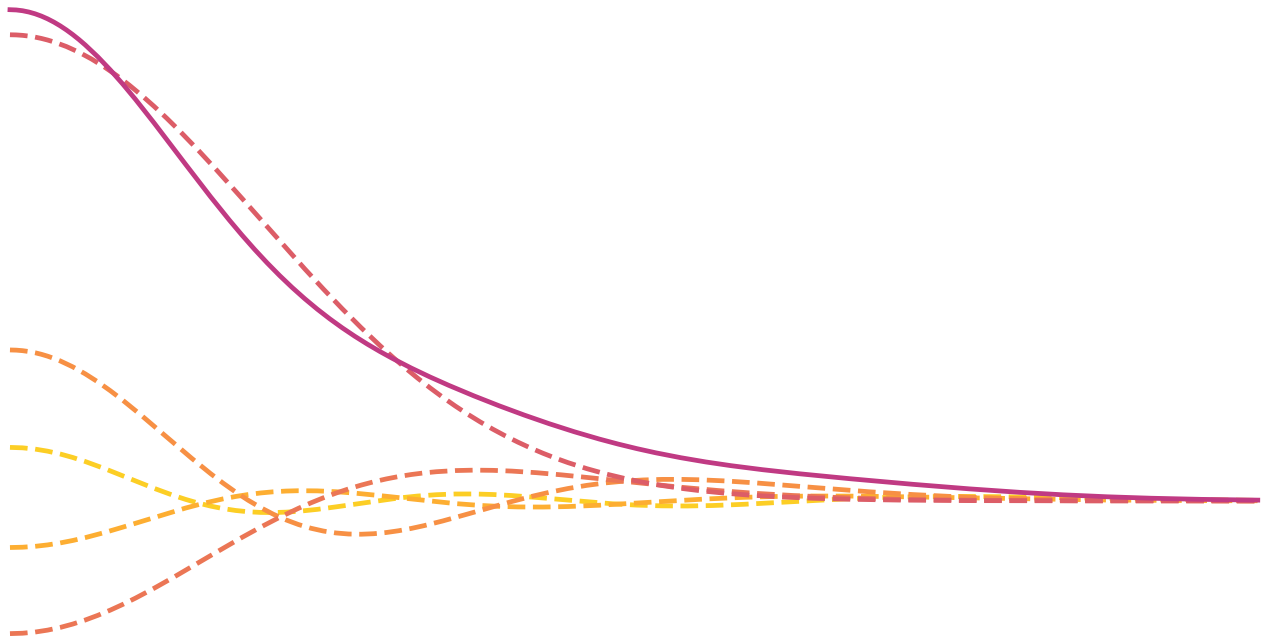




CHALMERS



Kvantmekanisk simulering av enelektron- atomen på en emulerad kvantdator

Kandidatarbete på civilingenjörsprogrammet i Teknisk Fysik

ADEL HASIĆ
GUSTAF SJÖSTEN
CARL ANDERSSON
SIMON STEFANUS JACOBSSON

Kvantmekanisk simulering av enelektronatomen på en emulerad kvantdator

ADEL HASIC
GUSTAF SJÖSTEN
CARL ANDERSSON
SIMON STEFANUS JACOBSSON

© ADEL HASIC, GUSTAF SJÖSTEN,
CARL ANDERSSON & SIMON STEFANUS JACOBSSON, 2019.

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

Kandidatarbete 2019: TIFX04-19-80
Institutionen för fysik
Avdelningen för subatomär fysik och plasmafysik
Teoretisk subatomär fysik
Chalmers Tekniska Högskola
412 96 Göteborg
Telefon +46 31 772 1000

Omslag: Vågfunktion för enelektronatomens grundtillstånd utvecklad i en harmonisk oscillator-bas. De streckade linjerna är de enskilda termerna som adderas ihop till den heldragna linjen.

Typsatt i L^AT_EX
Göteborg, Sverige 2019

Sammandrag

I den här rapporten undersöker vi ett enkelt kvantmekaniskt system som simuleras på en emulerad kvantdator. Vi uttrycker ett enelektronsystem i en harmonisk oscillator-bas och söker efter dess grundtillståndsenergi. Metoderna för att hitta energin består av parametersvep samt algoritmen Variational Quantum Eigensolver (VQE) med COBYLA som optimeringsalgoritm. Simuleringarna körs på Rigettis emulerade kvantdator. Vi analyserar en ansats av typen Unitary Coupled Cluster (UCC) för systemets vågfunktion och jämför denna med en enklare ansats. Slutligen jämförs den uppskattade grundtillståndsenergin med en referenslösning. Utöver detta applicerar vi även en brusmodell för att undersöka resultatens känslighet för kvantmekaniskt brus. Vi finner att optimering är en bättre metod än parameter-svep när Hamiltonianen utvecklas i ett större antal basvektorer, men optimeringsproblemet i sig blir för komplext för ett stort antal basvektorer. Vidare antyder våra simuleringar att känsligheten för brus ökar med antalet grindar hos en specifik vågfunktionsansats.

Abstract

In this report, we investigate a simple quantum mechanical system simulated on an emulated quantum computer. We express a single electron system in a harmonic oscillator basis and search for its ground state energy. The method for finding the energy consists of parameter sweeps and the algorithm Variational Quantum Eigensolver (VQE) using COBYLA as the optimization algorithm. The simulations are run on an emulated quantum machine created by Rigetti. We analyze a Unitary Coupled Cluster (UCC) ansatz for the system's wave function and compare it with a simpler ansatz. Finally, the estimated ground state energy is compared with a reference solution. In addition, we also apply a noise model to investigate the sensitivity of our results subject to quantum mechanical noise. We find that optimization is a better method than parameter sweep when the Hamiltonian is expanded in a larger number of basis vectors, but the optimization problem in itself becomes too difficult to solve as the number of basis vector increases. Furthermore, the simulations imply that the sensitivity to noise increases with the number of gates in a particular wave function ansatz.

Sökord: kvantdator, kvantbit, enelektronatom, VQE, COBYLA, UCC, brus.

Keywords: quantum computer, qubit, one electron atom, VQE, COBYLA, UCC, gate noise, measurement noise.

Förord

Vi vill rikta ett stort tack till våra handledare, Christian och Andreas, som gav oss möjligheten att skriva detta oerhört intressanta och engagerande kandidatarbete.

Göteborg, maj 2019

Innehåll

1	Inledning	1
2	Teori	2
2.1	Enelektronssystemets Hamiltonian	2
2.1.1	Hamiltonianens matriselement	3
2.1.2	Jordan-Wignertransformation och spinnformalism	4
2.2	Kvantmekaniska och klassiska datorer	5
2.2.1	Informationshantering i datorer	5
2.2.2	Brus i klassiska respektive kvantmekaniska datorer	6
3	Metod	8
3.1	Referenslösning för enelektronssystemet	8
3.2	VQE	9
3.2.1	Vågfunktionsansatser	10
3.2.2	Klassiska optimeringsalgoritmer	12
3.2.3	Parametersvep	12
3.3	Simulering på kvantdatorn	12
3.3.1	Pythonbibliotek	13
3.3.2	Programmering på kvantdatorn	13
4	Resultat och Diskussion	19
4.1	Jämförelse mellan ansatser för parametersvep	19
4.2	Jämförelse mellan parametersvep och optimering för UCC	23
4.3	Undersökningar av mät- och grindbrus	26
5	Slutsatser och vidare undersökningar	29
A	Test av fermioniska kanoniska kommutationsrelationer	I
B	Analytiskt beräknad Hamiltonian med två basvektorer	IV
C	Reella symmetriska matriser	VI
D	Visualisering av grundtillståndet	VII
E	Första exciterade tillståndet	VIII

1

Inledning

Simuleringar av kvantmekaniska system på klassiska datorer har varit en känd utmaning sedan 1980-talet. Som en lösning på detta föreslog Richard Feynman en modell av en ny typ av dator [1], en dator som skulle baseras på kvantmekaniska fenomen som till exempel sammanflätning och superposition. Denna dator förväntades kunna utföra kvantmekaniska simuleringar betydligt mer effektivt än klassiska datorer. Under mitten av 1990-talet byggde David Deutsch vidare på denna idé genom att bevisa att vissa problem som saknar effektiva lösningar på klassiska datorer kan lösas effektivt med kvantdatorer [2]. Detta var startskottet för upptäckten av en mängd problem lämpade för kvantdatorer — inte bara problem som är bundna till kvantfysik — utan även olösta sådana inom matematik och datavetenskap. Utöver simulering av starkt växelverkande kvantsystem finns exempelvis problem som Shors primtalsproblem, Grovers sökalgoritm, och diverse krypteringsproblem.

Dagens kvantdatorer är dock långt ifrån tillräckligt effektiva för att vara allmänt tillgängliga och användbara [3]. En av utmaningarna är den stora kostnaden för att utveckla en fungerande kvantdator. Det är i nuläget främst forskningsgrupper på vissa universitet och stora tekniksatsande företag som har tillgång till egna kvantdatorer. Fler och fler av dessa organisationer öppnar dock upp för andra att använda sig av deras kvantdatorer, antingen via emulering eller till och med genom tillgång till maskinerna själva via olika molntjänster.

Således finns det stor potential i en framtida, väl fungerade kvantdator även om det finns mycket kvar att undersöka. Exempelvis krävs fortsatta studier om vilka växelverkande kvantsystem som är lämpade att simulera på en kvantdator. Syftet med det här arbetet är att undersöka möjligheten att simulera ett sådant system. Speciellt simuleras ett enelektronsystem på en emulerad kvantdator. Metoderna testas genom att 1) mäta systemets grundtillståndsenergi på den emulerade kvantdatorn, för att 2) jämföra denna med det värde på energin som beräknas numeriskt på en klassisk dator. Utöver detta appliceras en brusmodell på simuleringarna för att undersöka känsligheten hos resultaten.

Denna rapport är strukturerad enligt följande: I kapitel 2 presenterar vi ett uttryck för Hamiltonianen till det kvantsystem vi undersöker på en kvantbitkompatibel form. Vi presenterar även en modell för att undersöka brusets inverkan på simuleringen. I kapitel 3 härleder vi en referenslösning till grundtillståndsenergin hos kvantsystemet som vi sedan kommer att jämföra våra resultat mot. Vi går även i mer detalj igenom algoritmen för simuleringen och sist presenterar vi de Pythonbibliotek som vi har använt för att emulera kvantdatorn samt programmeringsaspekter. I kapitel 4 beskriver och diskuterar vi våra resultat för att till slut i kapitel 5 summera vad vi har kommit fram till och förslag på vidare studier.

2

Teori

Följande kapitel inleds med en kvantmekanisk behandling av enelektronsystemet. Detta avsnitt innehåller även den teori som är nödvändig för att beskriva ett kvantmekaniskt system på ett sätt som är kompatibelt med beräkningar på kvantbitar (kvantbitkompatibel representation). Avsnittet inleds med en allmän introduktion till andrakvantiseringsformalismen för att beskriva kvantmekaniska system. Det första delavsnittet beskriver val av bastillstånd samt beräkning av matriselementen för Hamiltonianen. Detta utgör det naturliga första steget mot en Hamiltonian kompatibel med kvantbitberäkningar. Därefter beskrivs Jordan-Wignertransformationen som slutligen gör Hamiltonianen kvantbitkompatibel.

Teorikapitlet avslutas med avsnitt 2.2 vars primära syfte är att introducera skillnaden mellan en klassisk respektive kvantmekanisk dator. Mer specifikt beskrivs hur information lagras och bearbetas i de två datortyperna; utöver detta introduceras både klassiskt och kvantmekaniskt brus.

2.1 Enelektronsystemets Hamiltonian

Andrakvantiseringsformalismen förenklar studiet av flerkropparsproblem baserat på det faktum att partiklar är icke-urskiljbara. Den irrelevanta informationen om precis vilken partikel som befinner sig i vilket tillstånd, som nödvändigtvis behandlas i förstakvantiseringsformalismen, tas ej hänsyn till med andrakvantisering, och istället betraktas antalet partiklar i respektive tillstånd (jmf. Fermi-Dirac- respektive Einstein-Bosestatistik).

Enpartikeltillstånd beskrivs generellt som element i ett Hilbertrum. För system bestående av flera identiska partiklar utgörs tillståndsrummet av ett så kallat Fockrum. Fockrummet är en konstruktion av de ingående partiklarnas tillståndsrum. Tillstånden i Fockrummet skrivs som

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle, \quad (2.1)$$

och där varje n_i är heltal som beskriver hur många partiklar som ockuperar just det tillståndet [4]. I vårt fall är alltså de olika basvektorer i (2.1) de olika energiegen-tillstånden för den harmoniska oscillatorn, och för enpartikelsystem fås villkoret

$$\sum_i n_i = 1.$$

Vidare används operatorerna $a_i^\dagger$ (kreationsoperator) och a_i (annihilationsoperator) som definieras utifrån deras inverkan på tillstånd i ett Fockrum

$$a_i^\dagger |\dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |\dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (2.2)$$

$$a_i | \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | \dots, n_i - 1, \dots \rangle. \quad (2.3)$$

Vid en närmare anblick av (2.2) och (2.3) framgår orsaken till namnen på operatorerna; medan $a_i^\dagger$ *skapar* en partikel i ett givet tillstånd i Fockrummet så *förintar* a_i en partikel i tillståndet. Vidare uppfyller dessa operatorer de fermioniska kommutationsrelationerna¹

$$\{a_i, a_j\} = 0, \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0, \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (2.4)$$

Med andrakvantiseringsformalismen kan Hamiltonianen för ett enpartikelsystem uttryckas med hjälp av dessa operatorer enligt

$$H = \sum_{i,j} \langle i | H | j \rangle a_i^\dagger a_j, \quad (2.5)$$

där $|i\rangle$ och $|j\rangle$ är basvektorer i en godtycklig bas. För ett explicit uttryck av Hamiltonianen i (2.5) krävs val av bastillstånd och beräkning av matriselementen $H_{ij} = \langle i | H | j \rangle$ i denna bas, vilket är syftet med följande avsnitt.

2.1.1 Hamiltonianens matriselement

Hamiltonianen i förstakvantiseringsform för ett enelektronsystem med kärnladdning Z (utan hänsyn till relativistiska effekter) ges av

$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (2.6)$$

där $p = -i\hbar\nabla$ är rörelsemängdsoperatoren, m_e är elektronens massa och e är elementarladdningen. Schrödingerekvationen hörande till denna Hamiltonian är en av de få som är analytiskt lösbara, och en av anledningarna till att vi valt att simulera just enelektronatomen är att vi då kan jämföra resultatet med den faktiska grundtillståndsenergin.

Uttrycket i (2.5) är ett helt exakt och allmänt uttryck för en Hamiltonian. Dock krävs för enelektronsystemet ett oändligdimensionellt Hilbertrum, och i praktiken behöver detta approximeras med ett ändligdimensionellt rum för att möjliggöra effektiv simulering. En möjlig bas är en ändlig uppsättning egenvektorer till den tredimensionella harmoniska oscillatorn², $|nlm\rangle$ — se exempelvis Griffiths [5] för explicita uttryck. Vi kan införa den dimensionslösa parametern

$$\varepsilon = \sqrt{\hbar\omega/E_B} = \sqrt{\hbar\omega / \left(\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \right)}, \quad (2.7)$$

där ω är vinkelfrekvensen för den harmoniska oscillatorn och $E_B = 13.6$ eV är enelektronatomens analytiskt framtagna grundtillståndsenergi i fallet $Z = 1$. Då fås en parameterberoende Hamiltonian för enelektronatomen på formen

¹Operationen $\{\cdot, \cdot\}$ definieras av $\{A, B\} = AB + BA$ och kallas *antikommutatorn* av A och B .

²Hamiltonianen för en harmonisk oscillator är $\frac{p^2}{2m_e} + \frac{1}{2}m_e\omega^2 r^2$. Potentialen är alltså proportionell mot r^2 .

$$H(\varepsilon) = \frac{1}{2}\varepsilon^2 p^2 - \sqrt{2}\varepsilon \frac{1}{r}. \quad (2.8)$$

För en elektron i grundtillståndet väljs specifikt de bastillstånd vars kvanttal uppfyller $l = m = 0$, eftersom vi letar efter grundtillståndensenergin. Tillstånd med nollskilt banrörelsemängdsmoment $l \neq 0$ är således inte intressanta. Matriselementen kan då beräknas för $|n00\rangle$ till [6]

$$H_{ij}(\varepsilon) = \langle i00 | H(\varepsilon) | j00 \rangle = \frac{1}{2}\varepsilon^2 \left\{ \sqrt{j(j+\frac{1}{2})}\delta_{i,j-1} + (2j+\frac{3}{2})\delta_{ij} + \sqrt{(j+1)(j+\frac{3}{2})}\delta_{i,j+1} \right\} \\ - \sqrt{2}\varepsilon \sum_{k=0}^{i+j} B(i0, j0, k) \frac{k!}{\Gamma(k+\frac{3}{2})}, \quad (2.9)$$

där

$$B(n'l', nl, p) = \frac{1}{2}\Gamma(p+\frac{3}{2}) \sum_k c_{nlk} c_{n'l'p-k-\frac{1}{2}(l+l')}$$

är Brody-Moshinsky-koefficienterna som definieras i termer av koefficienterna

$$c_{nlk} = \frac{(-1)^k}{k!} \left[\frac{2(n!)}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}{(n-k)!\Gamma(k+l+\frac{3}{2})}.$$

Sammantaget blir Hamiltonianen uttryckt i andrakvantisering

$$H(\varepsilon) = \sum_{i,j} \langle i00 | H(\varepsilon) | j00 \rangle a_i^\dagger a_j := \sum_{i,j} H_{ij}(\varepsilon) a_i^\dagger a_j. \quad (2.10)$$

För att Hamiltonianen i (2.10), som beskriver ett fermionsystem, ska bli kvantbit-kompatibel behöver operatorerna $a_i^\dagger$ och a_j uttryckas i termer av operatorer som opererar på kvantbiter. Kvantbiter kan representeras med spinn, varför $a_i^\dagger$ och a_i behöver uttryckas i termer av spinnoperatorer. Ett sätt att åstadkomma detta är med en Jordan-Wignertransformation som beskrivs i detalj nästa avsnitt.

2.1.2 Jordan-Wignertransformation och spinnformalism

Paulis exklusionsprincip medför att ett fermiontillstånd alltid är antingen ockuperat av precis en fermion, eller icke-ockuperat, vilket möjliggör beskrivningen av tillståndet i termer av spinn. Med Jordan-Wignertransformationen åstadkoms detta för ett enpartikelsystem genom att representera icke-ockuperade tillstånd med spinnnedtillstånd $|0\rangle \mapsto |\downarrow\rangle$; ockuperade tillstånd representeras analogt enligt $|1\rangle \mapsto |\uparrow\rangle$. Kreations- och annihilationsoperatorerna som införs i andrakvantiseringsformalismen representeras med spinn-stegoperatorer. Där ges avbildningarna av $a^\dagger \mapsto S^+$ och $a \mapsto S^-$ vilket möjliggör användandet av matris-spinnformalismen för studiet av ett fermiontillstånd. Transformationen generaliseras enkelt till att representera flerkropparssystem med n partiklar genom att representera kreations- och annihilationsoperatorer för respektive tillstånd med en kedja (upprepade tensorprodukt) av spinnoperatorer.

Konventionen för matris-spinnformalism är att behandla tillstånd med tvådimensionella vektorer och operatorer med matriser i basen för spinn längs z -riktningen. I denna bas gäller att $|\uparrow\rangle \mapsto [1 \ 0]^T$ samt $|\downarrow\rangle \mapsto [0 \ 1]^T$ [5]. För att behålla de fermioniska kommutationsrelationerna krävs utöver stegoperatorerna införandet av en fasoperator, och de slutgiltiga uttrycken för stegoperatorerna för spinntillstånd j ges av³ [7]

$$a_j^\dagger \mapsto S_j^\dagger := \frac{1}{2} \left[\prod_{j>n} Z_n \right] (X_j - iY_j), \quad (2.11)$$

$$a_j \mapsto S_j := \frac{1}{2} \left[\prod_{j>n} Z_n \right] (X_j + iY_j), \quad (2.12)$$

där X_q, Y_q, Z_q är Paulimatriser verkandes på plats q i spinnkedjan och de ges av

$$X_q = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Y_q = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad Z_q = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

I appendix A bevisas att dessa definitioner av skapelse- och förintelseoperatorerna uppfyller den fermioniska algebran (2.4). Med denna transformationen kan Hamiltonianen från (2.5) uttryckas i termer av Paulimatriser [8]. Det slutgiltiga uttrycket för Hamiltonianen ges då av

$$H(\varepsilon) = \sum_{i,j} \langle i00 | H(\varepsilon) | j00 \rangle S_i^\dagger S_j = \sum_{i,j} H_{ij}(\varepsilon) S_i^\dagger S_j, \quad (2.13)$$

och denna form av Hamiltonianen är kvantbitkompatibel. Kvantbiten är alltså ett centralt begrepp och är ett av huvudämnena i nästa avsnitt.

2.2 Kvantmekaniska och klassiska datorer

Både kvantmekaniska och klassiska datorer utför logiska eller algebraiska operationer via instruktioner från ett program, och för att detta skall vara möjligt behöver datorer kunna hantera information. En fundamental skillnad mellan de två datortyperna är just hur information hanteras. Det är denna skillnad som, för vissa typer av operationer, resulterar i kvantdatorns överlägsna effektivitet jämfört med en klassisk dator. Detta behandlas i delavsnitt 2.2.1. Det finns dock svagheter hos kvantdatorer som behöver beaktas. En av dessa är känsligheten för störningar från omgivningen. Medan en klassisk dator är relativt robust i denna bemärkelse kan brus utgöra ett stort problem för kvantdatorer. Hur dessa störningar kan modelleras och tas hänsyn till vid simuleringar beskrivs i delavsnitt 2.2.2.

2.2.1 Informationshantering i datorer

En klassisk dator lagrar information i enheter av en bit, där varje bit kan anta värdet 0 eller 1. Utöver att lagra information behöver denna även kunna manipuleras för att

³Uttrycken i (2.11) respektive (2.12) definierar JW-transformen.

utföra beräkningar, och detta görs möjligt genom så kallade logiska grindar. Klassiska bitar och grindar går att manifestera genom exempelvis spänningsskillnader i elektriska kretsar eller med magneter och magnetfält.

Både bitar och grindar har sina motsvarigheter i den kvantmekaniska datorn. En kvantdator lagrar information i kvantbitar (qubits, eller quantum bits, på engelska). Tillståndsrummet för en kvantbit spänns upp av två basvektorer, $|0\rangle$ och $|1\rangle$, och ett givet tillstånd kan befinna sig i en superposition av dessa. Operationer på kvantbitar utförs med kvantmekaniska logiska grindar. Kvantmekaniska grindar är dock betydligt mer omfattande än klassiska grindar på grund av superpositionsprincipen. Utöver att, likt klassiska grindar, specificera hur en kvantmekanisk grind verkar på två ortogonala tillstånd $|0\rangle$ och $|1\rangle$ behöver också hänsyn tas till verkan på superpositioner av dessa, vilket helt saknar analogi till det klassiska fallet. Matematiskt betecknas tillstånden för kvantbitar som vektorer och grindar som unitära matriser som verkar på tillståndsvektorer. Experimentella manifestationer av kvantbitar och kvantmekaniska grindar ligger utanför ramen av denna studie, men beskrivs bland annat i [9]. Däremot är det viktigt att nämna att kretsar som opererar i den kvantmekaniska regimen är känsliga för störningar [10, 11].

Vidare så kan ett klassiskt tillstånd klonas, eller kopieras, utan inverkan på tillståndet. Detsamma gäller dock inte för kvantmekaniska system, vilket sammanfattas i en sats som på engelska kallas "No-cloning-theorem". För att kopiera ett givet tillstånd behöver tillståndet i fråga avläsas, och detta bryter superpositionen och leder till en så kallad vågfunktionskollaps. Detta innebär en fundamental skillnad mellan lagring av information i klassiska och kvantmekaniska datorer, nämligen att information som representeras av kvantmekaniska tillstånd inte kan klonas, eller med andra ord, säkerhetskopieras [5]. Kombinationen av detta resultat med känsligheten för störningar hos kvantmekaniska kretsar, leder till att brus kan utgöra ett påtagligt problem hos kvantdatorer och bör således tas hänsyn till.

2.2.2 Brus i klassiska respektive kvantmekaniska datorer

För att förklara brus i kvantdatorer inleds detta avsnitt med en kort beskrivning av motsvarande klassiska problem. Ett sätt att manifestera klassiska bitar är med stavmagneter, där orienteringen av syd- respektive nordpol representerar de två möjliga tillstånden. Operationer på bitarna kan åstadkommas genom applicering av magnetfält, vilket resulterar i att biten orienterar sig längs fältets riktning. I ett fullständigt isolerat system kommer biten alltid att kontrolleras helt av systemets magnetfält, men sådana slutna system tenderar att vara idealiserade specialfall. Bitens fysikaliska natur som ett magnetiskt objekt orsakar en potentiell växelverkan med alla yttre magnetfält som kan tänkas existera i dess omgivning. Även om vissa yttre fält kan undvikas återstår exempelvis jordens magnetfält. Precis som datorns fält kunde orientera stavmagneten finns det även en risk för att ett yttre fält orsakar en orientering av biten, varpå avläsningar av bitens information kommer att ge ett felaktigt utfall. Rent kvalitativt kan brus betraktas som ett mått på interaktioner mellan systemet och omvärlden.

Det är inte alltid möjligt att skapa en fullständig fysikalisk beskrivning av de yttre magnetfälten, men med kunskap om hur frekvent felaktiga bitar uppstår kan

bruset förenklat modelleras med en sannolikhet för att en given bit vid följande mätning ger ett inkorrekt utfall. Om störningarna är oberoende av varandra, vilket är ett rimligt antagande i de fall då bitarna är placerade med tillräckligt stort avstånd, kan bruset modelleras som en Markovkedja. Detta kan i sin tur tolkas som applikationen av en grind på ett tillstånd som resulterar i en vändning av tillståndet vilket kan representeras med en matris och en vektor. Med denna tolkning kan bruset simuleras genom att inkludera en viss sannolikhet för att brusgrinden skall verka på tillståndsbiten.

I analogi med det klassiska fallet går det, i de fall då en exakt förklaring av bruset är alltför komplex, att konstruera en stokastisk modell för brus i kvantdatorer. Matematiskt kan detta åstadkommas genom att definiera unitära matriser, vilket alltså motsvarar kvantgrindar, som verkar på tillstånd. Dessa utgörs typiskt av rotationsmatriser med avseende på de definierade koordinataxlarna. Förhållandet mellan operationer, grindar och bitar finns beskrivet i avsnitt 2.2.1, och baserat på detta kan en icke-ideal kvantdator emuleras genom att inkludera sannolikheter för att olika typer av brus påverkar kvantbitarna. På så vis kvantifieras mängden brus med en sannolikhetsparameter som går att variera vid simulering [10, 12].

Programbiblioteken som används för simuleringarna (avsnitt 3.3.1) möjliggör implementation av flera olika typer av brus. De mest grundläggande brusen benämns grindbrus (engelska: gate noise) och mätbrus (engelska: measurement noise). Algoritmerna beskrivs i avsnitt 3.3.2. Här noteras enbart att modellen för båda brustyperna är baserad på sannolikheter för applikation av grindar (matriser) på kvantbitarna (vektorer), i enlighet med vad som beskrivits i detta avsnitt. Bruset kan simuleras genom att dessa sannolikheter implementeras i programmet på den emulerade kvantdatoren.

3

Metod

Här introduceras de metoder som används i studien. Kapitlet inleds genom att en referenslösning bestäms med numeriska metoder på en klassisk dator. Denna referenslösning kommer sedan användas som ett kriterium för att jämföra med resultaten som vi erhåller på den emulerade kvantdatorn. Därefter presenteras VQE-algoritmen och hur den används för simuleringen på den emulerade kvantdatorn — en semiklassisk algoritm som verkar på en vågfunktionsansats för att bestämma grundtillståndsenenergier i kvantsystem. I VQE-algoritmen använder vi antingen ett parametersvep eller en klassisk optimeringsalgoritm för att hitta de variationsparametrar som optimerar i vågfunktionsansatsen. Val av ansats och optimeringsalgoritm diskuteras i avsnitt 3.2. Sist beskrivs programvaran till kvantdatorn samt hur denna implementeras.

3.1 Referenslösning för enelektronsystemet

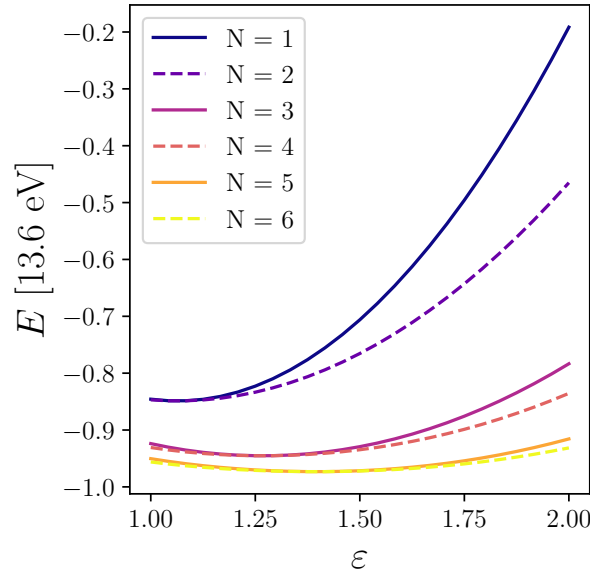
Ett sätt att kvantifiera funktionaliteten hos den emulerade kvantdatorn är genom jämförelse med en referenslösning som bestäms numeriskt på en klassisk dator. Ett rimligt första steg är således att bestämma denna referenslösning genom att numeriskt beräkna grundtillståndsenergin hos enelektronsystemet som beskrivs av Hamiltonianen i ekvation (2.13). Genom att fixera antalet basvektorer N och diagonalisera matrisen vars element ges av $H_{ij}(\varepsilon)$ kan väntevärdet av energin $\langle H_N(\varepsilon) \rangle$ beräknas. I allmänhet garanterar variationsprincipen att

$$E_{\text{gs}} \leq \langle \psi | H_N | \psi \rangle := \langle H_N \rangle, \quad (3.1)$$

där E_{gs} är grundtillståndsenergin, för alla normerade tillstånd $|\psi\rangle$. Speciellt innebär detta att

$$E_{\text{gs}} \leq \min_{\varepsilon, \psi} \langle H_N(\varepsilon) \rangle = \min_{\psi} \langle H_N(\varepsilon_N) \rangle := \langle H_N \rangle_{\text{ref}}, \quad (3.2)$$

där ε_N optimerar Hamiltonianen för ett givet antal basvektorer N . Den bästa uppskattningen för ett givet antal basvektorer N ges av således av $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$. Det minsta väntevärdet av Hamiltonianen som funktion av ε för olika antal basvektorer N visas i figur 3.1.



Figur 3.1: Visualisering av $E = \min_{\psi} \langle H_N(\varepsilon) \rangle$ för olika antal basvektorer N som funktion av den dimensionslösa parametern ε [6].

I tabell 3.1 presenteras de värden på ε som minimerar energin $\langle H_N(\varepsilon) \rangle$ för ett givet antal basvektorer $N = 1, 2, \dots, 6$. Här presenteras också de energier $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$ som svarar mot ett givet ε_N som utgör uppskattningar av grundtillståndsenergin E_{gs} . Dessa energier utgör referenslösningen och jämförs med energierna som räknas ut på kvantdatorn och presenteras i kapitel 4.

Tabell 3.1: Här presenteras den minsta energin $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$ för ett givet N samt tillhörande ε_N .

Antal basvektorer N	1	2	3	4	5	6
Optimerande ε_N	1.06	1.06	1.26	1.26	1.39	1.39
Energi $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$	-0.8488	-0.8488	-0.9453	-0.9453	-0.9732	-0.9732

3.2 VQE

Variational Quantum Eigensolver (VQE) är en kvant-/klassisk hybridalgorithm som kan användas för att bestämma grundtillståndsenergier hos kvantmekaniska system. Den består av en klassisk del och en kvantalgoritm. I den klassiska delen bestäms nya parametrar som returneras till kvantalgoritmen. En kvantalgoritm är en algoritm som utförs på en kvantdator och använder rent kvantmekaniska fenomen som sammanflätning och superposition. VQE-algoritmen består av fyra steg som beskrivs i figur 3.2. De två första stegen utgör kvantrutinen medan steg 3 och 4 utgör den klassiska optimeringsdelen.

1. Preparation av en normerad vågfunktionsansatz $|\psi(\vec{\theta})\rangle$ (ansatz i engelsk text) där $\vec{\theta}$ är en vektor med ett antal variationsparametrar.
2. Evaluering av väntevärdet $\langle H \rangle$ som i vårt fall är en medelvärdesbildning av ett antal mätningar.
3. (a) Vid parametersvep väljs nästa parameter $\vec{\theta}$ ur en lista.
(b) Vid optimering matas $\langle H \rangle$ in till en klassisk optimeringsalgorithm för bestämning av nya parametrar $\vec{\theta}$.
4. Åter till steg 2. Processen upprepas tills dess att den klassiska optimeringsalgoritmen konvergerar.

Figur 3.2: Punktlita över de steg som utgör VQE-algoritmen.

I steg 1 använder vi specifikt två typer av vågfunktionsansatser av olika komplexitet — dessa beskrivs i detalj i nästa delavsnitt. I nästa steg används Hamiltonianen från ekvation (2.13)¹. Val av optimeringsalgorithm till steg 3b diskuteras i delavsnitt 3.2.2.

3.2.1 Vågfunktionsansatser

För att representera enelektronatomen på kvantdatorn behövs en vågfunktionsansatz som går att konstruera med kvantbitar. Specifikt prepareras ett tillstånd där varje ockupationstillstånd i Fockrummet (se avsnitt 2.1) avbildas på en enskild kvantbit. En kvantbit på plats q som befinner sig i tillståndet $|1\rangle$ svarar då mot att partikeln befinner sig på energinivå q i enelektronatomen. Ansatsen definieras som en operator som verkar på ett initialtillstånd $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Initialtillståndet kan exempelvis vara en Hartree-Fock lösning som på en kvantdator kan realiseras genom en kedja med kvantbitar [13]. I vårt fall är initialtillståndet en kedja med N stycken kvantbitar på formen $|1, 0, 0, \dots\rangle$; det vill säga grundtillståndet för den harmoniska oscillatorn, $|100\rangle$.

Small ansatz

En första primitiv ansatz är att rotera den nollte kvantbiten kring x -axeln på Bloch-sfären. I enlighet med Groves dokumentation kallar vi denna vågfunktionsansatz *Small ansatz* [12]. Vår implementation av denna ansatz använder endast en variationsparameter θ och ges på formen

$$|\Psi(\theta)\rangle = \text{RX}(\theta, q_0) |\Psi_{\text{init}}\rangle \quad (3.3)$$

där RX-grinden alltså roterar den nollte kvantbiten q_0 i vårt initialtillstånd kring x -axeln med vinkeln θ . Applikationen av denna grind ändrar sannolikheterna att

¹Notera att Hamiltonianen här är beroende av antal basvektorer N och parametern ε . I det allmänna fallet är ε och N oberoende storheter, men i enlighet med avsnitt 3.1 studeras specifikt det värde på ε som minimerar energin för ett givet antal basvektorer N . Sambandet mellan dimensionen av tillståndsrummet N och värdet på parametern ε presenteras i tabell 3.1.

kvantbiten observeras i något av tillstånden $|1\rangle$ eller $|0\rangle$ då dess projektion på z -axeln förändras. Detta i sin tur förändrar sannolikheten för att energinivån är ockuperad, och således även energin $\langle H \rangle = \langle \Psi(\theta) | H | \Psi(\theta) \rangle$. Denna vågfunktionsansats är dessutom unitär, vilket gör att den trots sin enkelhet går att använda som ansats i VQE-algoritmen för att hitta det θ som ger det minsta energieigenvärdet.

Vidare går det att göra mer sofistikerade ansatser som använder fler kvantgrindar. En sådan vågfunktionsansats, som i simuleringen jämförs med Small ansatz, är en UCC-ansats som beskrivs i detalj i nästa avsnitt.

UCC-ansats

Vågfunktionsansatsen som baseras på metoden *Unitary Coupled-Cluster* (UCC) är en unitär utveckling av Coupled Cluster-ansatsen (CC).² UCC-ansatsen är en numerisk teknik för att beskriva flerkroppssystem som kan representeras med kvantbitar där enelektronatomen utgör ett specialfall [14]. Generellt ges ansatsen av uttrycket [15]

$$|\Psi\rangle = e^{T-T^\dagger} |\Psi_{\text{init}}\rangle, \quad (3.4)$$

där T är en excitationoperator, $T^\dagger$ är en deexcitationoperator och $|\Psi_{\text{init}}\rangle$ är vårt initialtillstånd. Operatoren T kan uttryckas genom andrakvantisering (se avsnitt 2.1) som

$$T = \sum_{i,\alpha} t_\alpha^i a_\alpha^\dagger a_i, \quad (3.5)$$

där i är alla ockuperade tillstånd (vilket i vårt fall alltid kommer vara endast ett tillstånd), α är icke-ockuperade tillstånd, t_α^i utgör variationsparametrar, medan $a^\dagger$ och a är krelations- respektive annihilationsoperatorer som beskrivs i avsnitt 2.1 [15]. Med exempelvis $N = 3$ basvektorer i ansatsen blir

$$T - T^\dagger = t_1^0 (a_1^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_1) + t_2^0 (a_2^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_2), \quad (3.6)$$

där t_1^0 och t_2^0 är två variationsparametrar.

På grund av de icke-kommuterande operatorerna i (3.6) används ofta Trotterapproximationen,

$$e^{T-T^\dagger} \approx \left(\prod_{i,\alpha} e^{\frac{t_\alpha^i}{\rho} (a_\alpha^\dagger a_i - a_i^\dagger a_\alpha)} \right)^\rho, \quad (3.7)$$

för att förenkla UCC-ansatsen [13, 10]. Generellt gäller att $e^{\sum_i T_i} \neq \prod_i e^{T_i}$ för operatorer. I (3.7) är ρ Trottertalet som är relaterat till noggrannheten hos approximationen — i detta arbete begränsar vi oss till $\rho = 1$. Slutligen appliceras JW-transformationen enligt 2.1.2 på UCC-ansatsen. Implementationen av denna vågfunktionsansats i Python beskrivs i detalj i avsnitt 3.3.

²Ansatsen CC används frekvent inom kvantkemi [14].

3.2.2 Klassiska optimeringsalgoritmer

I det här avsnittet presenteras de optimeringsalgoritmer vi använder i VQE-algoritmen. Låt oss först göra en observation som förenklar våra beräkningar, nämligen att vår representation av Hamiltonianen är helt reell. Detta är en konsekvens av att uttrycket för matriselementen i H (se (2.9)) är reella. Matrisen H är alltså inte bara Hermiteisk, utan även symmetrisk. Därför räcker det med att vi endast letar efter det reella egentillstånd som minimerar energin $\langle H \rangle$. Påståendet att reella symmetriska matriser har reella egenvektorer formuleras som en sats och bevisas i appendix C. Fördelen med observationen är att antalet parametrar att minimera $\langle H \rangle$ med avseende på halveras eftersom vi endast behöver leta efter det optimala tillståndet i $\mathbb{R}^N$ istället för $\mathbb{C}^N \sim \mathbb{R}^{2N}$.

Gällande optimeringsalgoritmer undersökte vi två olika sådana — Nelder-Mead [16] samt COBYLA [17], vilka båda är simplex-baserade metoder som används för att optimera icke-konvexa icke- C^1 -funktioner. För de resultat som presenteras i kapitel 4.2 användes COBYLA samt parametersvep. Vi valde COBYLA över den liknande metoden Nelder-Mead av flera anledningar. Dels så hade Nelder-Mead stora problem med att hantera en stokastisk objektsfunktion, och dels så fanns en större möjlighet till att finjustera inställningarna för metoden i paketet `scipy.optimize.minimize`. Valet av COBYLA över Nelder-Mead baseras även på det faktum att en tidigare studie [13] fann att COBYLA presterade avsevärt bättre än Nelder-Mead när metoderna jämfördes i kontexten att minimera en molekylär Hamiltonian med avseende på en UCC-ansats.

Vid optimeringen behövdes en första gissning till grundtillståndet. Här använde vi vårt initialtillstånd $|\Psi_{\text{init}}\rangle$, den harmoniska oscillatorns grundtillstånd. Detta tillstånd svarar mot $\vec{\theta} = \vec{0}$. Motivationen bakom gissningen kommer från att potentialerna både för enelektronatomen och den harmoniska oscillatorn är radiellt symmetriska samt ökar med r .

3.2.3 Parametersvep

I figur 3.2 beskrivs utöver optimeringsmetoderna även ett parametersvep. Här väljs alltså $\vec{\theta}$ från en lista istället för att parametrarna optimeras med en algoritm. På så sätt kan $\langle H_N \rangle$ bestämmas för ett diskret antal värden på $\vec{\theta}$, varefter ett minimum kan extraheras och jämföras med $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$ i tabell 3.1.

För att kvantitativt jämföra parametersvep med optimering i avsnitt 4.2 väljer vi dessutom att applicera ett Gaussiskt filter på de uppmätta värdena $\langle H_N \rangle$. Det är sedan minimum i den filtrerade datan som jämförs med $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$.

3.3 Simulering på kvantdatorn

I detta avsnitt beskrivs hela processen för att utföra simuleringen på den emulerade kvantdatorn. Initialt beskrivs de program som användes och därefter förklaras programmeringsprocessen; denna inleds med implementationen av Small ansatz och UCC-ansatsen, samt testkörningar på dessa. Dessutom beskrivs implementationen

av Hamiltonianen för enelektronatomen och slutligen beskrivs hur dess väntevärden beräknas på kvantdatorn för olika antal basvektorer N .

3.3.1 Pythonbibliotek

Den emulerade kvantdatorn konstruerades med hjälp av Rigettis Forest-paket [18]. Detta paket innehåller Rigettis QVM (Quantum Virtual Machine) vilket är en programmerbar simulator av en QAM (Quantum Abstract Machine), vilket i sin tur kan beskrivas som en teoretisk kvantdator som kan köra både klassik och kvantmekanisk programvara. QVM kan även använda modeller för att emulerade nutidens brusiga kvantdatorer. I Forest-paketet ingår även programmeringsspråket Quil (Quantum Instruction Language) som Rigetti utvecklat för att köras på allmänna QAM, en kompilator för Quil som kallas för QuilC samt biblioteket pyQuil som översätter Pythonkod till Quil [18, 19].

Paketet Grove är också utvecklat av Rigetti och innehåller en mängd kvant-algoritmer skrivna för att användas tillsammans med Rigettis Forest-paket med hjälp av pyQuil. Detta paket innehåller VQE-algoritmen som simuleringarna baseras på.

Vidare använde vi paketet OpenFermion [20] som har utvecklats för att förenkla implementeringen av kvantsimuleringar skrivna i Python. Paketet innehåller stöd för att skriva vanligt förekommande operatorer och funktioner, exempelvis fermionska kreations- och annihilationsoperatorer. Paketet är tänkt att kunna användas oberoende av vilken typ av kvantdator som används och lämnar kompileringen till andra program. Istället finns det plug-ins för olika utvecklare att använda för att generera av kvantdatorkompatibel kod, till exempel pyQuil [18]. Vi använde främst OpenFermion för att implementera UCC-ansatsen och Hamiltonianen för enelektronsystemet.

Utöver de ovan nämnda paketen och biblioteken användes även en mängd andra verktygspaket såsom exempelvis NumPy och Matplotlib för att kunna utföra beräkningar och plotta grafer.

3.3.2 Programmering på kvantdatorn

Den första programmeringen vi gjorde på Rigettis emulerade kvantdator var att implementera Small ansatz för att använda i VQE enligt Groves dokumentation. I figur 3.3 presenteras koden för detta [12]. Typen 'Program' i figur 3.3 innehåller de kvantgrindar vi opererar med på vårt initialtillstånd. Innan Hamiltonianen implementerades på kvantdatorn utförde vi testmätningar på vågfunktionsansatserna med observabeln $Z(0)$ — det vill säga Paulimatrisen som mäter den nollte kvant-bitens spinn vars väntevärde kan bli 1 eller -1. För att mäta väntevärdet av denna observabel använde vi funktionen `vqe_inst.expectation()` med koden som visas i figur 3.4.

Notera i figur 3.4 att parametern `nbrSamples` i `vqe_inst.expectation()` står för antalet mätningar som VQE-algoritmen använder för att mäta väntevärdet. Om parametern sätts till ett fixt antal n skattas väntevärdet med ett medelvärde av n mätningar och om parametern `nbrSamples` sätts till `None` erhålls det *sanna väntevärdet*. Detta svarar mot att man gör oändligt många mätningar, alltså fallet

```
from pyquil.quil import Program
import pyquil.api as api
from pyquil.gates import *
qvm = api.QVMConnection()

def small_ansatz(theta):
    program = Program(X(0)) # Initiate qubit 0 to state |1>
    program += Program(RX(theta, 0)) # Rotate zeroth qubit
    return program
```

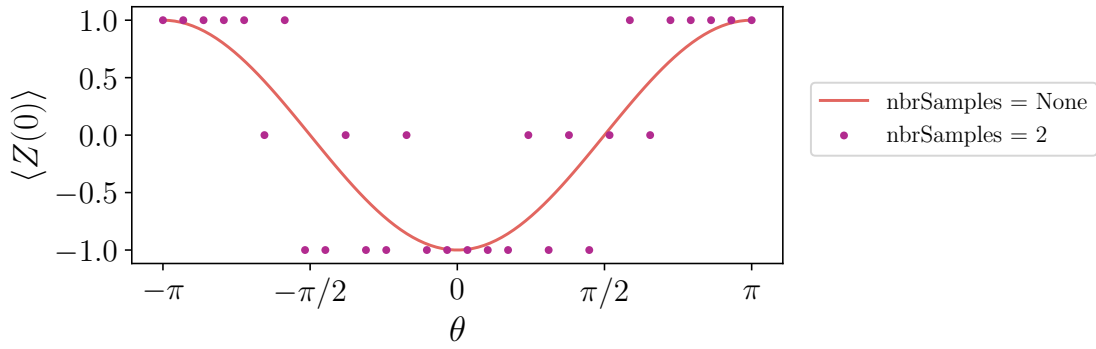
Figur 3.3: Pythonkod för att implementera Small ansatz som ett program i pyQuil.

```
from pyquil.paulis import sZ
from grove.pyvqe.vqe import VQE
from scipy.optimize import minimize
import numpy as np

observable = sZ(0)
vqe_inst = VQE()

expected_value = vqe_inst.expectation(small_ansatz(theta), observable,
                                      nbrSamples = None, qvm)
```

Figur 3.4: Pythonkod för att mäta Paulimatrisen Z på den nollte kvantbiten för ett godtyckligt värde på rotationsparametern θ i Small ansatz. Resultatet sparas i variabeln `expected_value`.



Figur 3.5: Mätningar av $Z(0)$ på Small ansatz, dvs mätning på endast en kvantbit. Det sanna väntevärdet (med `nbrSamples=None`) visas som en heldragen linje och medelvärde av två mätningar av $Z(0)$ på samma intervall visas med punkter.

$n \rightarrow \infty$. För att illustrera detta initierade vi en enda kvantbit i superposition och plottade det sanna väntevärdet samt det uppmätta väntevärdet för `nbrSamples=2`, se figur 3.5. Eftersom två mätningar utfördes kunde medelvärde vara antingen 1, 0, eller -1, då resultatet av mätningen kan resultera i antingen $|\uparrow\rangle$ eller $|\downarrow\rangle$, vilket också är vad figuren visar.

Implementation av UCC för $N=2$ och $N=3$

Enligt (3.5) i teoriavsnittet om UCC-ansatsen får vi för $N = 2$ vågfunktionen

$$|\Psi(\theta)\rangle = e^T |\Psi_{\text{init}}\rangle = e^{\theta(a_1^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_1)} |\Psi_{\text{init}}\rangle = e^{i(\theta/2)(X_0 Y_1 - X_1 Y_0)} |\Psi_{\text{init}}\rangle, \quad (3.8)$$

där θ är vår variationsparameter som svarar mot t_1^0 i ekvation (3.6) och $|\Psi_{\text{init}}\rangle = |1, 0, 0, \dots\rangle$. För $N = 3$ blir vågfunktionen (som nu beror på en extra parameter, $t_2^0 := \eta$ i ekvation (3.6))

$$\begin{aligned} |\Psi(\theta, \eta)\rangle &= e^{T-T^\dagger} |\Psi_{\text{init}}\rangle = e^{\theta(a_1^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_1) + \eta(a_2^\dagger a_0 - a_0^\dagger a_2)} |\Psi_{\text{init}}\rangle \\ &\approx e^{i(\theta/2)(X_0 Y_1 - X_1 Y_0)} e^{i(\eta/2)(X_0 Z_1 Y_2 - X_2 Z_1 Y_0)} |\Psi_{\text{init}}\rangle, \end{aligned} \quad (3.9)$$

där vi i det sista steget har använt Trotterapproximationen av ordning $\rho = 1$. På kvantdatorn representerades Fockrummet genom att initiera N antal kvantbitar motsvarande antal energinivåer tillgängliga i systemet. För att skapa initialståndet $|1, 0, 0, \dots\rangle$ placerades kvantbit 0 i tillståndet $|1\rangle$ enligt `program = Program(X[0])`.

Vågfunktionsansatsen som applicerar de exponentierade excitationoperatorerna i (3.8) implementerades med biblioteken OpenFermion och pyQuil. Först definierades excitationsparametrarna med `FermionOperator()` enligt koden i figur 3.6.

Därefter användes OpenFermions funktion `T = jordan_wigner(T_tot)` och till sist skrevs operatorerna om till Paulimatriser i pyQuil-format med funktionen

`T_pauli = qubitop_topyquilpauli(T)`. Sedan kunde vi utföra Trotterapproximationen för $N = 2$ på Fockrummet med funktionen `trotterize` enligt

`program += trotterize(T_pauli[0], T_pauli[1])`. För $N = 3$ utökade vi programmet med ytterligare en `trotterize` för Paulitermerna $X_0 Z_1 Y_2$ och $-X_2 Z_1 Y_0$.

```

from openfermion.ops import FermionOperator
T = FermionOperator('0^ 1')
T_dag = FermionOperator('1^ 0')
T_tot = T - T_dag

```

Figur 3.6: Excitationsoperatorerna T och $T^\dagger$ från (3.8) i Pythonkod.

```

X 0
H 0
RX(pi/2) 1
CNOT 0 1
RZ(theta) 1
CNOT 0 1
H 0
RX(-pi/2) 1
RX(pi/2) 0
H 1
CNOT 0 1
RZ(-theta) 1
CNOT 0 1
RX(-pi/2) 0
H 1

```

Figur 3.7: De grindar som utgör UCC för $N = 2$ basvektorer samt vilka kvantbitar de verkar på. Grindarna appliceras på initialtillståndet $|\Psi_{\text{init}}\rangle$ uppifrån och ned. Pauli-X grinden växlar tillståndet för kvantbiten från $|0\rangle$ till $|1\rangle$, och vice versa, genom att rotera en kvantbit med π radianer kring x -axeln på Blochsfären, CNOT-grinden sammanflätar två kvantbitar, RX- och RZ-grindarna roterar kvantbitens tillstånd med en angiven vinkel kring Blochsfären, och H beskriver Hadamardgrinden (för mer info se exempelvis [10]).

För $N = 2$ visas programutskriften för UCC-ansatsen i figur 3.7 och vi noterar i denna att det behövs betydligt fler kvantgrindar i denna ansats än för Small ansatz.

På samma sätt som i figur 3.5 mätte vi $Z(0)$ för UCC-ansatsen för att jämföra med Small ansatz. Uppmätta värden för respektive vågfunktion med `nbrSamples=20` visas i figur 3.9 och vi ser att väntevärdet $\langle \Psi(\theta) | Z | \Psi(\theta) \rangle$ är periodiskt för båda ansatserna. Detta kan relateras till att θ motsvarar en rotationsvinkel för respektive vågfunktion.

Implementation av Hamiltonian uttryckt i Paulitermer

Här beskrivs implementationen av Hamiltonianen från kapitel 3.1 i termer av Paulimatriser enligt ekvationerna (2.5), (2.11) och (2.12).

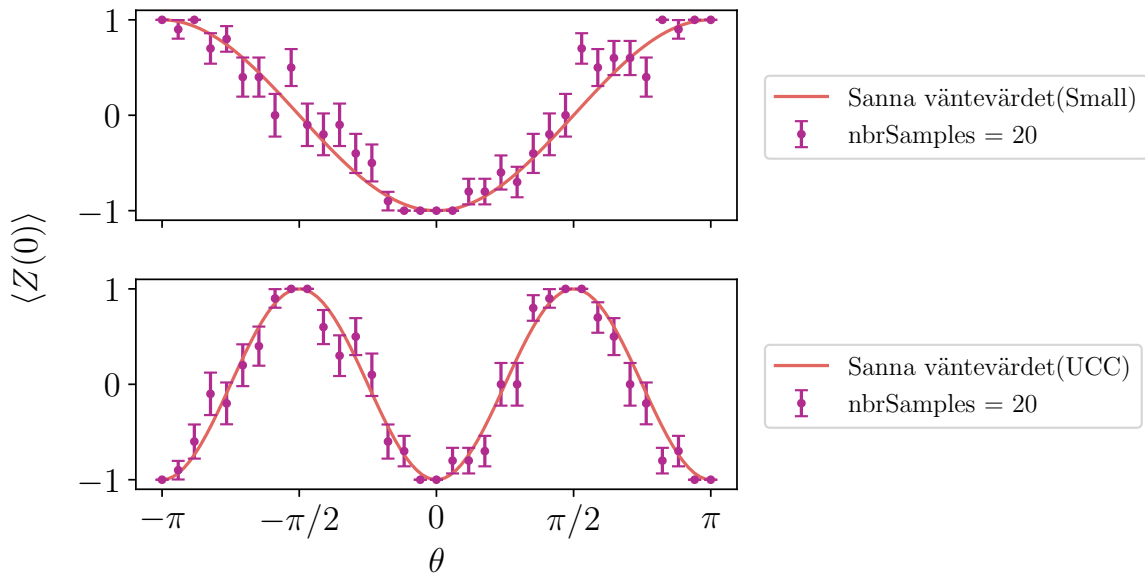
Koden för att implementera Hamiltonianen utfördes på samma sätt som för transformationen av excitationsoperatorerna i avsnitt (3.3.2) enligt

```

H 0
RX(pi/2) 2
CNOT 0 1
CNOT 1 2
RZ(eta) 2
CNOT 1 2
CNOT 0 1
H 0
RX(-pi/2) 2
RX(pi/2) 0
H 2
CNOT 0 1
CNOT 1 2
RZ(-eta) 2
CNOT 1 2
CNOT 0 1
RX(-pi/2) 0
H 2

```

Figur 3.8: De extra grindar (utöver alla kvantgrindar i figur 3.7) som utgör UCC för $N = 3$ jämfört med UCC för $N = 2$. Grindarna appliceras på initialtillståndet $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Kvantgrindarnas beskrivning ges i figur 3.7.



Figur 3.9: Uppmätta värden för Paulimatrisen Z på den nollte kvantbiten för två olika vågfunktionsansatser (Small ansatz överst och UCC underst) med variansen i mätvärdet utmärkt kring varje punkt. Väntevärdet för respektive mätning visas som en heldragen kurva i bakgrunden.

`H_JW = jordan_wigner(H)`, där H är en matrisrepresentation av Hamiltonianen uttryckt i fermioniska operatorer med funktionen `FermionOperator()` som visats tidigare. Till sist utförs transformationen till pyQuil-språk med `H_Pauli = qubitop_topyquilpauli(H_JW)`. Resultatet för mätningarna av väntevärdet på Hamiltonianen presenteras i kapitel 4.

Simulering av system med brus

Rigettis QVM har stöd för att inkludera flera typer av brus, se avsnitt 2.2.2. I QVM införs ett parametriskt grindbrus i termer av tre parametrar (P_X, P_Y, P_Z), där dessa är sannolikheterna för att en X-, Y- respektive Z-grind (se figurtext till figur 3.7 — Y- och Z-grinden fungerar analogt med X-grinden) appliceras på varje kvantbit efter varje grindapplicering. För mätbrus införs på samma sätt de tre parametrarna (P'_X, P'_Y, P'_Z). Dessa motsvarar sannolikheter för applikation av motsvarande grind på en kvantbit innan bitens värde mäts upp.

I Rigettis emulator initieras kvantdatorer med brus genom att mata in argument i kommandot `api.QVMConnection()`. För att inkludera (P_X, P_Y, P_Z) = (0.1, 0.1, 0.1) och (P'_X, P'_Y, P'_Z) = (0.2, 0.2, 0.2) modifieras tidigare koder (exempelvis de i avsnitt 3.3) till att initieras enligt koden 3.10.

```
import pyquil.api as api
from pyquil.gates import *

qvm=api.QVMConnection()

gate_probs = [0.1, 0.1, 0.1]
meas_probs = [0.2, 0.2, 0.2]
noisy_qvm =
    qvm(gate_noise=gate_probs, measurement_noise=meas_probs)
```

Figur 3.10: Pythonkod för att starta upp en QVM med 10 % grindbrus och 20 % mätbrus för vardera av X-, Y- och Z-grindarna.

Med modifikationer av denna typ kan optimering utföras som i fallet utan brus. Vi utnyttjade bland annat detta för att beräkna egenvärden som funktion av de två brusnivåerna.

4

Resultat och Diskussion

I detta kapitel presenteras mätningarna av energin för enelektronatomen på den emulerade kvantdatorn. I första avsnittet jämförs Small ansatz med UCC-ansatsen utifrån den grundtillståndsenergi som respektive ansatz genererar vid användning av VQE med parametersvep. Vidare visar vi här att Small ansatz saknar vissa egenskaper vi förväntar oss av en variationsansatz. I nästa avsnitt jämförs ett filtrerat parametersvep med optimeringsalgoritmen COBYLA specifikt på UCC-ansatsen. Vi finner att optimeringsalgoritmen presterar bättre än parametersvepet, trots att vårt bästa optimeringsresultat är en faktor 10 från kemisk precision. I det sista avsnittet visar vi hur olika typer av brus påverkar den uppmätta grundtillståndsenergi för de båda ansatserna.

4.1 Jämförelse mellan ansatser för parametersvep

Det här avsnittet består av tre delar där vi jämför olika aspekter av UCC med Small ansatz. Avsnittet inleds med en grundläggande analys med parametersvep på UCC och Small ansatz i fallen $N = 2$ och $N = 3$ basvektorer. I de två resterande avsnitten görs en mer djupgående analys av beteendet hos de två ansatserna.

Grundläggande jämförelse av ansatserna

I figur 4.1 visas resultatet från ett parametersvep i två dimensioner och jämförs med referensvärdet $\langle H_2 \rangle_{\text{ref}}$ från tabell 3.1. I figuren är de utritade punkterna medelvärden av 20 mätningar för respektive värde på variationsparametern θ , och den heldragna kurvan representerar det sanna väntevärdet, alltså då $n \rightarrow \infty$. Här noterar vi att båda ansatserna är periodiska på intervallet $\theta \in [-\pi, \pi]$, vilket var förväntat enligt metodavsnittet. Speciellt noterar vi också att för $N = 2$ basvektorer hittar båda ansatserna det minsta egenvärdet.

Vi kan också svepa över parametern θ för Small ansatz med $N = 3$ basvektorer, vilket visas i figur 4.3. Här noterar vi att det sanna väntevärdet $\langle H_N \rangle$ *inte* hittar referensvärdet $\langle H_3 \rangle_{\text{ref}}$ vilket visar att Small ansatz lämpar sig sämre för $N = 3$ basvektorer. Det faktum att vår version av Small ansatz endast verkar på första kvantbiten antyder att den även förblir ett sämre alternativ till UCC för $N > 3$. Specifikt för parametersvep med $N = 3$ basvektorer uppmäts däremot med UCC-ansatsen energin $\langle H_3 \rangle \approx \langle H_3 \rangle_{\text{ref}}$ (med en avvikelse på ca 0.1 %) — detta på grund av möjligheten att svepa över två parametrar. Sammantaget indikerar vår inledande analys att UCC-ansatsen är att föredra för mätningar av $\langle H_N \rangle$ då $N > 2$. Vidare

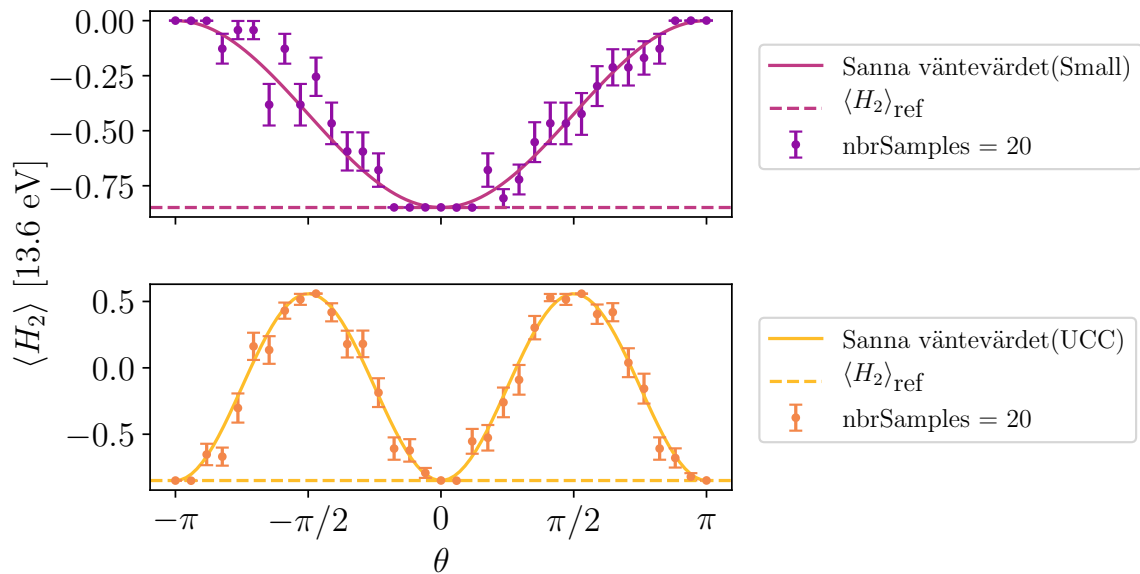


Figure 4.1: Uppmätta värden för $\langle H_2 \rangle$ med 20 mätningar per punkt för två olika vågfunktionsansatser med variansen i medelvärdet av mätningarna utmarkerat kring varje punkt. Det sanna väntevärdet visas som en heldragen kurva i bakgrunden. Det minsta egenvärdet för $N = 2$ från tabell 3.1 visas med en streckad linje.

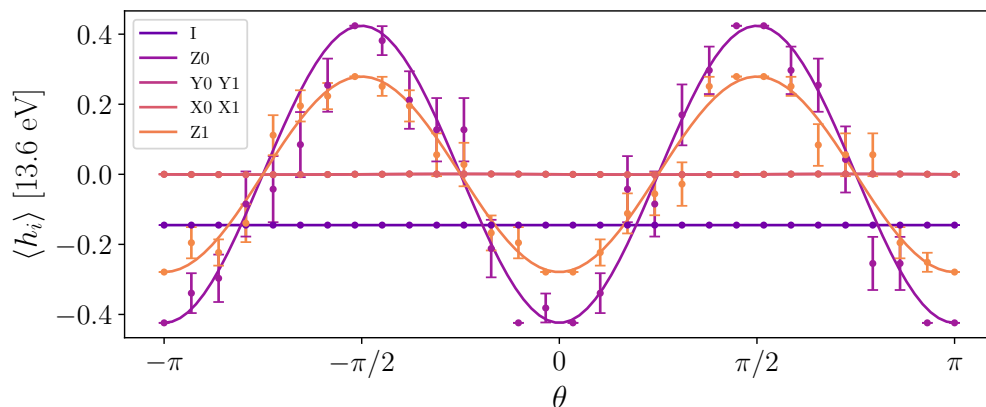
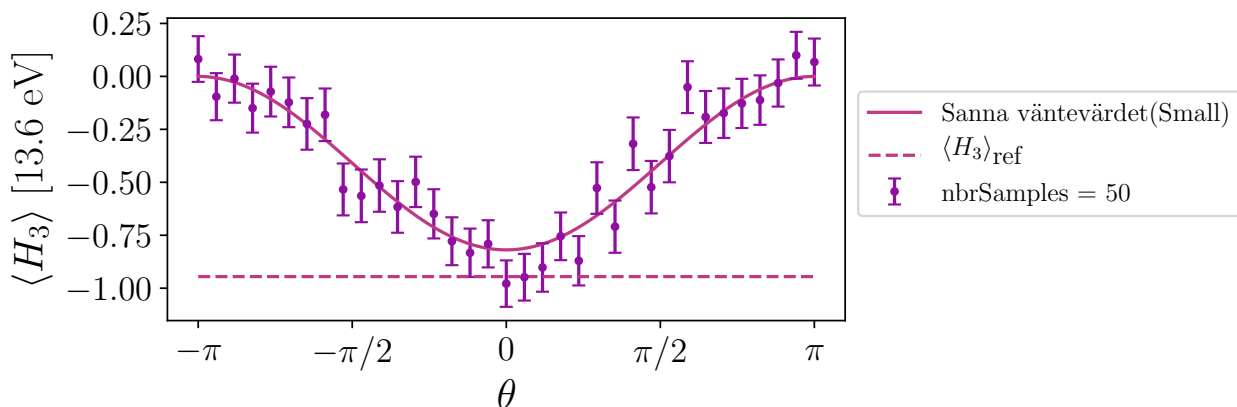


Figure 4.2: Uppmätta värden för de fem viktade termerna $\langle h_i^{N=2} \rangle$ i Hamiltonianen för $N = 2$ basvektorer i UCC-ansatsen med 20 mätningar per värde. Variansen av medelvärdet är utmärkt kring varje punkt. De faktiska väntevärdena för varje term visas som heldragna linjer.



Figur 4.3: Uppmätta värden för $\langle H_3 \rangle$ med 20 mätningar per punkt för Small ansatz med variansen i mätvärdet utmärkt kring varje punkt. Det sanna väntevärdet visas som en heldragen kurva i bakgrunden. Det minsta egenvärdet för $N = 3$ från tabell 3.1 visas med en streckad linje.

antyder resultaten att en parameter är otillräcklig för godtyckligt antal basvektorer N ; detta gör att Small ansatz med en parameter är naiv i förhållande till UCC.

Analys av variansen för $N = 2$

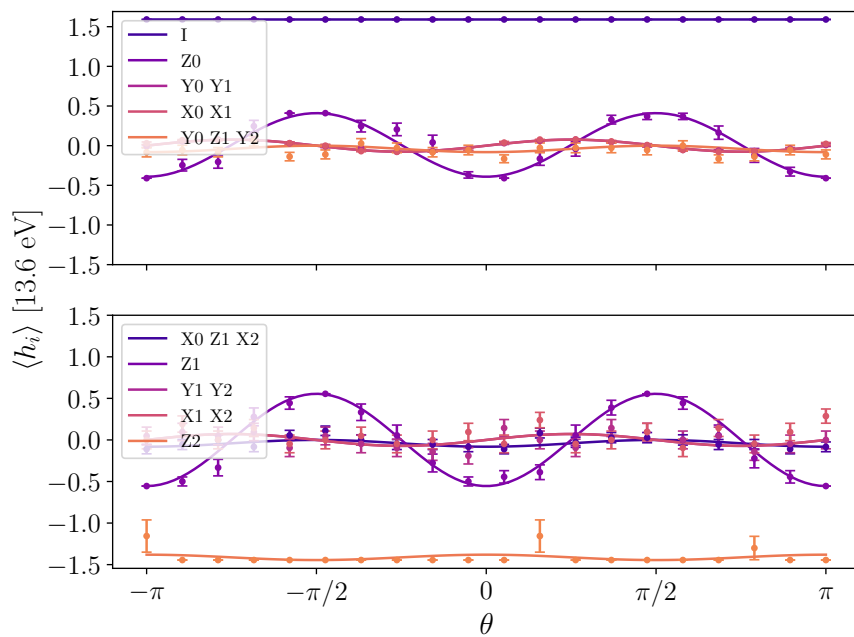
Vi noterar även i figur 4.1 att variansen går mot noll vid kurvornas extreman för $N = 2$. Detta är en effekt av att H_2 :s termer är simultant diagonaliserbara och således har en gemensam egenvektorbas. Detta beror på en fundamental skillnad mellan det fysiska kvantsystemet och simuleringen på kvantdatorn. I den senare utförs mätningarna termvis — om tillståndet $|\psi\rangle$ är ett egentillstånd till H är det då även ett egentillstånd till varje term h_i var för sig. En mätning av H svarar då mot att mäta termerna h_i var för sig och summera resultaten.

När vi plottar väntevärdet av de enskilda termerna i Hamiltonianen för t.ex. UCC-ansatsen, se figur 4.2, observerar vi att extrempunkterna för termerna sammanfaller. Detta är en effekt av att termerna är simultant diagonaliserbara. Däremot är termerna för $N = 3$, i figur 4.4, fasförskjutna och därför *ej* simultant diagonaliserbara. Eftersom vi endast kan beräkna variansen termvis kan då summan av varianserna vara nollskild även om $|\psi\rangle$ är ett egentillstånd till H . Således är det inte garanterat att entydigt mäta upp motsvarande egenvärde till $|\psi\rangle$ trots att $|\psi\rangle$ är ett egentillstånd till H .

Diskussion om Small ansatz

I detta stycke diskuterar vi varför Small ansatz inte nödvändigtvis är fysikaliskt motiverad. Detta baseras på att Small ansatz, i figur 4.1, hittar ett egenvärde 0 som inte UCC hittar.

Vår matrisrepresentation H_N gäller specifikt för *en* elektron. Andrakvantisering av Hamiltonianen förflyttar oss dock till ett större tillståndsrum som även tillåter flerpartikeltillstånd. Vi kan fylla på systemet med elektroner med hjälp av



Figur 4.4: Uppmätta värden för de tio viktade termerna $\langle h_i^{N=3} \rangle$ för Hamiltonianen med $N = 3$ basvektorer i UCC-ansatsen med 20 mätningar per värde för $\eta = 0.15$. Variansen i mätvärdet är utmärkt kring varje punkt. De faktiska väntevärdena för varje term visas som heldragna linjer. Observera att termerna har placerats i två paneler för synbarhets skull.

skapelseoperatorerna, genom exempelvis $a_1^\dagger |1, 0\rangle = |1, 1\rangle$. Detta nya tillstånd är ett egentillstånd till den andrakvantiserade Hamiltonianen, och om $|1, 0\rangle$ har egenvärde λ_0 , samt $|0, 1\rangle$ egenvärde λ_1 , har $|1, 1\rangle$ egenvärde $\lambda_0 + \lambda_1$.

Både UCC och Small ansatz definieras i termer av operatorer som verkar på ett initialtillstånd $|\Psi_{\text{init}}\rangle = e^{T-T^\dagger}$ för UCC och $RX(\theta)$ för Small ansatz. För att hitta energiminima till enpartikeltillstånden behöver operatoren som definierar vår ansatz bevara antalet partiklar. UCC-ansatsens operator har denna egenskap då den är definierad i termer av kreations- och förintelseoperatorer som förekommer parvis:

$$T = \theta a_1^\dagger a_0 + \eta a_2^\dagger a_0 + \dots$$

Small ansatz är definierad i termer av kvantgrindar och har inte nödvändigtvis denna egenskap. Till exempel, som vi såg i figur 4.1 är 0 ett egenvärde, vilket inte observeras med UCC. Detta egenvärde svarar mot tillståndet $|0, 0\rangle$, som enelektronatomen inte kan befinna sig i.

Sammantaget konstaterar vi att Small ansatz inte lämpar sig väl för vårt fysikaliska problem, varför vi härnäst begränsar oss till de följande studierna av parametersvep jämfört med en optimeringsalgoritm i VQE. Däremot återkommer Small ansatz i brusundersökningen, dock enbart som jämförelse med UCC, för att studera hur antalet grindar i en vågfunktionsansatz påverkar dess känslighet för grind- och mätbrus.

4.2 Jämförelse mellan parametersvep och optimering för UCC

I detta avsnitt jämför vi parametersvep med de optimeringsalgoritmer som beskrivs i avsnitt 3.2.2. Metoderna applicerades på en representation av Hamiltonianen H_N med $N = 2, \dots, 5$. Med syftet att undersöka hur robusta de två metoderna är utför vi fem identiska körningar av de båda metoderna. Våra resultat pekar på att optimeringsmetoden presterar bättre än parametersvep, men fler parametrar gör optimeringsmetoden betydligt mindre robust. Det är alltså inte nödvändigtvis gynnsamt att öka antalet basvektorer N eftersom optimeringsproblemet blir för komplext.

Tabellerna i detta avsnitt visar resultaten från ett antal körningar med UCC som ansatz. Gemensamt för dessa tabeller är att *antal mätningar* avser totala antalet mätningar av H_N och $\theta, \eta, \alpha, \beta$ avser variationsparametrarna i ansatsen

$$|\Psi\rangle = e^{\theta(a_0^\dagger a_1 - \theta a_1^\dagger a_0) + \eta(a_0^\dagger a_2 - \theta a_2^\dagger a_0) + \dots} |\Psi_{\text{init}}\rangle.$$

Tid avser beräkningstiden (beräkningstiderna är jämförbara då alla beräkningar utförts på samma processor).

Resultaten från parametersvepen är avlästa från en Gaussisk filtrering av den uppmätta datan. På grund av mätningarnas stokastiska natur kan denna avsläsning returnera ett värde som ligger under $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$. Resultatet från optimeringen är ett medelvärde av ett mycket stort antal mätningar i en punkt och kommer därför inte returnera ett värde som ligger under. Tabell 4.1-4.4 visar resultaten från $N = 2, 3$.

Tabell 4.1: Resultat av svepning av H_2 (1 parameter). Jämför med det faktiska minimat, -0.8488. Intervallet $[-\pi, \pi]$ delades in i 10 punkter. I varje punkt utfördes 100 mätningar.

$\langle H_2 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	Tid
-0.8489	1 000	-0.1745	0.626 s
-0.8486	1 000	0.1745	0.525 s
-0.8403	1 000	-0.1745	0.547 s
-0.8487	1 000	-0.1745	0.515 s
-0.8403	1 000	-0.1745	0.530 s

Tabell 4.2: Resultat av optimering av H_2 (1 parameter) där gissningen till grundtillståndet är $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Jämför med det faktiska minimat, -0.8488.

$\langle H_2 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	Tid
-0.8481	11 000	-0.0568	6.03 s
-0.8487	10 000	-0.0212	5.54 s
-0.8474	11 000	0.0825	5.86 s
-0.8477	11 000	0.0725	6.07 s
-0.8488	10 000	-0.0100	5.69 s

Tabell 4.3: Resultat av svepning av H_3 (2 parametrar). Jämför med det faktiska minimat, -0.9453. Intervallet $[-\pi, \pi]^2$ delades in i 100 punkter. I varje punkt utfördes 100 mätningar.

$\langle H_3 \rangle$ [13.6 eV]	antal mätningar	θ	η	Tid
-0.9687	10 000	0.1745	-0.1745	26.6 s
-0.9704	10 000	0.1745	-0.1745	27.0 s
-1.0822	10 000	0.1745	-0.1745	27.0 s
-0.8818	10 000	0.1745	-0.1745	26.4 s
-0.9207	10 000	0.1745	-0.1745	27.3 s

Tabell 4.4: Resultat av optimering av H_3 (2 parametrar) där gissningen till grundtillståndet är $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Jämför med det faktiska minimat, -0.9453.

$\langle H_3 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	η	Tid
-0.9258	23 000	0.2135	-0.1362	51.7 s
-0.9347	26 000	0.2157	-0.2285	64.0 s
-0.9318	26 000	0.2088	-0.2416	57.6 s
-0.9451	27 000	0.1605	-0.1884	60.3 s
-0.9270	22 000	0.2272	-0.1503	48.7 s

En omedelbar observation är att både $\langle H_2 \rangle$ och $\langle H_3 \rangle$ i tabell 4.1-4.4 ligger nära $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$. För $N = 2$, i tabell 4.1 och 4.2, är exaktheten av ordning ~ 0.01 för svepningen, och ordning ~ 0.001 för optimeringen. Utöver att optimeringen är en

faktor 10 exaktare än svepningen ser vi att svepningen är en faktor 10 snabbare än optimeringen. Vidare, för $N = 3$, i tabell 4.3 och 4.4, är exaktheten av ordning ~ 0.1 för svepningen, och ordning ~ 0.01 för optimeringen. Dock är svepningen här endast en faktor 2 snabbare än optimeringen. Detta motiverar en jämförelse av svep och optimering för större antal basvektorer. Resultatet från denna undersökning visas i tabell 4.5-4.8.

Tabell 4.5: Resultat av svepning av H_4 (3 parametrar). Jämför med det faktiska minimat, -0.9453 . Intervallet $[-\pi, \pi]^3$ delades in i 1 000 punkter. I varje punkt utfördes 100 mätningar.

$\langle H_4 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	η	α	Tid
-0.9461	100 000	0.5236	-0.5236	0.1745	N/A
-1.0301	100 000	0.1745	-0.1745	0.1745	N/A
-1.1041	100 000	-0.1745	0.1745	-0.1745	878 s
-0.9132	100 000	0.1745	-0.1745	-0.1745	842 s
-0.9062	100 000	0.1745	-0.1745	-0.1745	825 s

Tabell 4.6: Resultat av optimering av H_4 (3 parametrar) där gissningen till grundtillståndet är $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Jämför med det faktiska minimat, -0.9453 .

$\langle H_4 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	η	α	Tid
-0.9446	155 000	0.1511	-0.1763	0.0074	785 s
-0.9303	140 000	0.1577	-0.1782	-0.0549	702 s
-0.9257	165 000	0.1196	-0.2275	-0.0239	846 s
-0.9420	155 000	0.1576	-0.1922	-0.0206	785 s
-0.9291	170 000	0.05766	-0.1459	-0.0302	868 s

Tabell 4.7: Resultat av svepning av H_5 (4 parametrar). Jämför med det faktiska minimat, -0.9732 . Intervallet $[-\pi, \pi]^4$ delades in i 10 000 punkter. I varje punkt utfördes 100 mätningar.

$\langle H_5 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	η	α	β	Tid
-0.6737	1 000 000	0.5236	-0.5236	0.1745	-0.1745	26500 s
-0.6876	1 000 000	0.5236	-0.5236	0.1745	-0.1745	24400 s
0.0115	1 000 000	0.5236	-0.5236	0.1745	-0.1745	23900 s
-0.0243	1 000 000	0.5236	-0.5236	0.1745	-0.1745	23600 s

Tabell 4.8: Resultat av optimering av H_5 (4 parametrar) där gissningen till grundtillståndet är $|\Psi_{\text{init}}\rangle$. Jämför med det faktiska minimat -0.9732.

$\langle H_5 \rangle$ [13.6 eV]	Antal mätningar	θ	η	α	β	Tid
-0.9651	215 000	0.2211	-0.1886	0.0276	-0.0527	2940 s
-0.9471	175 000	0.1240	-0.168	-0.0001	-0.0538	2330 s
-0.8863	195 000	0.1026	-0.1507	-0.0421	-0.0975	2640 s
-0.8670	175 000	0.1121	-0.0510	-0.0469	0.0170	2350 s
-0.9383	185 000	0.1211	-0.1398	0.0145	-0.0290	2500 s

Den generella trend vi ser i tabell 4.5-4.8 är att optimering är mindre krävande än parametersvep för stora N — beräkningstiden är mindre och $\langle H_N \rangle$ är närmre $\langle H_N \rangle_{\text{ref}}$. Noterbart är att beräkningstiden troligtvis är en bättre representation av beräkningstygden än antalet mätningar på grund av att även grinddjupet växer med N .

En annan trend vi ser är att optimeringen blir mindre robust för fler parametrar. Fler parametrar innebär en potentiellt bättre approximation av grundtillståndens energi, men även att optimeringen blir svårare. I tabell 4.8 ($N = 5$) ser vi att uppskattningen är bättre än $\langle H_4 \rangle_{\text{ref}}$, men endast i en av fem körningar.

Den minsta energi vi hittar med optimering är $-0.9651E_B$. Vår bästa approximation av grundtillståndens energi är alltså ungefär 3.5 % större än det faktiska minimat och skulle antagligen inte förbättras genom att lägga till fler basvektorer. Detta kan relateras till *kemisk precision* ("chemical accuracy" på engelska), vilket definieras som ± 1 kcal/mol. Inom kvantkemin är detta ett mått på om en approximation är tillräckligt exakt för att var användbar [13], och i vårt fall är den kemiska precisionen mot 0.3 %.

För små N hade svepningen troligtvis tjänat på att minska antalet mätningar per punkt och öka antalet punkter. Detta gör vi inte på grund av att mängden data som behöver sparas blir ohanterligt stor för stora N . Detta eftersom antalet punkter skalar som k^N där k är antalet punkter som intervallet $[-\pi, \pi]$ delas in i.

I appendix D illustreras vågfunktionen som tillhör vårt bästa optimeringsresultat — denna har extraherats ifrån tabell 4.8.

4.3 Undersökningar av mät- och grindbrus

Här presenteras inledande resultat med de brusmodeller som introduceras i kapitel 2.2.2; mät- och grindbrus. Det huvudsakliga syftet är att jämföra vilken av vågfunktionsansatserna som är mest bruskänslig och vilken typ av brus som påverkar mätningarna mest. Brusundersökningarna görs främst kvalitativt med målet att ge förslag på vidare undersökningar. De resultat som redovisas i detta avsnitt begränsas till att ta hänsyn enbart X-brus. Detta eftersom det visade sig att X- och Y-brus påverkade mätningarna på samma sätt, samt att Z-brus inte påverkade mätningarna alls. Detta beror på att en Z-grind endast roterar en kvantbit ett halvt varv runt z -axeln på Blochsfären vilket inte ändrar kvantbitens sannolikhetsamplituder.

I figur 4.5 visas skattningen av $\langle H_2 \rangle$ vid variationsminimum $\theta = 0$; detta görs för $N = 2$ basvektorer för de båda ansatserna med varierande brusnivåer. Här note-

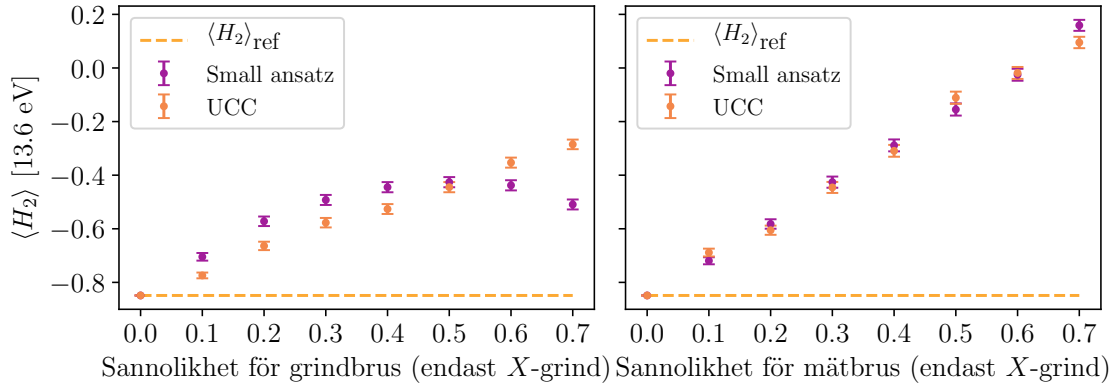


Figure 4.5: Medelvärde av $\langle H_2 \rangle$ vid variationsminimum $\theta = 0$ för Small ansatz och UCC med 500 mätningar och två olika typer av brus. För jämförelse finns den streckade linjen som markerar $\langle H_2 \rangle_{\text{ref}}$.

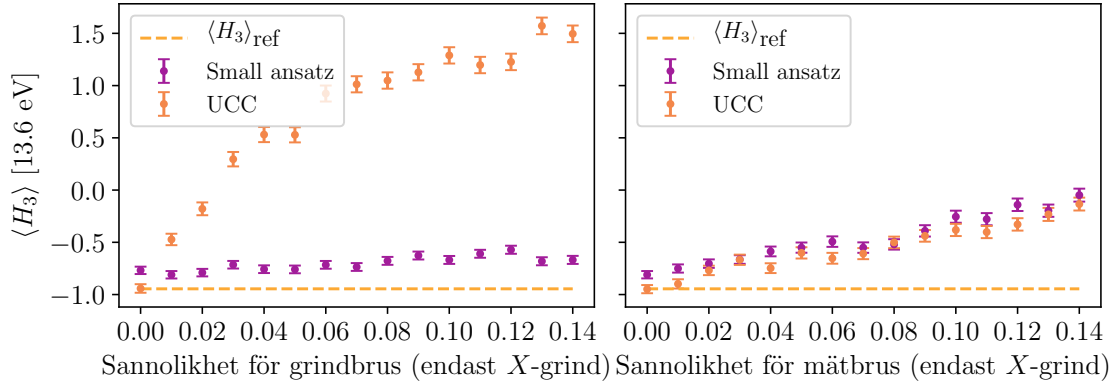


Figure 4.6: Medelvärde av $\langle H_3 \rangle$ vid de värden på θ och η som minimerar energin för UCC, och för det θ som minimerar Small ansatz, för 500 mätningar för två olika typer av brus. Notera att skalan på x -axeln skiljer sig ifrån figur 4.5.

rar vi att avvikelserna från det ideala fallet (utan mätbrus) ökar snabbt med ökande nivåer av mätbrus. Detta är intressant med tanke på att mätbrus anger sannolikheten för att *en* X-grind verkar på biten innan mätningen; detta till skillnad från grindbrus, som anger sannolikheten för att en X-grind verkar på kvantbiten för *varje* grind som verkar på kvantbiten. Från en jämförelse av antalet grindar hos UCC ($N = 2$) och Small ansatz kan UCC förväntas vara mer känslig för grindbrus då Small ansatz endast har två grindar (jmf. 3.7 för UCC). Dock visar simuleringarna att detta är fel — Small ansatz är den känsligare ansatsen för ett stort sannolikhetsintervall. Vidare visar vår simulering att mätbrus har lika stor påverkan på båda vågfunktionsansatserna för $N = 2$. Det finns således en kvalitativ skillnad i hur de olika brustyperna påverkar ansatserna.

Resultaten från motsvarande simulering för $N = 3$ redovisas i figur 4.6. Notera dock att skalan på x -axeln skiljer sig åt mellan figurerna. Här noteras återigen att mätbruset påverkar båda ansatserna lika mycket. Däremot påverkar här grindbruset påverkar UCC betydligt mer än Small ansatz till skillnad från i fallet $N = 2$. För

små brusnivåer ($P_X < 0.01$) syns en tydlig inverkan på båda ansatserna; det blir även tydligt att UCC-ansatsen inte är robust i denna mening jämfört med Small ansatz för brusnivåer större än 1 %. Vår simulering stärker alltså det förväntade resultatet — att grindbrus påverkar UCC-ansatsen mer för $N = 3$ basvektorer — då dess program innehåller många fler grindar, se figur 3.7 och 3.8.

5

Slutsatser och vidare undersökningar

Slutsatser

Utifrån våra resultat och den diskussion vi presenterat i kapitel 4 kan vi observera ett antal fenomen. Från teorin fås att ju fler basvektorer i approximationen av tillståndsrummet (se exempelvis figur 3.1), desto bättre blir uppskattningen av grundtillståndsenenergin. Anmärkningsvärt är dock att det inte alltid är fördelaktigt att lägga till fler basvektorer. Som vi noterade i avsnitt 4.2 offras då optimeringens robusthet. Vidare blir väntevärdena mer avvikande vid fler basvektorer vilket är ett problem som helt uppkommer från den ökade komplexiteten hos optimeringsproblemet. Vi finner således att optimeringsalgoritmen är en begränsande faktor för ett noggrant resultat, snarare än att antalet basvektorer är för få.

Att enbart svepa över olika värden på vågfunktionsansatsens parametrar jämfört med att köra en optimeringsalgoritm gav i vårt fall likvärdiga resultat för $N = 2$ basvektorer, som vi såg i avsnitt 4.2. Däremot presterade optimeringsalgoritmen avsevärt bättre för $N > 2$, samtidigt som det är viktigt att notera att optimering kräver en rimlig initial gissning. Därför är det viktigt att ha en tillräcklig fysikalisk förståelse för det system man vill simulera. Vi anser att i de fall då en sådan gissning finns är optimeringsalgoritmen det rekommenderade alternativet jämfört med parametersvep.

Gällande val av ansats observerade vi att ett litet antal grindar i en vågfunktionsansats kan ge bra resultat för $N = 2$ basvektorer. I fallet med fler basvektorer är det viktigt att vågfunktionen bevarar partikelantal; om så inte är fallet så finns ingen garanti för att grundtillståndsenenergin svarar mot ett enpartikeltillstånd. Vi märkte däremot i brusundersökningen att det är värt att fundera igenom antalet grindar i den ansats man väljer. För $N = 3$ basvektorer påverkades våra två ansatser som förväntat på grindbrus — UCC presterade sämre då denna innehåller fler grindar. För $N = 2$ basvektorer upptäckte vi dock att det fanns ett intervall då UCC presterade bättre än Small ansatz, trots att den förstnämnda innehåller fler grindar. Vi har således bekräftat att olika ansatser är olika känsliga mot brus; detta är något som bör tas hänsyn till vid kvantmekanisk simulering.

Vidare studier

Den här studien fokuserade på enbart två vågfunktionsansatser, UCC samt den så kallade Small ansatz. Våra resultat visar att det kan vara intressant att studera en ansats som bevarar partikelantal på liknande sätt som UCC men som innehåller färre grindar. Att minska grindantalet är viktigt dels för att minska beräknings-tyngden och dels för att minska bruskänsligheten. Dessutom tror vi att det går att förenkla samma UCC-ansats som vi använde till att bestå av färre grindar genom en noggrannare analys av dess grindsammansättning [10].

På grund av tidsbrist undersökte vi inte på vilket sätt den implementerade brusmodellen skulle påverka optimeringsmetodernas förmåga att hitta grundtillståndens energi. Istället använde vi parametersvep för alla brusundersökningar. En vidare studie av hur en brusmodell påverkar den valda optimeringsalgoritmen är av intresse då optimering överlag presterade bättre än parametersvep. I denna kontext hade man även kunnat applicera felkorrigeringsmetoder som att till exempel sammanfläta de kvantbitar man vill mäta med en större omgivning [10].

Andra faktorer som hade kunnat påverka en verklig kvantdator är till exempel att alla kvantbitar inte är sammankopplade. I den här rapporten har vi dock förbisett denna begränsning genom att inte exkludera några av de fördefinierade grindarna från pyQuil. Att applicera till exempel en CNOT-grind som sammanflätar två kvantbitar kräver att kvantbitarna är sammankopplade. En vidare studie hade kunnat vara att ta hänsyn till denna begränsning.

Slutligen, eftersom optimeringen är starkt beroende av en bra gissning till grundtillståndet är det av stort intresse att finna sådana gissningar. En idé hade kunnat vara att använda resultatet från en tidigare optimering utförd med färre basvektorer. Denna idé bygger på att om vi utvecklar det tillstånd $|\psi_{\min}\rangle$ som minimerar energin i HO-basen $|n00\rangle$ måste $\langle\psi_{\min}|N00\rangle \xrightarrow{N\rightarrow\infty} 0$ eftersom $|\psi_{\min}|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \langle\psi_{\min}|n00\rangle^2$ samtidigt som $|\psi_{\min}|^2 = 1$. För stora N förväntar vi oss alltså att vågfunktionen ändras väldigt lite när vi går från N till $N + 1$.

Litteratur

- [1] Richard P Feynman. *Simulating Physics with Computers*. Tekn. rapport 6. 1982. DOI: 10 . 1007 / BF02650179. URL: <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [2] David Deutsch. "Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer". I: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 400 (1985). DOI: 10.1098/rspa.1985.0070.
- [3] Benjamin Skuse. *The trouble with quantum computing* / *E&T Magazine*. URL: <https://eandt.theiet.org/content/articles/2016/11/the-trouble-with-quantum-computing/?fbclid=IwAR1BKS2Pt0FZd7jIIIs3py5CIIfbehzEF1-etthQvYfwVQ4Zz0jKjs76T2aBY> (hämtad 2019-05-06).
- [4] Franz Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. 2nd. Springer-Verlag, 2004, s. 405. ISBN: 9783662054208.
- [5] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Third. Cambridge University Press, 2018. ISBN: 978-1-107-18963-8. DOI: 10.1017/9781316995433.
- [6] Marcos Moshinsky och Yuri F. Smirnov. *The Harmonic Oscillator in Modern Physics*. Harwood Academic Publishers, 1996, s. 414. ISBN: 978-3718606214.
- [7] E. F. Dumitrescu m.fl. "Cloud Quantum Computing of an Atomic Nucleus". I: *Physical Review Letters* 120.21 (maj 2018). ISSN: 10797114. DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.210501.
- [8] Kanav Setia och James D Whitfield. "Bravyi-Kitaev Superfast simulation of electronic structure on a quantum computer". I: 03755 (2018), s. 1–13. arXiv: arXiv:1712.00446v3.
- [9] David. P. Divincenzo et al. "The physical implementation of quantum computation". I: *Fortschritte der Physik* 48 (2000), s. 771–783. ISSN: 00158208. URL: <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0002077>.
- [10] Michael A. Nielsen & Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information, by M.A. Nielsen and I.L. Chuang*. Vol. 52. 6. 2011, s. 604–605. ISBN: 0521635039. DOI: 10.1080/00107514.2011.587535. arXiv: arXiv:1011.1669v3. URL: <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00107514.2011.587535>.
- [11] Mark M. Wilde. *From Classical to Quantum Shannon Theory*. Cambridge University Press, juni 2011. DOI: 10.1017/9781316809976.001. arXiv: 1106.1445. URL: <http://arxiv.org/abs/1106.1445%20http://dx.doi.org/10.1017/9781316809976.001>.
- [12] Rigetti. *Grove 1.7.0 documentation*. URL: <https://grove-docs.readthedocs.io/en/latest/index.html> (hämtad 2019-03-29).

- [13] Jonathan Romero m. fl. “Strategies for quantum computing molecular energies using the unitary coupled cluster ansatz”. I: *Quantum Science and Technology* 4.1 (2019), s. 1–18. ISSN: 20589565. DOI: 10.1088/2058-9565/aad3e4. arXiv: arXiv:1701.02691v2.
- [14] Isaiah Shavitt och Rodney J. Bartlett. “Foundations of coupled-cluster theory”. I: *Many – Body Methods in Chemistry and Physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2009, s. 251–291. DOI: 10.1017/CB09780511596834.010. URL: <https://www.cambridge.org/core/books/manybody-methods-in-chemistry-and-physics/D12027E4DAF75CE8214671D842C6B80C>.
- [15] Rodney J Bartlett och Monika Musiał. “Coupled-cluster theory in quantum chemistry”. I: *REVIEWS OF MODERN PHYSICS* 79.March (2007), s. 293. DOI: 10.1103/RevModPhys.79.291.
- [16] M.J Powell. “On search directions for minimization algorithms”. I: *Mathematical Programming* 4.1 (1973), s. 193–201. ISSN: 00255610. URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-015-8330-5_4.
- [17] M.J Powell. “Advances in Optimization and Numerical Analysis”. I: *Advances in Optimization and Numerical Analysis*. Springer, 1994, s. 51–67. ISBN: 9789048143580. URL: <https://www.springer.com/la/book/9780792326731>.
- [18] Rigetti. *pyQuil 2.5.2 documentation*. URL: <http://docs.rigetti.com/en/stable/> (hämtad 2019-03-29).
- [19] Robert S Smith m. fl. “A Practical Quantum Instruction Set Architecture”. I: (2016). arXiv: arXiv:1608.03355v2.
- [20] Jarrod R. McClean m. fl. “OpenFermion: The Electronic Structure Package for Quantum Computers”. I: (2017), s. 1–22. ISSN: 0001-4575. arXiv: 1710.07629. URL: <http://arxiv.org/abs/1710.07629>.

A

Test av fermioniska kanoniska kommutationsrelationer

Tensorprodukter har följande egenskaper:

$$A \otimes C + B \otimes C = (A + B) \otimes C \quad (\text{A.1})$$

$$c(A \otimes B) = (cA) \otimes B = A \otimes (cB). \quad (\text{A.2})$$

En observation är att om en kedja operatorer verkar på en rad *sites* (ockupations-tillstånd) enligt

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}_0 \otimes \mathcal{O}_1 \otimes \dots \mathcal{O}_{n-1} \otimes \mathcal{O}_n.$$

Om en av dessa operatorer är en *nolloperator* $\mathcal{O}_i = 0$ är hela kedjan en nolloperator $\mathcal{O} = 0$ enligt (A.2).

De fermioniska kanoniska kommutationsrelationerna är

$$\{a_i, a_j\} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (\text{A.4})$$

Vi kan definiera kreations- och annihilationsoperatorer med hjälp av Paulimatiserna X , Y , och Z enligt

$$a_n^\dagger = \frac{1}{2} \left[\prod_{j < n} Z_j \right] (X_n - iY_n) \quad (\text{A.5})$$

$$a_n = \frac{1}{2} \left[\prod_{j < n} Z_j \right] (X_n + iY_n), \quad (\text{A.6})$$

där

$$X_n = \underbrace{I \otimes I \otimes \dots \otimes I}_{n-1 \text{ ggr}} \otimes X \otimes I \otimes \dots$$

är paulimatrisen X verkande på site nummer n .

Sats. Definitionerna (A.5) och (A.6) uppfyller de fermioniska kanoniska kommutationsrelationerna (A.3) och (A.4).

Bevis. Vi gör följande observationer om Paulimatrisserna:

$$Z^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I \quad (\text{A.7})$$

$$(X + iY)Z + Z(X + iY) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$(X + iY)(X + iY) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$(X + iY)(X - iY) + (X - iY)(X + iY) = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} = 4I. \quad (\text{A.10})$$

Vi vill nu visa att vår definition av $a_n^\dagger$ och a_n uppfyller den första kommutationsrelationen, (A.3). Antag först att $p < q$.

$$\begin{aligned} 4\{a_p, a_q\} &= 4a_p a_q + 4a_q a_p \\ &= Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ (X_p + iY_p) Z_p \ I Z_{p+1} \dots I Z_{q-1} \ I (X_q + iY_q) \\ &\quad + Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ Z_p (X_p + iY_p) \ Z_{p+1} I \dots Z_{q-1} I \ (X_q + iY_q) I \end{aligned}$$

Vi ser att de två termerna opererar likadant på alla sites förutom p och vi kan därför använda räkneregeln (A.1) för tensorprodukter för att säga

$$4\{a_p, a_q\} = Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ [(X_p + iY_p) Z_p + Z_p (X_p + iY_p)] \ Z_{p+1} I \dots Z_{q-1} I \ (X_q + iY_q) I.$$

Men vi har redan etablerat i (A.8) att

$$(X_p + iY_p) Z_p + Z_p (X_p + iY_p) = 0$$

och erhåller därmed att

$$4\{a_p, a_q\} = 0$$

Eftersom $\{\cdot, \cdot\}$ är symmetrisk är fallet $p > q$ nu trivialt. Så antag nu $p = q$.

$$\begin{aligned} 4\{a_p, a_p\} &= Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ (X_p + iY_p)(X_p + iY_p) \\ &\quad + Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ (X_p + iY_p)(X_p + iY_p). \end{aligned}$$

Men enligt (A.9) är

$$(X_p + iY_p)(X_p + iY_p) = 0$$

så vi måste ha att

$$\{a_p, a_p\} = 0.$$

Vi har nu visat att våra definitioner uppfyller kommutationsrelationen (A.3).

För att visa den andra kommutationsrelationen (A.4) ställer vi upp (för $p < q$)

$$\begin{aligned} 4\{a_p, a_q\} &= Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ (X_p + iY_p) Z_p \ I Z_{p+1} \dots I Z_{q-1} \ I (X_q - iY_q) \\ &\quad + Z_0 Z_0 \ Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} \ Z_p (X_p + iY_p) \ Z_{p+1} I \dots Z_{q-1} I \ (X_q - iY_q) I. \end{aligned}$$

Precis som tidigare noterar vi att vi kan addera de två tensorprodukterna enligt (A.1) och att vi då, på site p , erhåller

$$(X_p + iY_p)Z_p + Z_p(X_p + iY_p) = 0 \implies 4\{a_p, a_p^\dagger\} = 0$$

Som innan är fallet $p > q$ nu trivialt. Vi betraktar slutligen fallet $p = q$:

$$\begin{aligned} 4\{a_p, a_q\} &= Z_0 Z_0 Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} (X_p + iY_p)(X_p - iY_p) \\ &\quad + Z_0 Z_0 Z_1 Z_1 \dots Z_{p-1} Z_{p-1} (X_p - iY_p)(X_p + iY_p). \end{aligned}$$

Igen, adderar vi tensorprodukterna enligt (A.1) och använder identiteterna (A.9) och (A.7) för Paulimatrisserna. Vi kan nu se att

$$4\{a_p, a_p^\dagger\} = I \otimes I \otimes \dots \otimes I \otimes 4I \otimes I \otimes \dots$$

Om vi delar höger- och vänsterled med 4 enligt (A.2) erhåller vi

$$\{a_p, a_p^\dagger\} = I.$$

Vi har nu visat att definitionerna (A.5) och (A.6) uppfyller (A.4) och därmed att våra kreations- och annihilationsoperatorer uppfyller de fermioniska kanoniska kommutationsrelationerna. $\square$

Kommentarer:

Av den här härledningen ser vi även att en helt ekvivalent definition hade varit om man ersatt Z_j med $-Z_j$ i (A.5) eftersom resultatet hade blivit att $\{a_i, a_j\}$ ersatts med $-\{a_i, a_j\}$ i (A.3) när antingen i eller j varit udda. Men eftersom $\{a_i, a_j\} = 0$ är $\{a_i, a_j\} = -\{a_i, a_j\}$. På samma sätt är $\{a_i, a_j^\dagger\}$ i (A.4) endast nollskiljd när $i = j$, så minustecknen kancellerar varandra. Båda definitionerna förekommer i litteraturen.

Av (A.3) följer även direkt att

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_j, a_i\}^\dagger = 0^\dagger = 0.$$

B

Analytiskt beräknad Hamiltonian med två basvektorer

Enligt andrakvantiseringen gäller det att Hamiltonianen utvecklad i $N = 2$ basvektorer ges av

$$H_2 = H_{00}a_0^\dagger a_0 + H_{01}a_0^\dagger a_1 \\ + H_{10}a_1^\dagger a_0 + H_{11}a_1^\dagger a_1.$$

Med Jordan-Wigner-transformation hamnar en faktor $1/4$ på varje term i högerledet, så vi skriver om det enligt

$$4H_2 = H_{00}(X_0 - iY_0)(X_0 + iY_0) + H_{01}(X_0 - iY_0)(-Z_0)(X_1 + iY_1) \\ + H_{10}(-Z_0)(X_1 - iY_1)(X_0 + iY_0) + H_{11}(-Z_0)(X_1 - iY_1)(-Z_0)(X_1 + iY_1).$$

Vidare noterar vi att $X_i Y_j = Y_j X_i$, vilket ger att

$$4H_2 = H_{00}(X_0 X_0 + Y_0 Y_0 + iX_0 Y_0 - iY_0 X_0) \quad (\text{B.1})$$

$$- H_{01}(X_0 Z_0 - iY_0 Z_0)(X_1 + iY_1) \quad (\text{B.2})$$

$$- H_{10}(Z_0 X_0 + iZ_0 Y_0)(X_1 - iY_1) \quad (\text{B.3})$$

$$+ H_{11}Z_0 Z_0(X_1 - iY_1)(X_1 + iY_1). \quad (\text{B.4})$$

Vidare gäller det att

$$X_i X_i = Y_i Y_i = Z_i Z_i = I. \quad (\text{B.5})$$

Därför kan vi skriva

$$(\text{B.1}) = H_{00}(2I + i[X_0, Y_0]) = H_{00}(2I - 2Z_0).$$

Dessutom gäller $H_{01} = H_{10}$. Således kan vi också skriva

$$(\text{B.2}) + (\text{B.3}) = -H_{10}(\{X_0, Z_0\}X_1 + i[X_0, Z_0]Y_1 \\ + \{Y_0, Z_0\}Y_1 + i[Z_0, Y_0]X_1) \\ = -H_{10}(-2i \cdot iY_0 Y_1 - 2i \cdot iX_0 X_1) \\ = -2H_{10}(X_0 X_1 + Y_0 Y_1).$$

Den sista termen i H_2 blir

$$(\text{B.4}) = H_{11}I(X_1 X_1 + Y_1 Y_1 + i[X_1, Y_1]) \\ = H_{11}(2I - 2Z_1).$$

Totalt sett ges H_2 alltså av

$$\begin{aligned} 4H_2 &= H_{00}(2I - 2Z_0) - 2H_{10}(X_0X_1 + Y_0Y_1) + H_{11}(2I - 2Z_1). \\ \iff H_2 &= \frac{H_{00}}{2}(I - Z_0) - \frac{H_{10}}{2}(X_0X_1 + Y_0Y_1) + \frac{H_{11}}{2}(I - Z_1). \\ &= \frac{H_{00} + H_{11}}{2}I - \frac{H_{00}}{2}Z_0 - \frac{H_{11}}{2}Z_1 - \frac{H_{10}}{2}(X_0X_1 + Y_0Y_1). \end{aligned}$$

C

Reella symmetriska matriser

Sats. Om λ är ett egenvärde till en reell symmetrisk matris A , så finns en reell egenvektor v som löser egenvärdesproblemet

$$(A - \lambda I)v = 0. \quad (\text{C.1})$$

Bevis. Vi observerar först att $\lambda \in \mathbb{R}$ följer av spektralsatsen. Låt $x = u + iw$, där u och w är reella, vara en egenvektor som hör till λ . Existensen av x följer av definitionen av egenvärde. Vi kan då skriva om (C.1) som

$$(A - \lambda I)(u + iw) = 0$$

$$(A - \lambda I)u + i(A - \lambda I)w = 0 \quad (\text{C.2})$$

där $(A - \lambda I)u$ och $(A - \lambda I)w$ båda är reella eftersom $(A - \lambda I)$ är en reell matris. För att real- och imaginärdel av VL i (C.2) var för sig ska vara 0 måste

$$\begin{cases} (A - \lambda I)u = 0 \\ (A - \lambda I)w = 0 \end{cases}$$

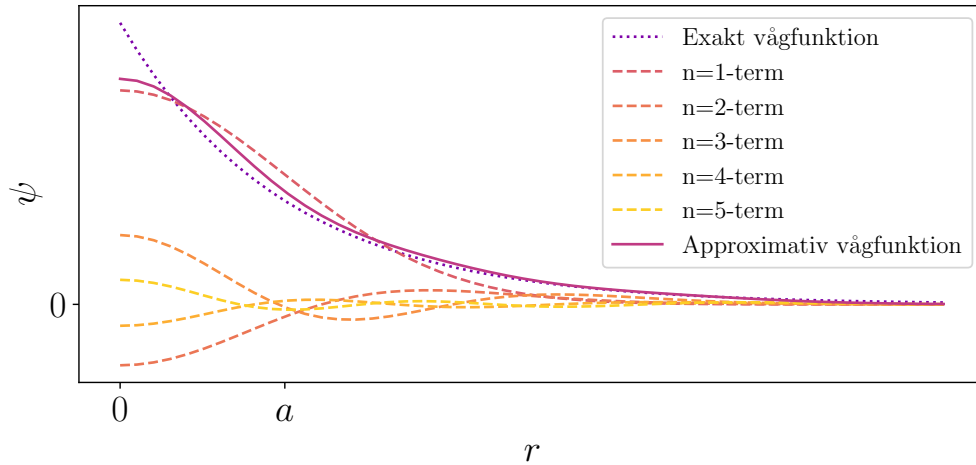
gälla. Alltså är de reella vektorerna u och w båda lösningar till egenvärdesproblemet (C.1). u och w kan inte båda vara nollvektorer då x per definition inte är en nollvektor, alltså är minst en av u och w en reell egenvektor som löser (C.1). $\square$

D

Visualisering av grundtillståndet

Varje kvantbit representerar en vågfunktion som är en egenvektor till den harmoniska oscillatorns Hamiltonian. I avsnitt 2 antog vi att l - och m -kvanttalen var 0, alltså att dessa vågfunktioner endast har ett radiellt beroende, $R_{n0}(r)$. Dessa vågfunktioner är helt reella. Vi har även argumenterat för att koefficienterna till vårt grundtillstånd är helt reella. Detta innebär att ett grundtillstånd ψ är helt reellt och endast har radiellt beroende. Vi skulle därför kunna plotta ψ i en graf med två axlar.

Pyquil innehåller en klass, `WavefunctionSimulator`, som vi kan använda till att extrahera vågfunktionen till ett preparerat tillstånd. Om vi extraherar vågfunktionen från det bästa optimeringsresultatet i tabell 4.8 ($N = 5$) har vi en approximation till enelektronens grundtillstånd som vi kan plotta bredvid en analytisk exakt lösning av enelektronatomens grundtillstånd. Se figur D.1.



Figur D.1: $\psi(r) = \sum_n c_n R_{n0}(r)$ där R_{n0} är egenvektorer till den harmoniska oscillatorns Hamiltonian. Här a är Bohrradien. Vi ser att vår approximativa vågfunktion väl överensstämmer med den exakta.

E

Första exciterade tillståndet

Med VQE-algoritmen kan vi ta fram det lägsta egenvärdet till en Hamiltonian, $\mathcal{H}$, i ett ändligdimensionellt underrum, U , av tillståndsrummet, $\mathcal{U}$. Ett antagande som görs är att om $\langle \mathcal{H} \rangle$ är en bra approximation till grundtillståndsenergin så är tillhörande tillstånd $|\psi\rangle$ en bra approximation till grundtillståndet. Vi vill nu beskriva hur man med hjälp av detta antagande kan approximera exciterade tillstånds energier.

Betrakta en explicit matrisrepresentation av $\mathcal{H}$

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} \end{bmatrix}$$

i någon ON-bas, $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_N\rangle\}$. Eftersom $\mathcal{H}$ är en observabel, och därför Hermitesk, har H en ortogonal uppsättning egenvektorer. Numrera dessa egenvektorer efter deras egenvärden $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots$. Låt nu $\langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle = \lambda_1$. Då är, under vårt antagande, $|\psi_1\rangle$ ortogonal mot $|\lambda_2\rangle, |\lambda_3\rangle, \dots$. Vi kan då konstruera en ortogonal transformation, S_1 , som för $|e_1\rangle$ till $|\psi_1\rangle$. $|e_1\rangle$ är då en egenvektor med egenvärde λ_1 till SHS^{-1} . Men eftersom S är ortogonal är även SHS^{-1} :s egenvektorer ortogonal, SHS^{-1} måste därför ha formen

$$SHS^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & (SHS^{-1})_{22} & \dots & (SHS^{-1})_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & (SHS^{-1})_{n2} & \dots & (SHS^{-1})_{nn} \end{bmatrix}.$$

Vi kan nu definera matrisen H' enligt

$$SHS^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & H' & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

H' är nu en matrisrepresentation av $\mathcal{H}$ i ett underrum, $U \ominus \text{span}(\psi_1)$, där alla tillstånd är ortogonala mot grundtillståndet $|\lambda_1\rangle$.

Enligt variationsprincipen är nu $\langle H' \rangle \geq \lambda_2$ och vi kan igen använda VQE för att hitta en approximation $|\psi_2\rangle$ till $|\lambda_2\rangle$. Denna metod kan itereras för att hitta det andra, tredje, etc exciterade tillståndet.

Man hade även kunnat tänka sig ett naivare tillvägagångssätt där det minsta egenvärdet tas bort genom att ersätta H med $H' = H - \lambda_1 |\lambda_1\rangle \langle \lambda_1|$. H' 's spektrum skulle då vara samma som H , förutom att $|\lambda_1\rangle$ skulle ha egenvärde 0.

I vår rapport har vi gjort antaganden specifika för grundtillståndet, som till exempel att kvanttalen $l = m = 0$. Dessa antaganden hade hindrat oss från att hitta en bra approximation till exciterade energier om vi naivt bara projicerat ut grundtillståndet.