

# 基于变分量子虚时演化和 UCC Ansatz 的 基态求解器



储贻达, 徐 维, 周彦桦, 张学锋\*

(重庆大学物理学院 重庆 沙坪坝区 401331)

**【摘要】**对于量子多体体系, 其基态的求解十分重要。变分量子本征求解器 VQE 是一种基于量子计算的变分基态求解算法, 由于其需要结合量子电路和经典的变分算法, 使得量子电路的复杂性和变分算法的有效性显得极其重要。针对量子分子体系, 提出了一种变分基态求解器。运用单电子约化密度矩阵分析得到在自然分子轨道表象下的电子轨道占据数, 根据占据数大小简化了体系哈密顿量和相应的 UCC ansatz 线路。并运用变分量子虚时演化算法替代 VQE 中常用的梯度算法, 因此不易受到参数空间的梯度分布的影响, 使得变分过程收敛更快, 更具鲁棒性。

**关键词** 量子化学; 量子电路; 量子计算; 变分基态求解器; 变分量子虚时演化  
**中图分类号** O413 **文献标志码** A **doi**:10.12178/1001-0548.2022429

## Ground State Solver Based on Variational Quantum Imaginary Time Evolution and UCC Ansatz

CHU Yida, XU Wei, ZHOU Yanhua, and ZHANG Xuefeng\*

(Department of Physics, Chongqing University Shapingba Chongqing 401331)

**Abstract** In the quantum many-body system, the calculation of the ground state is the key target problem. Variational quantum eigensolver (VQE) is a variational ground state solution algorithm based on quantum computation. However, since it requires combining quantum circuit and classical variational algorithm, the complexity of the quantum circuit and the choice of variational algorithm becomes extremely important. This paper focuses on quantum molecular systems and proposes a variational ground state solver. It uses the single-electron reduced density matrix analysis to obtain the number of electron occupations under the appearance of natural molecular orbitals. According to the number of occupations, the Hamiltonian of the system and the corresponding unitary couple cluster (UCC) ansatz circuit are greatly simplified. Secondly, the variational quantum imaginary time evolution algorithm is used to replace the commonly used gradient algorithm in VQE, which is not easily influenced by the gradient distribution of the parameter space, causing the variational process to converge more quickly and robustly.

**Key words** quantum chemistry; quantum circuit; quantum computation; variational ground state solver; variational quantum imaginary time evolution

量子计算能降低算法的时间复杂度, 有望大幅提升算力。然而, 就目前而言, 大量量子比特纠缠在技术上仍面临巨大挑战。因此, 在相当长的一段时间内, 量子计算机的下一步发展可能更倾向于有一定噪声的中型量子计算机, 其对应的算法为嘈杂中型量子算法 (noisy medium-scaled quantum algorithm, NISQ)<sup>[1-2]</sup>。其量子比特数有限, 没有可靠的纠错方案, 因此存在一定的噪声, 在这种设备

上, 某些经典量子混合算法可能具有巨大优势。经典量子混合算法是将算法的一部分运行在经典计算机上, 其他部分运行在量子计算机上, 要在 NISQ 上具有优势就要求算法不需要太多的量子比特, 且能容忍一定噪声。变分量子本征求解器 (variational quantum eigensolver, VQE) 正是这样一类算法<sup>[3]</sup>。

VQE 在量子计算机编码波函数拟设 $|\psi\rangle$ , 再用

收稿日期: 2022-12-25; 修回日期: 2023-01-05

基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (11874094, 12274046); 重庆市教育委员会高等教育教学改革研究项目 (223020)

作者简介: 储贻达 (1999-), 男, 主要从事强关联体系的数值计算方法方面的研究。

\*通信作者: 张学锋, Email: zhangxf@cqu.edu.cn

经典计算机优化 $|\psi\rangle$ 中的变分参数, 从而通过降低哈密顿量 $H$ 的期望达到计算最小本征值 $E_0$ 的目的<sup>[4]</sup>。当利用变分原理计算分子或材料的基态时, 在经典计算机上会遇到多体波函数随系统大小指数增大导致无法精确模拟的问题。但是, 由于 VQE 对于系统基态的拟设是在量子计算机上完成的, 其时间复杂度仅是多项式级的。并且, 作为变分算法, 其对于噪声具有一定的抵抗能力。当量子计算机硬件进一步提高可纠缠量子比特数量, 或减少噪声后, VQE 算法有望使 NISQ 呈现出更强的算力, 完成量子计算机发展的阶段性目标。VQE 算法已经通过离子阱量子计算机实现了对水的基态能的计算<sup>[5]</sup>, 激发态 VQE 则用于研究多体局域化<sup>[6]</sup>, 多态收缩 VQE 则用于研究电子跃迁过程<sup>[7]</sup>。

此外, VQE 算法在 NISQ 上有望解决量子化学中一些较大分子的基态问题, 而传统算法由于原子数过多, 希尔伯特空间太大, 无法在经典计算机上精确求解。但随着分子体系的增大, VQE 方法所需的量子线路的复杂度和变分参数的数目也会随之增大, 导致 VQE 算法的收敛速度及有效性受到影响。目前有一些开源平台上集成了 VQE, 可以直接在它们的函数库上完成 VQE 的模拟。本文在 mindquantum 平台<sup>[8]</sup>上基于 VQE 尝试使用变分量子虚时演化算法来更新参数, 并结合优化 UCC (unitary couple cluster) 拟设来设计量子线路, 构造一种有效快速的量子基态能求解器。

## 1 表象选择

为了方便表示哈密顿量, 需要选择一个合适的表象, 因为在合适的表象下处理所需要考虑的希尔伯特空间的维度会大大降低, 从而大幅降低计算所需的资源消耗。通常采取的表象有: STO、GTO、STO-nG 等<sup>[9]</sup>。对于小分子而言, STO-3G 是最广泛使用的表象。虽然 STO-3G 是最普适的一组基矢, 但是针对特定的分子而言, 肯定有着比 STO-3G 更加合适的表象。为了得到这个表象, 本文对哈密顿量进行预处理。

首先使用如 CCSD(coupled cluster single and double excitation)<sup>[10]</sup>之类的经典方法得到体系的单电子约化密度矩阵 $\rho$ ,  $\rho$ 是一个 $n \times n$ 的矩阵,  $n$ 是分子轨道的数目。为了消减活跃空间 (active space) 的大小, 对单电子约化密度矩阵进行对角化:

$$\rho = \mathbf{V} \mathbf{D} \mathbf{V}^\dagger \quad (1)$$

这样就完成了从 STO-3G 表象到新的基底表象

的变换。将新的基底称之为自然分子轨道 (natural molecular orbitals)<sup>[11]</sup>,  $\mathbf{V}$  是基底间的变换矩阵,  $\mathbf{D}$  是在自然分子轨道下的单电子约化密度矩阵。当然, 借助幺正变换 $\mathbf{V}$  分子哈密顿量也需要在自然分子轨道表象中写出。对于对角矩阵 $\mathbf{D}$ , 其对角元 $D_{ii}$ 称之为自然轨道占据数 (natural orbital occupation numbers), 它的大小就表示该轨道下的平均占据数。如果对角元大于某个阈值 $\chi_{\max}$ , 则可以视为该自然轨道必然被占据。反之如果对角元小于某个阈值 $\chi_{\min}$ , 则可以视为该自然轨道零占据。所以, 在接下来的量子基态能变分求解中, 本文只保留 $D_{ii} \in [\chi_{\min}, \chi_{\max}]$ 所对应的轨道。这样一来, 活跃空间的维度便降低了。这使得在后续的变分算法中, 不仅简化了所需的哈密顿量的项数, 而且变分参数和量子线路的比特数也能够得到有效的减少。

## 2 UCC 拟设

### 2.1 基本原理

UCC 来自经典的 couple cluster ansatz, 最早出现于核物理的计算, 后广泛应用于量子化学的计算<sup>[12]</sup>, 它是一种对于多体波函数形式的假设, 具体表示为:

$$|\text{CC}\rangle = e^T |\phi\rangle \quad (2)$$

式中,  $T = \sum c_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum c_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l + \dots$ , 系数 $c$ 为实数;  $|\phi\rangle$ 为参考态, 通常为通过一些近似求出的接近基态的解。如在合适的量子化学基组下从低能轨道到高能轨道填充的态 $|11\dots 00\dots\rangle$ , 称为 Hartree-Fock 态。而基于这种形式的参考态, 可以对 $T$ 的形式有所启发。占主导的应该是将粒子从填充为 1 的轨道转移到填充为 0 的轨道的项。因此可以只保留参考态占据轨道 (OO) 的湮灭算符和虚轨道 (VO) 的产生算符。则 $T$ 简化为:

$$T = \sum_{i \in \text{VO}, j \in \text{VO}} c_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{i < j \in \text{VO}, k < l \in \text{OO}} c_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l + \dots \quad (3)$$

在这个拟设下, 通过梯度下降之类的方法优化参数 $c$ , 可以得到高精度的结果。

### 2.2 量子线路中的实现

量子逻辑门是幺正的, 因此, 实现的 $e^T$ 也是幺正的, 所以:

$$|\text{UCC}\rangle = e^{\mathbf{T}-\mathbf{T}^\dagger} |\phi\rangle \quad (4)$$

即 unitary couple cluster ansatz。从算符上来

说, 它只包含费米子产生湮灭算符。

在量子计算机上编码费米子系统可以采用 Jordan-Wigner 变换<sup>[13-14]</sup>, 将产生湮灭算符表示如下:

$$a^\dagger = \prod_{j>i} \sigma_j^z \otimes \frac{1}{2} \sigma_i^- \otimes \prod_{j<i} \mathbb{I} \quad (5)$$

$$a = \prod_{j>i} \sigma_j^z \otimes \frac{1}{2} \sigma_i^+ \otimes \prod_{j<i} \mathbb{I} \quad (6)$$

将  $e^{T-T^\dagger}$  Trotter-Suzuki 分解, 为了能在量子线路上实现, 应分解成么正算符的乘积:

$$e^{(T-T^\dagger)/N} = e^{\left(\frac{c_{ij}}{N}(a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i)\right)} \cdot e^{\left(\frac{c_{ijkl}}{N}(a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l - a_l^\dagger a_k^\dagger a_j a_i)\right)} \dots \quad (7)$$

式中,  $N \rightarrow \infty$ ; 对于形如  $e^{\left(\frac{c_{ijkl}}{N}(a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l - a_l^\dagger a_k^\dagger a_j a_i)\right)}$  的项, Jordan-Wigner 变换后, 先由  $\sigma^+ \sigma^z = -\sigma^+$ ,  $\sigma^- \sigma^z = \sigma^-$ ,  $\sigma^z \sigma^+ = \sigma^+$ ,  $\sigma^z \sigma^- = -\sigma^-$ ,  $\sigma^z \sigma^z = 1$  将同轨道上的  $\sigma^z$  处理掉, 再用  $\sigma^\pm = \sigma^x \pm i\sigma^y$  展开, 与共轭项相减后, 可以写成如下形式:

$$e^{\left(-i\frac{\theta_1}{2}\sigma_{b_1}^{a_1}\sigma_{b_2}^{a_2}\sigma_{b_3}^{a_3}\sigma_{b_4}^{a_4} - i\frac{\theta_2}{2}\sigma_{b_5}^{a_5}\sigma_{b_6}^{a_6}\sigma_{b_7}^{a_7}\sigma_{b_8}^{a_8} \dots\right)} \quad (8)$$

式中,  $\theta_n$  为一个实数;  $a_n \in \{x, y, z\}$  标记不同的泡利矩阵;  $b_n$  为互不相同的各个轨道。其中不同项之间, 同轨道的算符必然同为  $\sigma^z$  或都不为  $\sigma^z$ , 因此它们之间的对易关系只取决于  $\sigma^x \sigma^y$ 。计算可得到上式中任意泡利算符链的对易<sup>[12]</sup>:

$$[P_A, P_B] = (-1)^{n_y^A - c_y} \left[ 1 - (-1)^{n_y^B n_y^A} \right] (-i)^{N - c_x - c_y} P \quad (9)$$

式中,  $n_y^A$ 、 $n_y^B$  为  $\sigma^y$  在  $A$ 、 $B$  链的数量;  $c_x$  为一个轨道上同为  $\sigma^x$  的数量;  $c_y$  为一个轨道上同为  $\sigma^y$  的数量;  $N$  为链的长度减去  $\sigma^z$  的数量;  $P$  为某算符。注意到  $\sigma^y$  的数量必为奇数 (由于是么正的, 系数必须为虚数, 而  $i$  只来源于  $i\sigma^y$ ), 因此  $n_y^B - n_y^A$  为偶数,  $[P_A, P_B] = 0$ 。因此可以无误差地进一步分解为  $e^{\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_{b_1}^{a_1}\sigma_{b_2}^{a_2}\sigma_{b_3}^{a_3}\sigma_{b_4}^{a_4}\right)}$  的乘积, 这样的算符就可以用量子逻辑门来实现了。

至于具体的量子线路实现, 如  $e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_3^z}$  可以通过形如图 1a 的线路图实现。如果希望将其中一个  $\sigma^z$  换成  $\sigma^x$  得到  $e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_1^z\sigma_2^z\sigma_3^x}$ , 只需在前后加上 Hadamard 门, 如图 1b 所示。而如果希望将其中一个  $\sigma^z$  换成  $\sigma^y$  得到  $e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_1^z\sigma_2^y\sigma_3^z}$ , 只需在前后加上  $R_x(\pi/2)$ , 如图 1c 所示。另外, 在将  $e^{T-T^\dagger}$  逻辑门作用上去之前, 用  $X$  门将前面一部分中分析得到的占据轨道的  $|0\rangle$  态翻转成  $|1\rangle$  态, 得到参考态, unitary couple cluster ansatz 的量子电路就搭建成了。

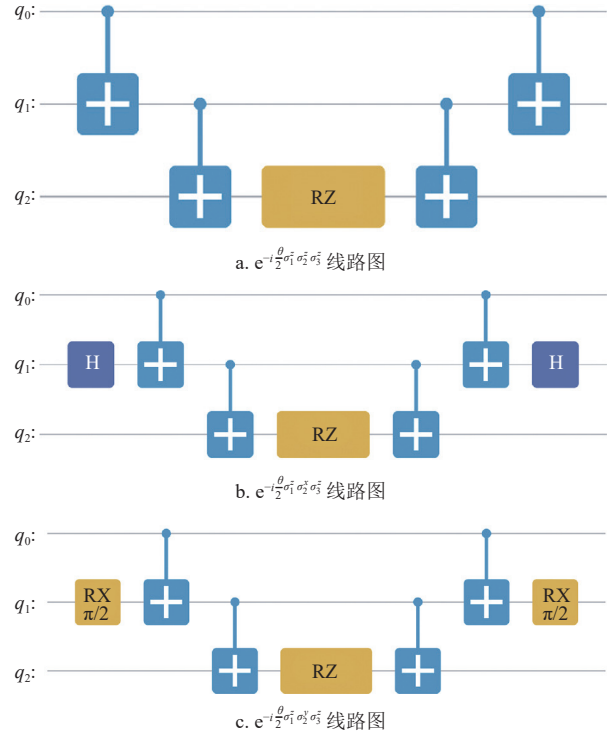


图 1 量子线路图

## 2.3 优化

在文献 [15] 中,  $T$  只保留两体项和四体项, 根据参考态, 将轨道分为占据道和虚轨道的算法称为 UCCSD (unitary couple cluster single and double), 不分轨道的称为 UCCGSD (unitary couple cluster general single and double)。UCCSD 的线路深度为  $(N-\eta)^2\eta$ , 而 UCCGSD 的线路深度为  $N^3$ ,  $\eta$  是电子数,  $N$  是轨道数, 往往是  $\eta$  的几倍, 因此 UCCSD 需优化的参数大量减少, 线路深度也大大减少。

此外还应考虑自旋的对称性, 同一空间轨道因自旋分为自旋上下两个轨道, 但这两个轨道是完全对称的, 因此  $e^{T-T^\dagger}$  不应该破坏对称性。如  $c_{i\uparrow j\downarrow k\uparrow l\downarrow}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{j\downarrow}^\dagger a_{k\uparrow} a_{l\downarrow} - h.c.)$  翻转自旋后得到  $c_{i\uparrow j\downarrow k\uparrow l\downarrow}(a_{i\downarrow}^\dagger a_{j\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow} a_{l\uparrow} - h.c.)$ , 而这一项原来的系数为  $c_{i\downarrow j\uparrow k\downarrow l\uparrow}$ ,  $e^{T-T^\dagger}$  整体应保持不变, 所以有:

$$c_{i\uparrow j\downarrow k\uparrow l\downarrow} = c_{i\downarrow j\uparrow k\downarrow l\uparrow} \quad (10)$$

需优化的系数数量减少为之前的一半。除此之外, 还应注意类似  $c_{i\uparrow j\downarrow k\downarrow l\downarrow}(a_{i\uparrow}^\dagger a_{j\downarrow}^\dagger a_{k\downarrow} a_{l\downarrow} - h.c.)$  这种改变总自旋的项应该去掉, 这是因为如果哈密顿量自旋守恒, 这种项不会使能量降低。

## 3 变分虚时演化算法

除了前面所提到的基于 UCC 的 ansatz 线路的

构建, 还需要一个有效的算法来完成变分过程以得到分子的基态。在传统的 VQE 算法中常常使用一些梯度算法达到这一目的, 而本文运用虚时演化的方法更好地完成了变分过程。

虚时演化方法是研究量子体系的强大工具, 除了可以视为配分函数研究系统的热力学统计性质外, 还可以用来计算多体系统 Hamiltonian 的基态问题。如对于一个分子体系, 如果给定一个任意初始态 $|\psi\rangle$ , 那么其虚时演化态可以定义为:

$$|\psi(\tau)\rangle = A(\tau)e^{-H\tau}|\psi(0)\rangle \quad (11)$$

式中,  $A(\tau) = 1/\sqrt{\langle\psi(0)|e^{-2H\tau}|\psi(0)\rangle}$  是归一化系数。如果初始态与基态有一个非零的投影, 那么在  $\tau \rightarrow \infty$  时演化的末态将趋于  $H$  的基态。正是由于这一特性, 可以选取合适的初始态, 通过模拟其虚时演化的过程来求解体系的基态波函数和能量。尽管在经典计算机上实现这一算法来求解多体系统的基态能是可行的, 但是随着体系尺寸的扩大, 内存和计算时间的需求都会指数级增长。而由于量子计算的特性, 量子计算机可高效模拟大尺寸的量子体系, 但如何在量子线路上模拟这种非幺正的虚时演化是一个难题。文献 [16] 提出了一种基于变分过程的 VITE (variational imaginary time evolution) 算法, 使得借助量子线路的形式来完成虚时演化的过程成为可能。

VITE 算法设想在量子线路中, 运用含参的量子态  $|\phi(\theta(\tau))\rangle$  模拟得到演化态, 其中  $\theta(\tau) = \{\theta_1(\tau), \theta_2(\tau), \dots, \theta_N(\tau)\}$ 。而这样一来就可以运用量子门在量子线路上制备这一含参态。具体做法是将一系列的量子门

$$V(\theta) = U_N(\theta_N) \cdots U_k(\theta_k) \cdots U_1(\theta_1) \quad (12)$$

作用在初始态零态  $|\bar{0}\rangle$  上, 即  $|\phi(\theta)\rangle = V(\theta)|\bar{0}\rangle$ 。这里的  $V(\theta)$  也就是 ansatz 线路。如果对含参的演化态运用麦克阿兰变分原理 (McLachlan's variational principle)<sup>[17-18]</sup>:

$$\delta\|(\partial/\partial\tau + H - E_\tau)|\psi(\tau)\rangle\| = 0 \quad (13)$$

式中,  $\|\rho\| = \text{Tr}[\sqrt{\rho\rho^\dagger}]$  表示量子态  $\rho$  的迹范数;  $E_\tau = \langle\psi(\tau)|H|\psi(\tau)\rangle$ 。同时, 基于变分原理, 将  $|\psi(\tau)\rangle$  替换为  $|\phi(\tau)\rangle = |\phi(\theta(\tau))\rangle$ 。会得到:

$$\frac{\partial\|(\partial/\partial\tau + H - E_\tau)|\phi(\tau)\rangle\|}{\partial\theta_i} = \sum_j A_{ij}\dot{\theta}_j - C_i = 0 \quad (14)$$

即

$$\sum_j A_{ij}\dot{\theta}_j = C_i \quad (15)$$

其中:

$$A_{ij} = \Re\left(\frac{\partial\langle\phi(\tau)|}{\partial\theta_i} \frac{\partial|\phi(\tau)\rangle}{\partial\theta_j}\right) \quad (16)$$

$$C_i = -\Re\left(\frac{\partial\langle\phi(\tau)|}{\partial\theta_i} H|\phi(\tau)\rangle\right) \quad (17)$$

然后, 从式 (15) 中可得到在  $\tau$  时刻参数的导数  $\dot{\theta}(\tau) = A^{-1}(\tau) \cdot C(\tau)$ 。在过一个短暂的  $\delta\tau$  的时间演化之后, 可近似得到:

$$\theta(\tau + \delta\tau) \simeq \theta(\tau) + \dot{\theta}(\tau)\delta\tau = \theta(\tau) + A^{-1}(\tau) \cdot C(\tau)\delta\tau \quad (18)$$

如果将总的演化时间  $\tau_{\text{total}}$  分成  $N$  份, 即  $\tau_{\text{total}} = N\delta\tau$ 。将上述操作重复  $N$  次, 直至最终的  $|\phi(\tau)\rangle$  收敛到基态, 进而得到基态能  $E_{\text{Ground}} = \langle\psi(\tau)|\hat{H}|\psi(\tau)\rangle$ 。

总之, VITE 算法运用参数化的 ansatz 线路来得到含参的演化态, 借助麦克阿兰变分原理将虚时演化的过程转化为一个在量子线路上实现的演化过程, 并最终给出了 ansatz 线路的参数更新所需满足的要求。

## 4 算法结果

本文运用上述算法对 LiH 分子基态能进行求解。首先选取键长为 4.0 埃的 LiH 分子, 借助 openfermionpyscf 函数库<sup>[19]</sup> 得到其在 STO-3G 基矢下的哈密顿量  $H$  以及通过 FCI 方法得到的基态能的精确解  $E_{\text{FCI}}$ 。按照第二章所说的方法, 分析单电子约化密度矩阵  $\rho$ , 设置自然轨道占据数的最小阈值  $\chi_{\text{min}} = 10^{-4}$  和最大阈值  $\chi_{\text{max}} = 1.9995$ 。经过预处理后, 将原有哈密顿量从 6 个分子轨道简化为只有 2 个分子轨道。借助 Mindquantum 函数库<sup>[8]</sup> 构建一个 UCCSD 的量子线路作用于活跃空间占据的参考态上。

经过分子哈密顿量简化后得到的量子线路深度大大降低, 并且所需要变分的参数和量子比特数也大幅下降, 如表 1 所示。接下来运用梯度下降算法来完成变分求解基态。图 2 给出了每一步变分迭代的能量和  $E_{\text{FCI}}$  能量的比值。可以看到, 虽然运用简化后的哈密顿量得到的 UCCSD ansatz 的线路来完成基态能变分求解, 但与简化前的结果相比, 并没有在最终的能量上损失太多精度。此外, 对于简化

前的变分求解, 在合适的区间内学习率的大小与算法的收敛速度成正比。但是过大的学习率会给参数学习过程带来波动, 这是因为梯度下降算法会随增大而失去方向性, 使得参数的优化朝着错误的方向进行。而简化后得到的 UCCSD 线路所需优化的参数数目大幅下降, 使得变分算法的参数空间更简单, 因此可以在梯度下降的时候选取更大的学习率。这样不仅使得每一步迭代所需的计算时间减少, 且迭代收敛更快。但由于梯度算法的限制, 本文发现更大的学习率仍然会导致波动。以上的结果验证了在选取合适的截断阈值  $\chi_{\min}$  和  $\chi_{\max}$  情况下, 可使用更简单的量子线路更快完成基态变分求解。

表 1 简化哈密顿量前后的 ansatz 线路复杂度对比

ansatz 线路	总量子门数	参数门数	参数个数	比特数
简化前	15 172	640	44	12
简化后	206	12	2	4

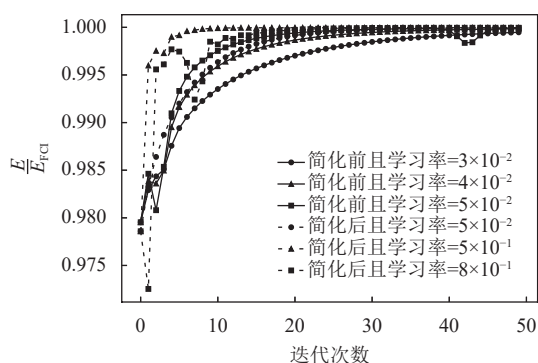


图 2 简化哈密顿量前后的收敛结果

除此之外, 针对上述的 LiH 分子, 本文还基于 Mindquantum 函数库实现变分虚时演化算法结合简化后的 UCC ansatz 线路来完成分子基态的求解。图 3 给出了 VITE 算法在不同的  $\delta\tau$  的情况下, 每一步变分迭代的能量与  $E_{\text{FCI}}$  能量的比值以及梯度下降算法所得到的比值。结果显示, VITE 算法不仅可以有效计算得到分子的基态能, 还可以比梯度下降算法更快收敛到基态。由于 VITE 基于虚时演化的原理, 所以基于 VITE 算法得到的每一步参数的更新具有明确的方向性, 不再受参数空间的梯度分布的影响。这使得即使用更大的更新步长即  $\delta\tau$  来减少收敛所需的更新次数, 也不会导致收敛过程产生波动。

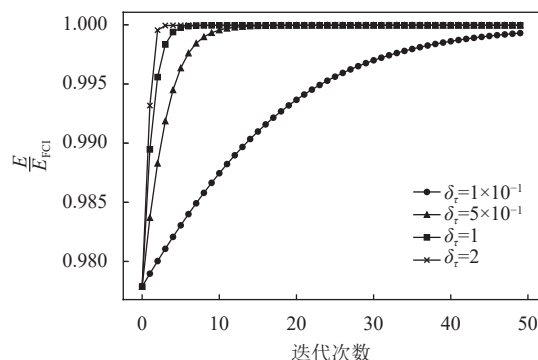


图 3 运用 VITE 算法更新参数的收敛结果

## 5 结束语

本文针对量子化学中的分子体系基态求解问题, 提出了一种基于 VQE, 将单电子约化密度矩阵分析、变分虚时演化和 UCC ansatz 量子线路相结合的变分量子基态求解器。该求解器通过分析分子体系的活跃空间简化了体系的哈密顿量, 进而优化了 UCC ansatz 线路的构造。并且在传统 VQE 算法基础上引入变分虚时演化算法, 使其可以更快地收敛得到基态。该变分基态求解器的算法框架具有普适性, 可以将其扩展到更多的量子多体体系的基态求解问题上, 进而探究其中的物理特性。

## 参考文献

- [1] PRESKILL J. Quantum computing in the NISQ era and beyond[J]. *Quantum*, 2018, 2: 79.
- [2] BROOKS M. Beyond quantum supremacy: The hunt for useful quantum computers[J]. *Nature*, 2019, 574(7776): 19-22.
- [3] TILLY J, CHEN H, CAO S, et al. The variational quantum eigensolver: A review of methods and best practices[J]. *Physics Reports*, 2022, 986: 1-128.
- [4] PERUZZO A, MCCLEAN J, SHADBOLT P, et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor[J]. *Nature Communications*, 2014, 5(1): 1-7.
- [5] NAM Y, CHEN J S, PISENTI N C, et al. Ground-state energy estimation of the water molecule on a trapped-ion quantum computer[J]. *NPJ Quantum Information*, 2020(33): 1-6.
- [6] LIU S, ZHANG S X, HSIEH C Y, et al. Probing many-body localization by excited-state VQE[EB/OL]. (2022-08-10). [https://doi.org/10.48550/10.48550/2111.13719](https://doi.org/10.48550/10.48550/10.48550/2111.13719).
- [7] 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.
- [8] MindQuantum Developer. MindQuantum, version 0.6.0 march[EB/OL]. [2022-12-01]. <https://gitee.com/mindspore/mindquantum>.
- [9] HEHRE W J, STEWART R F, POPLER J A. self -

- consistent molecular-orbital methods. i. use of gaussian expansions of slater-type atomic orbitals[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1969, 51(6): 2657-2664.
- [10] HELGAKER T, JORGENSEN P, OLSEN J. Molecular electronic-structure theory[M]. New York: John Wiley & Sons, 2013.
- [11] MCARDLE S, ENDO S, ASPURU-GUZI K A, et al. Quantum computational chemistry[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2020, 92(1): 015003.
- [12] ANAND A, SCHLEICH P, ALPERIN-LEA S, et al. A quantum computing view on unitary coupled cluster theory[EB/OL]. (2022-03-03). <https://doi.org/10.48550/arxiv.2109.15176>.
- [13] WIGNER E P. The collected works of eugene paul wigner[M]. Berlin: Springer, 1993.
- [14] NIELSEN M A. The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform[EB/OL]. [2022-12-01]. <https://www.academia.edu/8028096>.
- [15] LEE J, HUGGINS W J, HEAD-GORDON M, et al. Generalized unitary coupled cluster wave functions for quantum computation[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2018, 15(1): 311-324.
- [16] MCARDLE S, JONES T, ENDO S, et al. Variational ansatz-based quantum simulation of imaginary time evolution[J]. *NPJ Quantum Information*, 2019(75): 1-6.
- [17] MCLACHLAN A D. A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation[J]. *Molecular Physics*, 1964, 8(1): 39-44.
- [18] BROECKHOVE J, LATHOUWERS L, KESTELOOT E, et al. On the equivalence of time-dependent variational principles[J]. *Chemical Physics Letters*, 1988, 149(5-6): 547-550.
- [19] MCCLEAN J R, RUBIN N C, SUNG K J, et al. OpenFermion: The electronic structure package for quantum computers[J]. *Quantum Science and Technology*, 2020, 5(3): 034014.

编辑 蒋 晓