



物理与工程

用变分量子本征求解器研究量子拉比模型的基态问题

郝明星 高一波

(北京工业大学理学部物理与光电工程系, 北京 100124)

摘要 在用变分法求解量子系统基态问题的研究中,采用变分量子算法求解基态的研究受到广泛的关注,作为一种量子与经典混合算法的变分量子求解器在其中发挥了重要作用。本文在开源的量子计算模拟器上运行变分量子本征求解器对量子拉比模型在超强耦合区的基态进行了讨论。在3量子比特空间中,我们采用标准二进制编码方式将量子拉比模型中的算符和量子态进行编码,并且在哈密顿量变分拟设构造的量子电路上计算得到哈密顿量最小平均值(基态能量)。最后,通过将变分量子本征求解器的计算结果与经典数值模拟方法得到的精确值进行对比,我们讨论了变分量子本征求解器的计算精度与量子电路的消耗资源(量子比特数目)以及耦合强度之间的依赖关系。

关键词 量子拉比模型;变分量子本征求解器;量子计算模拟器

SOLVING THE GROUND STATE OF QUANTUM RABI MODEL WITH VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER

HAO Mingxing GAO Yibo

(Department of Physics and Optoelectronics, Faculty of Science, Beijing University of Technology, Beijing 100124)

Abstract In the study of solving the ground state of quantum systems by variational principle, variational quantum algorithm is widely adopted to solve the ground state. As one kind of quantum classical hybrid algorithm, variational quantum eigensolver plays an important role. In this paper, we calculate ground state of quantum Rabi model in the ultra-strong coupling regime by invoking the variational quantum eigensolver in the open-source quantum computing simulator Qiskit. In the 3-qubit computing basis, we use the standard binary encoding method to encode the operators and quantum states in the quantum Rabi model, and measure the minimum average value (ground state energy) on the quantum circuit constructed by the Hamiltonian variational ansatz. Finally, comparing the calculation results of the variational quantum eigensolver with the exact values obtained by classical numerical simulations, we discuss the dependence of computational accuracy of the variational quantum eigensolver on the consumption of the number of the qubits and the coupling strength in quantum Rabi model.

Key words quantum Rabi model; variational quantum eigensolver; Qiskit

收稿日期: 2023-01-18

基金项目: 国家自然科学基金(11674017)。

作者简介: 高一波,男,副教授,主要从事物理教学和科研工作,研究方向为量子光学和量子信息,ybgao@bjut.edu.cn。

引文格式: 郝明星,高一波. 用变分量子本征求解器研究量子拉比模型的基态问题[J]. 物理与工程, 2023, 33(5): 59-66.

Cite this article: HAO M X, GAO Y B. Solving the ground state of quantum rabi model with variational quantum eigensolver[J]. Physics and Engineering, 2023, 33(5): 59-66. (in Chinese)

量子系统中的大部分物理现象的发生是由能级跃迁决定的,能谱的计算一直都是量子力学中的重要问题。通常情况下,在量子力学中求解能量本征值时,可以把量子系统的哈密顿量写成矩阵的形式,然后用解析方法或计算机数值模拟方法将矩阵对角化直接解出矩阵的特征值(能量本征值),从而可以计算各种物理量的平均值(期望值)和关联函数等。多数情况下用解析方法求解矩阵的本征值是一个复杂的问题,也可采用数值模拟的方法(Qutip^[1])在通常的经典计算机上完成。

1982年,理查德·费曼(Richard Feynman)在《用计算机模拟物理学》一文中讨论用量子计算机模拟量子系统^[2]时,首次提出了“量子计算机”,基于量子叠加态的量子计算机有不同于经典计算机的特点和特殊的优势。普通的经典计算机解决问题时需要执行“经典算法”,伴随量子计算机的发展也出现了“量子算法”。与经典计算机相比,1994年 Peter Shor 提出的大数因子化算法^[3]和1996年 Lov Grover 提出的量子搜索算法^[4]显示出超越经典计算机的量子优势,由此开拓了量子算法研究的广阔空间。近年来,量子算法已经在化学、金融和医学等领域进行了有效的探索和应用,涌现多种量子算法:如变分量子本征求解器^[5](Variational Quantum Eigensolver,以下简称 VQE)、量子近似优化算法^[6](Quantum Approximation Optimization Algorithm)、相干伊辛机^[7](Coherent Ising Machine)和量子退火算法^[8](Quantum annealing)等。实用量子计算机还没建造成功,量子算法的发展受到量子硬件缺乏的限制,使得量子算法只能在小型量子硬件和模拟器上进行检验和运行。目前,受到广泛关注的开源量子计算模拟器主要有 Qiskit (IBM)、Cirq (Google)、Q# (Microsoft)、QPanda(本源量子)、Paddle Quantum (百度)和 TensorCircuit(腾讯)等。本文使用 Qiskit(Quantum information science Kit)是由 IBM 公司开发的开源量子软件开发 SDK (Software Development Kit),科学研究人员可以在模拟器上执行量子算法的运算和检验。鉴于量子硬件的缺乏,量子算法中的优化过程只能在经典计算机上运行,从而催生出 VQE 等量子经典混合算法^[9]。在量子化学的研究中,用

VQE 计算分子基态能量^[10-13]是目前比较成功的应用之一。本文将在 Qiskit 的模拟器上运行 VQE 求解量子拉比模型的基态问题。

1 VQE 的工作流程

利用量子力学变分原理求得量子系统的最小本征值(基态能量),对于给定哈密顿量 H 的量子系统,其基态能量 E_0 表示为

$$E_0 \leq E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \quad (1)$$

其中, θ 通常代表一组参数 $\{\theta_i, i=0, 1, 2, \dots\}$, 且满足归一化条件 $\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle = 1$ 。VQE 的基本思想就是:在量子计算机上计算能量平均值,利用经典优化方法迭代优化参数 θ 从而得到最小的使得能量平均值 $E(\theta)$, 此时的试探态波函数 $|\psi(\theta)\rangle$ 就是变分法得到的基态波函数。本文利用的 VQE 是一种量子经典混合算法,其能量平均值的计算在量子电路上进行,变分参数的迭代更新由经典优化器完成,最后由变分参数的最优值确定基态能量和基态波函数。

以求基态为例, VQE 的工作流程如下:

第一步:编码。在计算表象(量子比特表象)中编码量子系统的量子态和算符以及哈密顿量;

第二步:选定一个变分拟设,对试探波函数 $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|\psi_0\rangle$ 进行参数化处理,并构造对应的量子电路;

第三步:利用损失函数在量子电路上测量出能量平均值 $C(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$;

第四步:利用经典优化器迭代更新参数 θ , 重复第三步中的能量平均值的测量,直至找到最小能量平均值(基态能量)。

在由多个量子比特组成的量子电路上执行量子计算过程,首先要将量子系统的量子态和算符进行编码。用量子比特将量子系统的量子态和哈密顿量进行编码^[14]有多种方法,常用编码方法主要有乔丹-维格纳(Jordan-Wigner)变换^[15]、宇称编码(parity encoding)^[16]和布拉维-基塔耶夫(Bravyi-Kitaev)变换^[17,18],重新编码后的哈密顿量形式上表示为

$$H = \sum_a h_a P_a \quad (2)$$

其中, h_a 是一组常数值, P_a 是哈密顿量中多个泡利算符串(由组成量子电路的不同量子比特的泡利算符的直积组成), 即

$$P_a = \sigma_1^{a_1} \otimes \sigma_2^{a_2} \cdots \otimes \sigma_N^{a_N} \quad (3)$$

其中, N 用于标记模拟量子系统的量子比特, a_N 用于标记泡利算符的分量。在 VQE 运算中, 损失函数一般为量子系统的能量平均值 $E(\theta)$, $E(\theta)$ 通常是一个多元标量函数。求解基态能量时, 最常用的是基于梯度下降原理的优化器, 如共轭梯度法 CG^[19-21] 和最小二乘优化算法 SLSQP^[22]。这里, 梯度下降的原理就是, 首先设定变分参数的初始值 θ^i , 计算损失函数在此处的导数的值 $\frac{\partial E(\theta^i)}{\partial \theta}$, 依据损失函数下降的方向确定新的参数值 θ^{i+1} , 再次计算导数值 $\frac{\partial E(\theta^{i+1})}{\partial \theta}$ 并确定新的参数 θ^{i+2} , 如此迭代更新直至损失函数收敛至最小值。除了以上 2 种优化器, Python 中的科学计算模块 Scipy.optimize 中还包含多种经典优化器, 如线性近似约束优化器 COBYLA^[23] 和多个未知参数优化器 SPSA^[24] 等。

在能量平均值的计算过程在模拟器上执行之前, 需要导入所需的函数库包括: Python 库 (numpy, matplotlib 和 scipy 等)、量子计算相关 (workflow, circuit, Gradient 等)、模拟器 (Aer)、量子算法 (algorithms) 和经典优化算法 (algorithms, optimizers)。代码如下所示:

```
# 导入 numpy 和 matplotlib
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# 泡利算符
from qiskit.opflow import Z, Y, X, I
from qiskit.opflow import SummedOp

# 导入量子电路
from qiskit.circuit import QuantumCircuit, ParameterVector

# 导入模拟器
from qiskit import Aer

from qiskit.utils import QuantumInstance

# 导入 VQE 和几种经典优化器
from qiskit.algorithms import VQE
from qiskit.algorithms.optimizers import CG, COBYLA, SPSA, SLSQP
```

2 VQE 求解量子拉比模型中的基态

2.1 量子拉比模型

在量子光学和量子信息的研究中, 光和物质的相互作用与量子门操作等重要问题密切相关。在 1963 年, Jaynes 和 Cummings 研究了二能级原子(量子比特)和量子光场之间相互作用的物理问题, 通常被称为量子拉比模型^[25,26] (Quantum Rabi model), 其哈密顿量写为

$$H = \omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \Omega \sigma_z + g(a + a^\dagger)(\sigma_+ + \sigma_-) \quad (4)$$

其中, 第一项和第二项中的 ω 和 Ω 分别代表单模量子光场和二能级原子的角频率, 第三项中的 g 代表量子光场与量子比特的耦合强度。另外, 算符 $a^\dagger$ 和 a 分别代表单模量子光场的产生算符和湮灭算符, 算符 $\sigma_+ = |0\rangle\langle 1|$ 和 $\sigma_- = |1\rangle\langle 0|$ 分别代表二能级原子的泡利算符, $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 分别代表自旋向上和向下的量子态。耦合强度 g 与光场频率 ω 的比值将量子拉比模型的研究范围划分为三个区(如图 1 所示): (1) 当耦合强度 $g/\omega < 0.1$ 时, 量子拉比模型处于弱-强耦合区 (Weak-Strong coupling regime)。在强耦合区, 量子拉比模型简化为 JC 模型^[27] 时其本征值和本征态可以精确解析求解; (2) 当耦合强度 $0.1 < g/\omega < 1$ 时, 量子拉比模型处于超强耦合区 (Ultrastrong coupling regime); (3) 当耦合强度 $g/\omega > 1$ 时, 量子拉比模型处于深强耦合区 (Deep strong coupling regime)。在超强耦合区和深强耦合区时, 由于量子拉比模型精确解的求解过程复杂不便使用, 所以常用近似方法或计算机数值模拟方法处理与能量本征值相关的物理问题。本文中, 我们用变分量子本征求解器(以下简称 VQE)来计算量子拉比模型的基态。

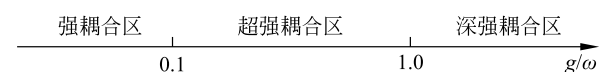


图 1 量子拉比模型的区域划分^[28] (图中的中文标识由英文翻译而来)

2.2 模拟哈密顿量(编码)

量子计算机中的基本运算是由泡利算符来完成的, 因此量子拉比模型哈密顿量中含有的产生

算符和湮灭算符($a^\dagger$ 和 a)必须映射成泡利算符的形式,能量平均值的计算过程能够在量子计算机上完成。量子拉比模型中的量子光场的光子数态空间为 $\{|n\rangle, n=0,1,2,\dots,\infty\}$ 。其中, n 为量子光场中包含的光子数,满足本征方程

$$a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \quad (5)$$

其中,与量子拉比模型哈密顿量对应的希尔伯特空间的维数是 $2 \times n$,即二能级系统的空间为2维,光子数空间的维数 n 是无穷维。这种情况下,对具体物理问题进行数值模拟时,希尔伯特空间的维数通常截断为有限值。本文中,需要对光子数空间进行截断(最大光子数为 N),则在下面的讨论中采用的希尔伯特空间的维数为 $2 \times (N+1)$ 。

按照量子计算的工作流程,需要用量子比特重新编码量子系统中的量子态和算符。本文采用常用的标准二进制编码方法(Standard binary encoding^[29])对光子数 n 进行编码,转换关系为

$$n = \sum_{k=0}^N c_k 2^k \quad (6)$$

则十进制数 n 转换为二进制数 $c_N \dots c_2 c_1 c_0$,二进制数 c_k 由量子电路上的一个量子比特表示, k 为量子比特的编号。同理,光子数态 $|n\rangle$ 编码表示为

$$|n\rangle = |c_N\rangle \otimes \dots \otimes |c_2\rangle \otimes |c_1\rangle \otimes |c_0\rangle \quad (7)$$

当截断空间后最大光子数 $N=3$ 时,4个光子态 $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ 被重新编码表示为

$$|0\rangle = |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_0 \quad (8)$$

$$|1\rangle = |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_0 \quad (9)$$

$$|2\rangle = |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_0 \quad (10)$$

$$|3\rangle = |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_0 \quad (11)$$

在式(8)~(11)中,我们用2个量子比特(q_0 和 q_1)对量子光场的4个光子数态进行了编码,用1个量子比特(q_2)对二能级原子进行编码,总共使用3个量子比特对量子拉比模型进行了编码。默认情况下,这个3个量子比特的初始态均设置为“0”态($|0\rangle$)。同时,与量子光场相对应的产生算符和湮灭算符也进行了重新编码,则有

$$\begin{aligned} a^\dagger + a &= \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\right) I \otimes I \otimes X + \\ &\left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}\right) I \otimes Z \otimes X + \\ &\frac{\sqrt{2}}{2} (I \otimes X \otimes X + I \otimes Y \otimes Y) \end{aligned} \quad (12)$$

基于式(8)~(12),量子拉比模型哈密顿量经过编码重新写为

$$\begin{aligned} H &= \frac{3\omega}{2} III - \frac{\omega}{2} IIZ - \omega IZI + \frac{\Omega}{2} ZII + \\ &\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\right) g XIX + \left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}\right) g XZX + \\ &\frac{g}{\sqrt{2}} XXX + \frac{g}{\sqrt{2}} XYY \end{aligned} \quad (13)$$

其中,哈密顿量编码为泡利字符串的形式, I 代表单位算符, $\{X, Y, Z\}$ 分别对应于3个泡利算符。为了方便讨论,式(13)中忽略张量积符号 $\otimes$ 。代码如下所示:

```
# 设定耦合强度和哈密顿量的编码形式
g=0.6
Rabi_hamiltonian=(3/2 * I*I*I)+(-0.5 * I*I*Z)+/
(-1.0 * I*Z*I)+(0.5 * Z*I*I)+/
(g * (0.5+np.sqrt(3)/2) * X*I*X)+/
(g * (0.5-np.sqrt(3)/2) * X*Z*X)+/
(g * np.sqrt(2)/2 * X*X*X)+(g * np.
sqrt(2)/2 * X*Y*Y)
```

2.3 量子拉比模型中基态的计算

利用变分原理求解量子拉比模型的基态,首先需要构造一个试探态(trial state)和变分量子电路(quantum circuit)。在量子电路上计算量子拉比模型哈密顿量的能量平均值 $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ 的过程中,量子系统的试探态形式上写为

$$|\psi(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_0\rangle \quad (14)$$

量子电路的初态 $|\psi_0\rangle$ 一般为接近基态的量子态。当耦合强度 $g=0$ 时,量子系统中的能量最低态取为 $|1\rangle \otimes |0\rangle$ (自旋向下且光子数为0的量子态)可取为初态,编码后写为

$$|\psi_0\rangle = |100\rangle = |1\rangle_2 \otimes |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_0 \quad (15)$$

其中,量子电路中的3个量子比特(q_2, q_1 和 q_0)的取值为1,0和0。 q_2 取值为1代表量子系统中二能级原子处于基态($|1\rangle$), q_1 和 q_0 取值为00代表光子数为 $n=0$ 。代码如下所示:

```
# 定义组成量子电路的量子比特
wavefunction=QuantumCircuit(3)
params=ParameterVector('theta', length=10) # 定义变分参数的数目

# 初态为|100>, q2=0, q0=0
wavefunction.x(2)
```

2.3.1 构造量子电路

本文采用常见的哈密顿量变分拟设 (Hamiltonian variational ansatz, HVA)^[30,31], 则变分酉变换表示为

$$U(\theta) = \prod_k U(\theta_k) = \prod_k e^{i\theta_k H_k} \quad (16)$$

其中, $k(\{0, 1, \dots, 6\})$ 为整数, θ 为一组任意的变分参数 $\{\theta_k\}$ 。 H_k 为一组泡利串 (Pauli string), 即 $H_0 = IIZ, H_1 = IZI, H_2 = ZII, H_3 = XIX, H_4 = XZX, H_5 = XXX, H_6 = XYY$ 。 经过简单的计算, 与 $U(\theta)$ 对应的量子电路分解如图 2 所示: 在量子电路图中, q_0, q_1 和 q_2 分别对应 3 个量子比特。

(1) 与 $U(\theta_0), U(\theta_1), U(\theta_2)$ 对应的单比特旋转门 $\{R_x, R_y, R_z\}$, 代码如下所示:

```
# 单 bit Unitary operator
wavefunction.rz(2 * params[0], 0)
wavefunction.barrier()

wavefunction.rz(2 * params[1], 1)
wavefunction.barrier()

wavefunction.rz(2 * params[2], 2)
wavefunction.barrier()
```

(2) 与 $U(\theta_3), U(\theta_4), U(\theta_5), U(\theta_6)$ 对应是一系列单比特门 (旋转门和哈达玛 (Hadamard) 门) 和两比特门 (可控非门) 的组合, 代码如下所示:

```
# 2bit Unitary operator
wavefunction.h(2)
wavefunction.h(0)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.rz(2 * params[3], 2)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.h(0)
```

```
wavefunction.h(2)
wavefunction.barrier()

wavefunction.h(2)
wavefunction.h(1)
wavefunction.h(0)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.rz(2 * params[4], 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.h(0)
wavefunction.h(1)
wavefunction.h(2)
wavefunction.barrier()

wavefunction.h(2)
wavefunction.rx(-np.pi / 2, 1)
wavefunction.rx(-np.pi / 2, 0)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.rz(2 * params[5], 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.rx(np.pi / 2, 0)
wavefunction.rx(np.pi / 2, 1)
wavefunction.h(2)
wavefunction.barrier()

wavefunction.h(2)
wavefunction.h(0)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.rz(2 * params[6], 2)
wavefunction.cx(0, 1)
wavefunction.cx(0, 2)
wavefunction.h(0)
wavefunction.h(2)
```

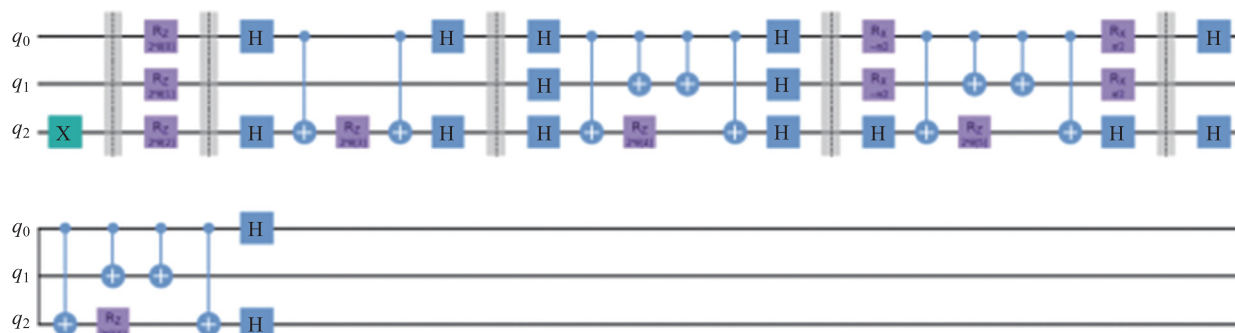


图 2 量子电路

2.3.2 计算基态能量

经过编码、制备试探态和构造量子电路,就可以开始基态能量的计算过程了。现在,选定模拟

器(Aer 提供的 aer_simulator_statevector)和经典优化器(CG)。我们将哈密顿量写入代码,就可以计算基态能量。代码和输出结果如下所示:

```
# 为量子系统指定模拟器 Aer
qi_sv=QuantumInstance(Aer, get_backend('aer_simulator_statevector'),
                        shots=1,
                        seed_simulator=2,
                        seed_transpiler=2)

# Conjugate Gradient algorithm 优化算法
optimizer=CG(maxiter=500)

# Gradient callable
vqe=VQE(wavefunction,optimizer=optimizer,quantum_instance=qi_sv)

result=vqe.compute_minimum_eigenvalue(Rabi_hamiltonian)
print('Result:',result)

Result: {'aux_operator_eigenvalues': None,
        'cost_function_evals': 128,
        'eigenstate': array([ 1.11022302e-16+0.00000000e+00j, -2.23390550e-01+1.46120591e-01j,
        0.00000000e+00+0.00000000e+00j, 0.00000000e+00+0.00000000e+00j,
        8.06501058e-01-5.27542868e-01j, 2.77555756e-17-8.32667268e-17j,
        0.00000000e+00+0.00000000e+00j, 0.00000000e+00+0.00000000e+00j]),
        'eigenvalue': (-0.6661903789531634+0j),
        'optimal_circuit': None,
        'optimal_parameters': {
            ParameterVectorElement(theta[5]): 4.157012642338165,
            ParameterVectorElement(theta[0]): -3.355911390408551,
            ParameterVectorElement(theta[4]): 3.5980040248971488,
            ParameterVectorElement(theta[6]): 4.077926941854833,
            ParameterVectorElement(theta[2]): -3.3114663051243705,
            ParameterVectorElement(theta[3]): 2.2055943868828654,
            ParameterVectorElement(theta[1]): -4.601956315720674},
        'optimal_point': array([-3.35591139, -4.60195632, -3.31146631, 2.20559439, 3.59800402, 4.15701264, 4.07792694]),
        'optimal_value': -0.6661903789531634,
        'optimizer_evals': None,
        'optimizer_result': None,
        'optimizer_time': 0.4510800838470459}
```

运行结果显示(数据取位至小数点后第4位):

(1) 最终优化参数 $\{\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots, \theta_6\}$ 由 'optimal_point' 可知。

(2) 基态能量由 'eigenvalue' 可知: $E_0 = -0.6662$;

(3) 基态波函数由 'eigenstate' 可知:

$$|E_0\rangle = (-0.2234 + 0.1461j)|001\rangle + (0.8065 - 0.5275j)|100\rangle \quad (17)$$

在上面的程序中,已经得到3光子量子光场当耦合强度 $g=0.6$ 时的基态能量的 VQE 计算值。在此条件下,当耦合强度 g 取其他值时,VQE 计算值与 Qutip 精确值之间存在差异(如图3所示)。取耦合强度 $g=0.1$ (强耦合区)时,相对误差为0(VQE 的计算值与 Qutip 的精确值相同),说明 VQE 的计算值的精度在强耦合区是足够的。当耦合强度 $g>0.1$ (超强耦合区)时,相对误差随

耦合强度的变化逐渐增大(计算精度下降,相对误差从 0.00% 逐渐增大到 4.44%)。这个结果表明,用于模拟量子光场的量子比特的数目取决于对计算精度的要求。如果要求计算精度大于 99.9% (相对误差小于 0.1%),此时对耦合强度的限制为 $g \leq 0.2$ 。

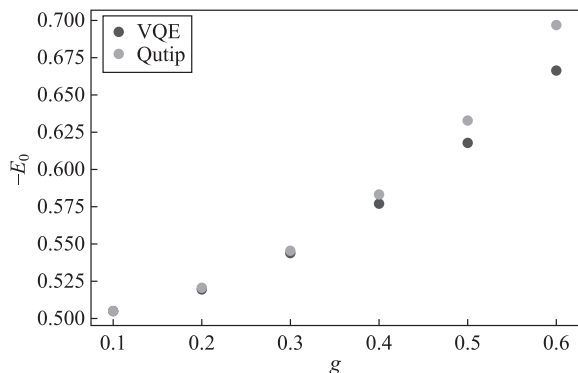


图3 $g=0.6$ 时 E_0 的 VQE 计算值与 Qutip 精确值对比

3 结果的讨论

在上面的基态能量计算中,涉及两个问题:(1)经典优化器对计算结果的影响;(2)计算精度对量子光场截断光子数的限制。首先,我们讨论经典优化器对计算结果的影响。在 Qiskit 关于 VQE 的计算中主要使用的经典优化器有 CG、COBYLA、SLSQP 和 SPSA。在上面的代码中分别使用这几种优化器计算基态能量时,除了 SPSA 运行时间相对较长,其他几种优化器所得计算结果无明显差别。其次,计算精度对截断光子数空间维数的限制。在上述的讨论中,主要涉及 2 个参数:截断的光子数空间的最大光子数 N 和耦合强度 g 。通常,量子拉比模型的研究是分区(强耦合、超强耦合和深强耦合)进行的,此时应用 VQE 计算基态能量需要的量子比特数目与光子数截断取值直接相关。在图 4 中,我们用 Qutip 计算的基态能量精确值来讨论光子数空间截断的维数与耦合强度之间的关系。图 4 中,耦合强度的取值范围是 $g \in (0.1, 2.0)$,三条曲线分别对应(从下往上)截断空间包含最大光子数 N 分别为 3 光子、7 光子和 15 光子的情况。当 $g < 1.0$ 时,三条曲线几乎重合,此时截断光子数取 $N=3$ 基本可以满足计算精度的要求。随着耦合强度 g 继续增

大,7 光子和 15 光子对应的两条曲线比较接近且与 3 光子对应的曲线间隔较大,此时 3 光子对应的计算精度较低。

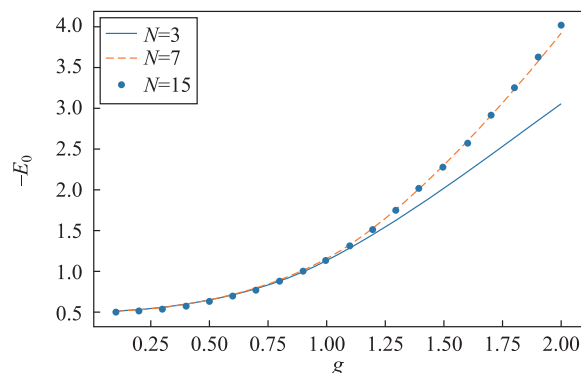


图4 光子数空间截断的维数与耦合强度之间的关系

4 结语

综合以上可知,VQE 计算基态能量时:(1)在强耦合区($g < 0.1$)可以取最大截断光子数 $N=3$;(2)在超强耦合区($0.1 < g < 1.0$)可以根据计算精度的要求取 $N=3$ 或 $N=7$;(3)在深强耦合区($1.0 < g < 2.0$)可以根据计算精度的要求取 $N=7$ 或 $N=15$ 。由式(6)(7)可知,截断光子数 N 的取值决定了用于模拟量子光场的量子比特数目,即 3 光子的量子光场需要用 2 个量子比特,7 光子的量子光场需要 3 个量子比特,15 光子的量子光场需要 4 个量子比特,计算精度要求越高,用于模拟量子系统所需量子比特数目越大。物理问题的研究也大都都需要考虑激发态的情况,本文使用 VQE 仅对量子拉比模型的基态的相关问题进行了讨论,并未讨论激发态的相关计算,关于激发态的计算可以参看最近研究^[32]。本文使用基于 Qiskit 的变分量子本征求解器计算量子系统的基态问题过程中,将理论教学中的物理问题(变分原理)与量子信息和量子计算最新研究的变分量子算法相结合,适合作为用一个变分法求解基态问题的教学案例,从而促进了物理课堂教学与前沿科学研究的有机结合。

参考文献

- [1] JOHANSSON J R, NATION P D, NORI F. Qutip 2: A python framework for the dynamics of open quantum systems[J]. Computer Physics Communications, 2013, 184(1234):

- 1234-1240.
- [2] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers[J]. *International Journal of Theoretical Physics*, 1982, 21(6-7): 467-488.
 - [3] SHOR P W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer[J]. *SIAM Journal on Computing*, 1997, 26(5): 1484-1509.
 - [4] GROVER L K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack[J]. *Physical Review Letters*, 1997, 79(2): 325-328.
 - [5] PARRISH R M, HOHENSTEIN E G, MCMAHON P L, et al. Quantum computation of electronic transitions using a variational quantum eigensolver[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 122(23): 230401.
 - [6] WANG Z, HADFIELD S, ZHANG J, et al. Quantum approximate optimization algorithm for maxcut: A fermionic view[J]. *Physical Review A*, 2018, 97(2): 1-13.
 - [7] YAMAMOTO Y, LELEU T, GANGULI S, et al. Coherent Ising machines-quantum optics and neural network perspectives[J]. *Applied Physics Letters*, 2020, 117(16): 160501.
 - [8] FINNILA A B, GOMEZ M A, SEBENIK C, et al. Quantum annealing; a new method for minimizing multidimensional functions[J]. *Chemical Physics Letters*, 1994, 219(5): 343-348.
 - [9] MCCLEAN J R, ROMERO J, BABBUSCH R, et al. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms[J]. *New Journal of Physics*, 2016, 18(2): 023023.
 - [10] BAUER B, BRAVYI S, MOTTA M, et al. Quantum algorithms for chemistry and quantum materials science[J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(22): 12685-12717.
 - [11] PERUZZO A, MCCLEAN J, SHADBOLT P, et al. A variational eigenvalue solver on a quantum processor[J]. *Nature Communications*, 2013, 5(1): 4213.
 - [12] HEMPEL C, MAIER C, ROMERO J, et al. Quantum chemistry calculations on a trapped-ion quantum simulator[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(3): 031022.
 - [13] O'MALLEY P, BABBUSCH R, KIVLICHAN I D, et al. Scalable quantum simulation of molecular energies[J]. *Physical Review X*, 2016, 6(3): 031007.
 - [14] NIELSEN M A, CHUANG I L. Quantum computation and quantum information[M]. Cambridge University Press, 2000.
 - [15] JORDAN P, WIGNER E. Über das Paulische Äquivalenzverbot[J]. *Zeitschrift für Physik*, 1928, 47: 631-651.
 - [16] FELLNER M, MESSINGER A, ENDER K, et al. Applications of universal parity quantum computation[J]. *Physical Review A*, 2022, 106(4): 042442.
 - [17] TRANTER A, SOFIA S, SEELEY J. The Bravyi-Kitaev transformation: properties and applications[J]. *International Journal of Quantum Chemistry*, 2015, 115(9): 1431-1441.
 - [18] SETIA K, WHITFIELD J D. Bravyi-Kitaev superfast simulation of electronic structure on a quantum computer[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2018, 148(16): 164104.
 - [19] FLETCHER R, REEVES C M. Function minimization by conjugate gradients[J]. *The Computer Journal*, 1964, 7(2): 149-154.
 - [20] ANDREI N. Another hybrid conjugate gradient algorithm for unconstrained optimization[J]. *Numerical Algorithms*, 2008, 47(2): 143-156.
 - [21] DAI Y H, YUAN Y. An efficient hybrid conjugate gradient method for unconstrained optimization[J]. *Annals of Operations Research*, Springer, 2001, 103(1): 33-47.
 - [22] MA Y, ZHANG N, LI J. Improved sequential least squares programming-driven feasible path algorithm for process optimization[J]. *Computer Aided Chemical Engineering*, 2022, 51: 1279-1284.
 - [23] POWELL M J D. A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation[J]. *Advances in Optimization and Numerical Analysis*, 1994, 275: 51-67.
 - [24] SPALL J C. An overview of the simultaneous perturbation method for efficient optimization[J]. *Johns Hopkins APL Technical Digest*, 1998, 19(4): 482-492.
 - [25] RABI I I. On the process of space quantization[J]. *Physical Review*, 1936, 49(4): 324-328.
 - [26] RABI I I. Space quantization in a gyrating magnetic field[J]. *Physical Review*, 1937, 51(8): 652-654.
 - [27] JAYNES E T, CUMMINGS F W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser[J]. *IEEE*, 1963, 51(1): 89-109.
 - [28] KOCKUM F A, MIRANOWICZ A, DELIBERATO S, et al. Ultrastrong coupling between light and matter[J]. *Nature Review Physics*, 2019, 1(1): 19-40.
 - [29] SAWAYA N P, MENKE T, KYAW T H, et al. Resource-efficient digital quantum simulation of d-level systems for photonic, vibrational, and spin-s Hamiltonians[J]. *NPJ Quantum Information*, 2020, 6(1): 1-13.
 - [30] WIERSEMA R, ZHOU C, SEREVILLE Y, et al. Exploring entanglement and optimization within the Hamiltonian variational ansatz[J]. *Physical Review X*, 2020, 1(2): 020319.
 - [31] WECKER D, HASTINGS M B, TROYER M. Progress towards practical quantum variational algorithms[J]. *Physical Review A*, 2015, 92(4): 042303.
 - [32] NAKANISHI K M, MITARAI K, FUJII K. Subspace-search variational quantum eigensolver for excited states[J]. *Physical Review Research*, 2019, 1(3): 033062.