V & -\epsilon & 15V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 15V & \epsilon & \sqrt{168}V & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{168}V & 3\epsilon & \sqrt{45}V \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{45}V & 5\epsilon \end{bmatrix} \qquad H_5^2 = \begin{bmatrix} -4\epsilon & \sqrt{108}V & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{108}V & -2\epsilon & \sqrt{210}V & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{210}V & 0 & \sqrt{210}V & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{210}V & 2\epsilon & \sqrt{108}V \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{108}V & 4\epsilon \end{bmatrix}$$

Appendix C: VQE

C.1 Tensorprodukter

Tillstånd för flera kvantbitar representeras genom en tensorprodukt av de individuella tillstånden [4, s. 94], så att det gemensamma tillståndet för två enkvantbittillstånd $|\psi\rangle$ och $|\phi\rangle$ ges enligt

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix}\alpha_\psi \\ \beta_\psi\end{bmatrix},\ |\phi\rangle = \begin{bmatrix}\alpha_\phi \\ \beta_\phi\end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \quad |\psi\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = \begin{bmatrix}\alpha_\psi\alpha_\phi \\ \alpha_\psi\beta_\phi \\ \beta_\psi\alpha_\phi \\ \beta_\psi\beta_\phi\end{bmatrix}.$$

Det existerar tillstånd som inte kan skrivas som en tensorprodukt av två enkvantbittillstånd, till exempel

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \begin{bmatrix}0 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0\end{bmatrix},$$

men alla tillstånd kan skrivas som en superposition av de flerkvantbittillstånd som kan erhållas genom tensorprodukt av de rena enkvantbittillstånden $|\uparrow\rangle$ och $|\downarrow\rangle$. Detta är ett exempel på sammanflätning (*quantum entanglement*); sannolikheten att ena kvantbiten mäts till $|\uparrow\rangle$ eller $|\downarrow\rangle$ kan ej separeras från den andra. I detta exempel mäts de alltid till motsatta tillstånd.

Analogt används tensorprodukten även för att kombinera enkvantbitgrindar till kvantgrindar som opererar på flerkvantbittillstånd*, så att exemplet (3.2), där X utförs på kvantbit 2, Y på kvantbit 1 och identiteten I på kvantbit 0, ges av $X_2Y_1I_0 = X \otimes Y \otimes I$, så att

$$X \otimes Y \otimes I\,|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = (X\,|\uparrow\rangle) \otimes (Y\,|\uparrow\rangle) \otimes (I\,|\uparrow\rangle) = \mathrm{i}\,|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\,.$$

På matrisform skrivs detta med Kroneckerprodukter [4, s. 74] som

$$\left(\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right)\left(\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\right) =$$

$$= \begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i}\\
0 & 0 & 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 & 0\\
0 & 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0\\
\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\\mathrm{i}\\0\end{bmatrix}.$$

*Likt flerkvantbittillstånd kan dock inte alla flerkvantbitsoperatorer sönderläggas i en tensorprodukt.

C.2 Fördelning av mätningar på kvantdatorn

Här härleds hur mätningarna på kvantdatorn bör fördelas över Paulitermerna i Hamiltonianen för att minimera variansen av dennas väntevärdesskattning, vilken är uppåt begränsad enligt

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\langle\mathcal{H}\rangle}\right) \leq \sum_{j=1}^{k} \frac{|c_j|^2}{M_j} \equiv f(\vec{M}),$$

se avsnitt 3.5.2. Notera att M_k, för ett fixt totalt antal samplingar M, bestäms av

$$M_k(M_1, ..., M_{k-1}) = M - \sum_{j=1}^{k-1} M_j \,,$$

varför

$$f(\vec{M}) = \sum_{j=1}^{k-1} \frac{|c_j|^2}{M_j} + \frac{|c_k|^2}{M_k(M_1, ..., M_{k-1})} \,.$$

För att minimera f söks $\partial f/\partial M_i = 0$ för $i = 0, ..., k-1$. Det gäller att

$$\frac{\partial f}{\partial M_j} = -\frac{|c_j|^2}{M_j^2} - \frac{|c_k|^2}{M_k^2}\frac{\partial M_k}{\partial M_j} = -\frac{|c_j|^2}{M_j^2} + \frac{|c_k|^2}{M_k^2} = 0$$
$$\implies \frac{|c_j|}{M_j} = \frac{|c_k|}{M_k} \equiv \frac{1}{\lambda} \quad \implies \quad M_j = \lambda\,|c_j|.$$

Notera att $\partial^2 f/\partial M_j^2 \geq 0$, varför detta svarar mot ett minimum. Från $M = \sum_j M_j$ kan λ bestämmas och M_j fås slutligen som

$$M_j = M\frac{|c_j|}{\sum_i |c_i|} \,.$$

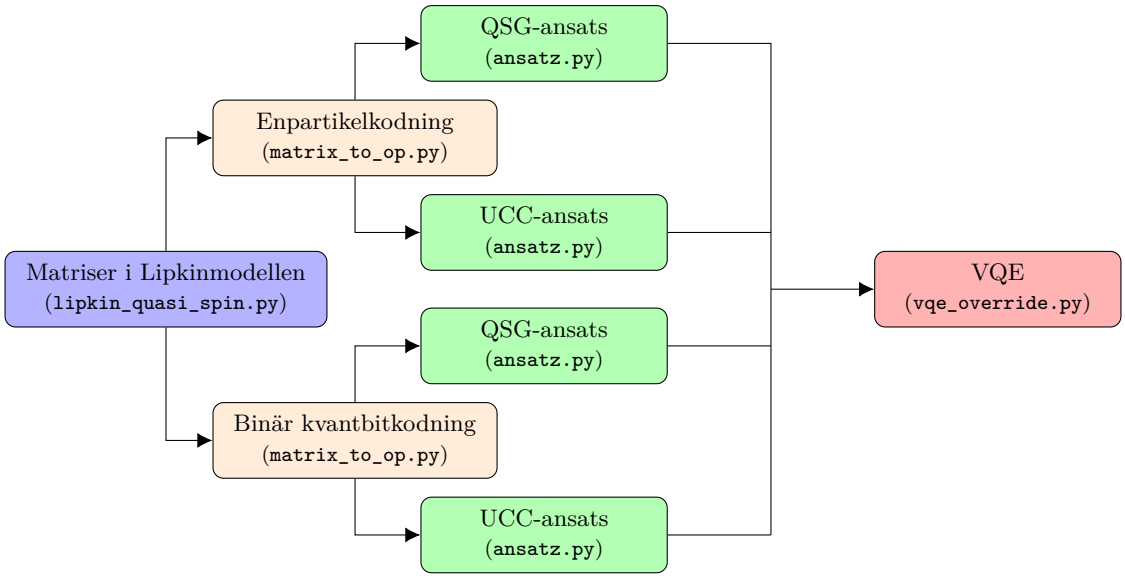
Appendix D: Kodstruktur

Länk till Github-repository:

`https://github.com/kajoel/Simulating_quantum_systems_on_a_QVM/`

I denna studie används huvudsakligen de paket som tillhandahålls i *Forest SDK*. De viktigaste paketen är pyQuil, som utnyttjas för att kommunicera med den emulerade kvantdatorn, och algoritmbiblioteket Grove, i vilken VQE och QSG finns implementerade. OpenFermion [18] är ett bibliotek som syftar till att underlätta simuleringar av fermioniska system på kvantdatorer, vars Jordan-Wignertransform samt klasser för skapelse- och förintelseoperatorer används. Även paketet Forest-OpenFermion används för att översätta objekt från OpenFermion till pyQuil.

Nedan följer en schematisk bild av relationerna mellan några av modulerna och korta beskrivningar av de mest centrala.



Figur D.1: *Flödesschema över relationerna mellan moduler som används i VQE-algoritmen.*

`lipkin_quasi_spin.py`
Genererar Hamiltonianmatriser H_J^1 och H_J^2, från (2.8), som tillhör Lipkinmodellen för parametrarna J, V och ϵ. Innehåller även metoder som beräknar egenvärdena klassiskt i jämförelsesyfte.

`matrix_to_op.py`
Modul som innehåller funktioner för att konvertera godtyckliga matriser till Paulisummor.

Här finns både enpartikelkodningen, se avsnitt 3.3.1, som kräver lika många kvantbitar som storleken på matrisen, och den binära kvantbitkodningen, se avsnitt 3.3.2, som endast behöver $\lceil \log_2 N \rceil$ kvantbitar.

`ansatz.py`
Implementerar de olika ansatserna från avsnitt 3.4: enpartikel- och binär kvantbitbaserade QSG- och UCC-ansatser.

`maps.py`
Innehåller bland annat en stereografisk projektion från $\mathbb{R}^n$ till $\mathbb{R}^{n-1}$ samt dess invers, vilken används i QSG-ansatserna.

`init_params.py`
Förser initialparametrar till Nelder-Meadalgoritmen för olika ansatser enligt avsnitt 3.5.1.

`callback.py`
Modul för interaktion med optimeringsalgoritmen under körtid. Innehåller implementering av omstart för Nelder-Meadalgoritmen enligt avsnitt 4.1. Möjliggör även insamling av data för realtidsplottar.

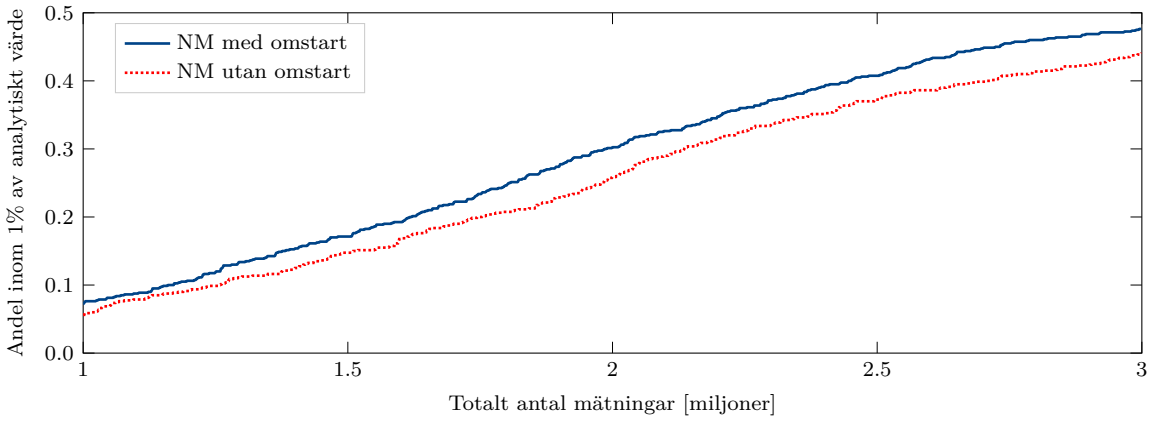
`vqe_override.py`
En modifierad version av Rigettis modul `vqe.py` i Grove. Innehåller diverse bugfixar, optimeringar samt kod för beräkning av variansen hos det skattade väntevärdet.

Appendix E: Kompletterande resultat

E.1 Omstart av Nelder-Meadalgoritmen

Nelder-Meadalgoritmen är inte konstruerad för att optimera på stokastiska funktionsytor. En bieffekt av detta är att algoritmen kan stöta på falska minima inducerade av brus, fastna och avsluta optimeringen. En annan effekt är att algoritmen ibland inte terminerar inom ett rimligt antal funktionsevalueringar, vilket illustreras i figur 4.2.

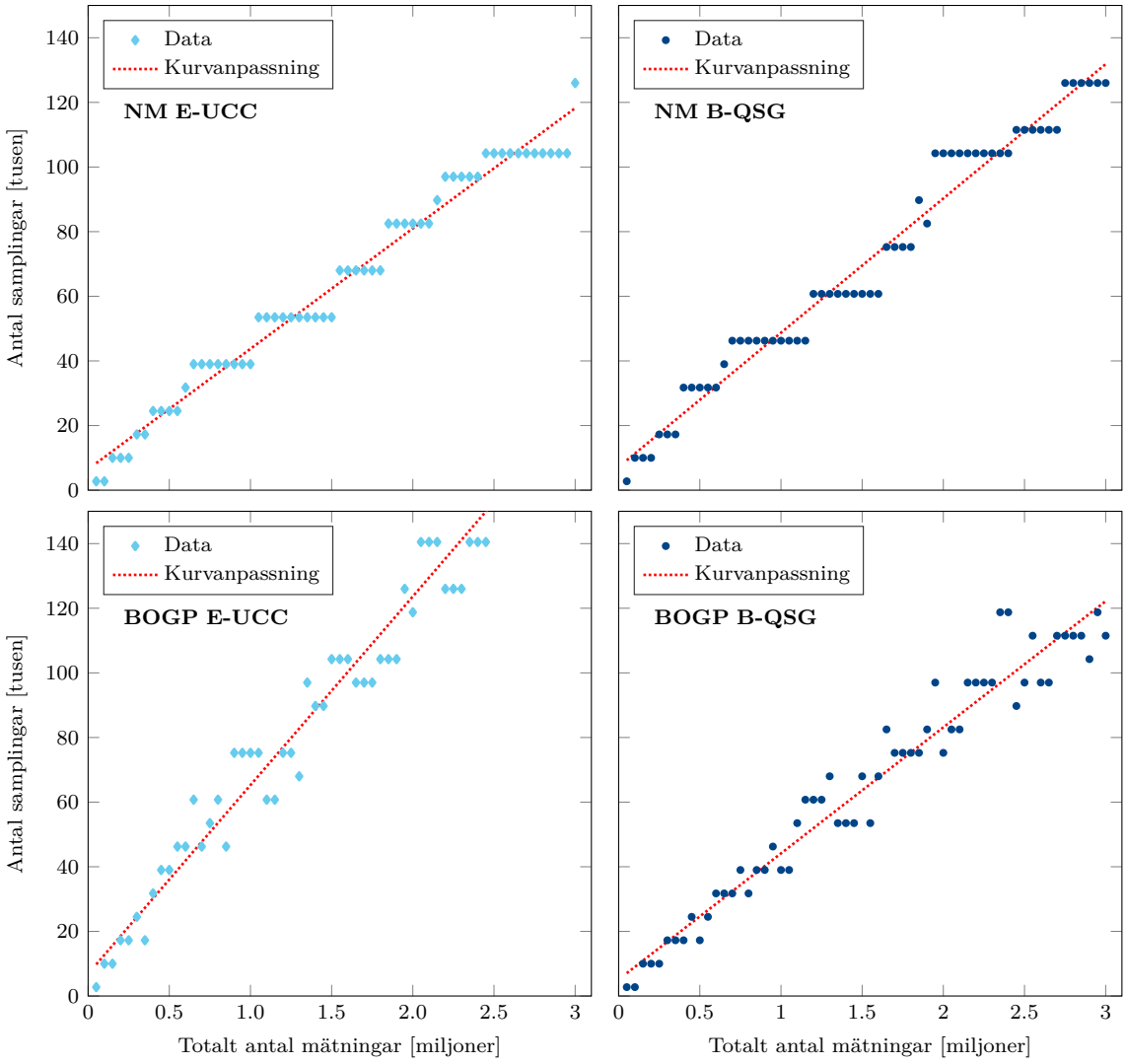
För att motverka dessa effekter startar vi om algoritmen då den evaluerar funktionen i samma parametervärden upprepade gånger. Vi definierar i detta sammanhang ”samma parametrar” enligt (3.13) med $\theta_{\text{tol}} = 0.001$. Efter att ha testat att starta om med omstartsparameter från 1 till 6 har vi kommit fram till att omstart efter 3 evalueringar i samma parametrar tycks mest gynnsamt. Den kumulativa andelen optimeringar som terminerar inom 1 % av det analytiska värdet för detta fall visas i figur E.1.



Figur E.1: *Kumulativ andel beräknade energiegenvärden inom* 1 % *av det analytiska för Nelder-Meadalgoritmen med och utan omstart som funktion av det totala antalet mätningar på den emulerade kvantdatorn. Här betraktas alla fyra* 3×3*-matriser i Lipkinmodellen för* $V/\epsilon = 1$*. Algoritmen används med stoppkriterier, med* f_{tol} *enligt* (3.14) *och parametertolerans* 0.01*, samt med maximalt 200 funktionsevalueringar. Notera att andelen är kumulativ så att exempelvis värdet vid 2 miljoner motsvarar andelen beräknade energiegenvärden med upp till 2 miljoner mätningar inom* 1 % *av det analytiska.*

E.2 Kurvanpassning för att bestämma antalet samplingar

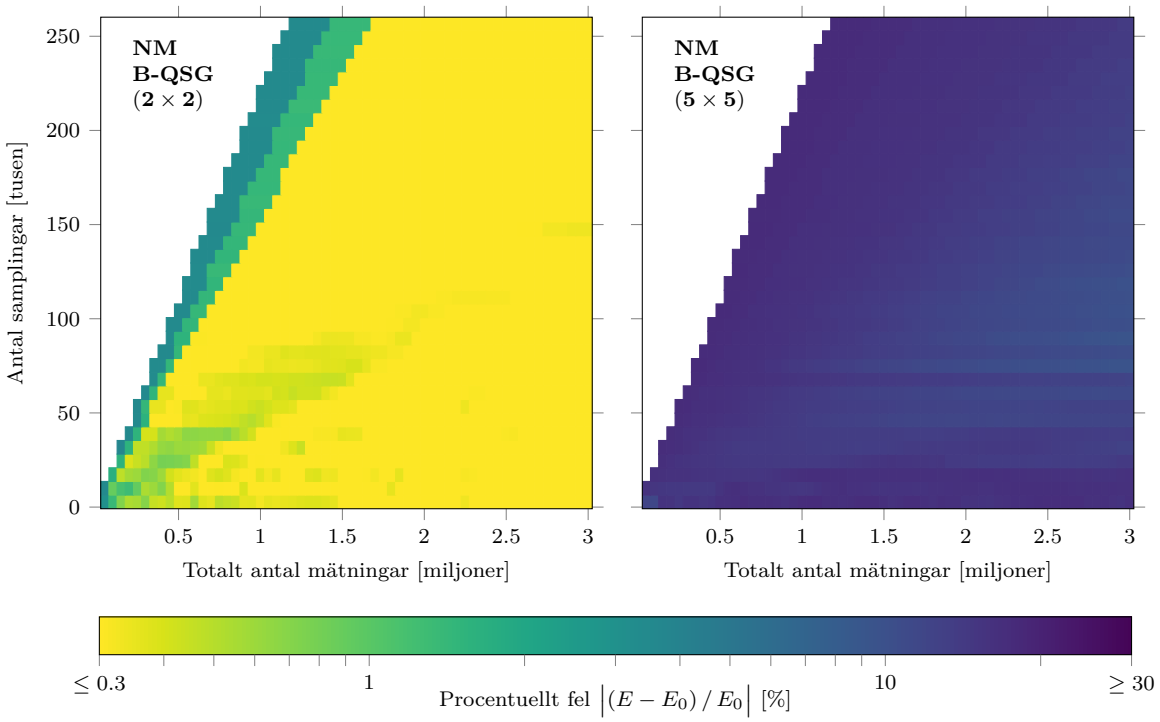
De punkter som användes för kurvanpassningen i figur 4.5 presenteras i figur E.2 nedan. Punkterna som anpassningen utgår ifrån motsvarar det minsta felet för varje val av det totala antalet mätningar.



Figur E.2: *Komplement till figur 4.5. Punkterna svarar mot de antal samplingar som ger minst fel mellan det med VQE beräknade egenvärdet och det analytiskt framtagna för olika totala antal mätningar.*

E.3 Matriser av storlek två och fem

Då beräkningstiden ökar kraftigt med matrisstorlek var möjligheten att studera optimala parameterval för VQE-algoritmen för större system begränsad. För att få en inblick i hur egenvärdesproblemet skalar med matrisstorlek i VQE-algoritmen låter vi avslutningsvis Nelder-Meadalgoritmen med B-QSG beräkna egenvärdet för 2×2- och 5×5-matriserna i Lipkinmodellen*. I figur E.3 presenteras det procentuella egenvärdesfelet för dessa beräkningar. För matriserna av storlek 5 når det beräknade egenvärdet aldrig inom 9 % av det analytiska.



Figur E.3: *Procentuella egenvärdesfel som funktion av antalet samplingar per funktionsevaluering och det totala antalet mätningar på en emulerad kvantdator optimerad med VQE- och Nelder-Meadalgoritmen. Här betraktas alla fyra matriser av storlek 5×5 och 2×2 i Lipkinmodellen för $V/\epsilon = 1$ och ansatsen B-QSG.*

*Som innan har samtliga reducerade matriser av denna storlek använts, vilket svarar mot $H_1^1, H_{3/2}^1, H_{3/2}^2$ och H_2^2 respektive $H_4^1, H_{9/2}^1, H_{9/2}^2$ och H_5^2.