

Итеративная квантовая оценка фазы с использованием квантового процессора IBM

Н.А.Журавлев, И.И.Бетеров

С помощью двух кубитов квантового процессора IBM реализован элементарный алгоритм квантовой оценки фазы, основанный на модифицированной схеме Китаева. Этот алгоритм включает в себя адиабатическое приготовление начального состояния, контролируемый фазовый сдвиг с учетом результатов предыдущих измерений состояний кубита, а также однократное измерение квантового состояния кубита для получения каждого значащего бита измеряемой фазы. Для нахождения корректной последовательности битов применялась классическая коррекция ошибок, что позволило устранить влияние ограниченной точности двухкубитовых вентиляей.

Ключевые слова: квантовый процессор, квантовая оценка фазы, модифицированная схема Китаева, двухкубитовый вентиль.

1. Введение

Квантовое моделирование элементарных физических процессов представляет интерес для решения множества задач физики многочастичных квантовых взаимодействий, сложность которых экспоненциально возрастает с увеличением числа взаимодействующих частиц [1, 2]. Для выполнения квантового моделирования используется квантовый процессор, способный выполнять квантовое преобразование Фурье, на котором основан квантовый алгоритм оценки фазы [3]. Квантовая оценка фазы является важным строительным блоком для различных квантовых алгоритмов. Например, она используется в алгоритме Шора для разложения чисел на простые множители, в квантовой химии для моделирования молекул и в алгоритме Гровера [2]. Тем не менее выполнение квантовых алгоритмов на современных квантовых процессорах ограничено низкой точностью квантовых вентиляей. В связи с этим большой интерес вызывает экспериментальная реализация простейших квантовых алгоритмов, которая позволяет оценить возможности квантовых процессоров для решения элементарных физических задач и перспективы достижения квантового превосходства.

В последние годы наблюдается значительный прогресс в реализации квантовых вычислений на различных физических платформах. Среди них выделяются переходы Джозефсона в сверхпроводниках [4–6], которые были выбраны в качестве основы для квантовых процессоров

крупнейших ИТ-компаний (IBM, Google, Microsoft). В то же время успехи достигнуты и для альтернативных физических систем – ультрахолодных ионов [7, 8], фотонов [9], ультрахолодных нейтральных атомов [10–13]. Для анализа перспектив выполнения квантовых алгоритмов в таких системах большой интерес представляет сравнение их возможностей с таковыми для сверхпроводящих квантовых процессоров на примере простейших квантовых алгоритмов.

Особый интерес вызывают задачи моделирования молекул [14], включая структуру и свойства отдельных молекул или молекулярных образований. Эта задача может быть сведена к определению энергий различных состояний молекулы, что равносильно поиску собственных состояний и собственных значений унитарного оператора. Фаза унитарного оператора представляется в виде битовой последовательности произвольной длины.

Как правило, квантовая оценка фазы реализуется с использованием обратного квантового преобразования Фурье [3], что позволяет путем однократного измерения состояния квантового регистра найти нужную последовательность битов. Длина измеренной битовой последовательности, определяющая точность измерений, задается размерностью квантового регистра. Альтернативой может служить алгоритм Китаева с единственным контролирующим кубитом [15]. В этом случае в результате последовательных измерений состояний кубита может быть получена битовая последовательность произвольной длины.

Для реализации алгоритма Китаева можно использовать итеративную схему, позволяющую вычислять каждый значащий бит после однократного измерения состояния контролирующего кубита. Затем на следующем шаге последовательности перед измерением осуществляется коррекция фазы кубита с учетом результатов предыдущих измерений. Данная схема была предложена в работе [16]. В [17] проведено численное моделирование итеративной квантовой оценки фазы для идеального квантового процессора, а также для системы из двух взаимодействующих нейтральных атомов, кратко временно

Н.А.Журавлев. Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 13; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2

И.И.Бетеров. Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, Россия, 630090 Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 13; Новосибирский государственный университет, Россия, 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 2; Новосибирский государственный технический университет, Россия, 630073 Новосибирск, просп. Карла Маркса, 20; e-mail: beterov@isp.nsc.ru

возбуждаемых в ридберговские состояния при выполнении двухкубитовых вентилях. Показано, что влияние декогерентизации вследствие конечного времени жизни ридберговских атомов на результат измерения может быть устранено путем многократных измерений состояний контролирующего кубита, что может рассматриваться как классическая коррекция ошибок.

В настоящей работе была реализована итеративная квантовая оценка фазы на квантовом процессоре IBM, а также квантовая оценка фазы на основе квантового преобразования Фурье на примере определения энергии основного состояния молекулы водорода.

2. Алгоритмы квантовой оценки фазы

Общая схема квантовой оценки фазы приведена на рис.1. Используются два квантовых регистра: регистр S (state), в который записывается волновая функция рассматриваемого состояния системы $|\psi\rangle$, и регистр R (readout), необходимый для хранения промежуточной информации и получения значения фазы оператора. Все кубиты регистра R, используемого для измерений, первоначально приготовлены в состоянии $|0\rangle$. После выполнения вентиля Адамара H регистр окажется в суперпозиции всех возможных состояний, обозначаемых как $|n\rangle$.

Регистр S приготовлен в собственном состоянии некоторого унитарного оператора \hat{U} , обозначаемом как $|\psi\rangle$. Пусть φ – фаза оператора \hat{U} , т.е. $\hat{U}|\psi\rangle = \exp(2\pi i\varphi)|\psi\rangle$. Если мы последовательно применяем контролируемым образом операторы вида $\hat{U}_k = \hat{U}^{2^k}$ к регистру S, то в итоге получаем следующее состояние системы:

$$|R\rangle \otimes |S\rangle = \sum_n \exp(2\pi i\varphi n) |n\rangle \otimes |\psi\rangle. \quad (1)$$

Затем выполним обратное квантовое преобразование Фурье FT+ с регистром R и измерим его состояние. Это позволит нам оценить фазу с произвольной точностью. Обратим внимание на то, что измерение состояния регистра проводится однократно.

При использовании этого метода для получения высокой точности измеренного значения фазы необходим регистр достаточно большой размерности. Метод Китаева [15] позволяет решить эту задачу с помощью единственного контролирующего кубита. Схема метода приведена на рис.2. Регистр состоит из одного контролирующего кубита и регистра состояний, в котором записано собственное состояние $|\psi\rangle$ оператора \hat{U} . После выполнения контролируемого унитарного преобразования система из двух кубитов окажется в состоянии

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + \exp(2\pi i\varphi)|1\rangle] \otimes |\psi\rangle.$$

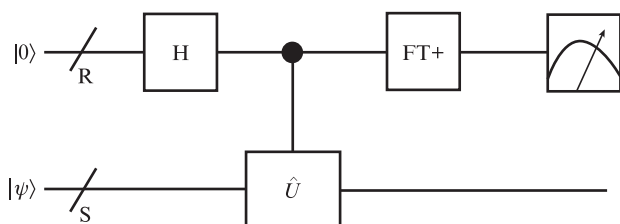


Рис.1. Общая схема квантовой оценки фазы с использованием обратного квантового преобразования Фурье.

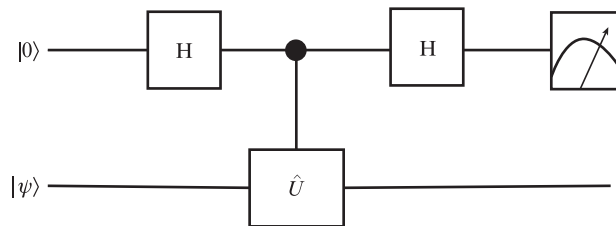


Рис.2. Схема алгоритма Китаева с единственным контролирующим кубитом.

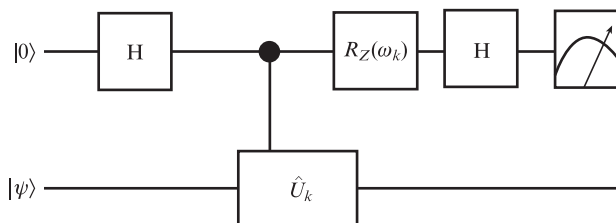


Рис.3. Адаптивная схема оценки фазы.

После вентиля Адамара H система находится в состоянии

$$\frac{1}{2}[1 + \exp(2\pi i\varphi)]|0\rangle|\psi\rangle + \frac{1}{2}[1 - \exp(2\pi i\varphi)]|1\rangle|\psi\rangle. \quad (2)$$

Вероятность обнаружить контролируемый кубит в состоянии «0» есть $P = \cos^2(\pi\varphi)$. Измеряя ее, можно определить фазу φ .

Вместо однократного измерения состояния многокубитового регистра для получения заданной точности измеряемой фазы требуются многократные измерения состояния одного кубита. Следует отметить, что для измерения вероятностей нахождения системы в состоянии $|0\rangle$ или $|1\rangle$ также нужны многократные измерения. Модификация данной схемы, предложенная в работе [16], позволяет определить k -й бит фазы за одно измерение. Схема модифицированного алгоритма Китаева представлена на рис.3. В отличие от рассмотренных ранее методов, измерение начинается с младшего бита фазы. Каждая итерация включает в себя однократное измерение состояния контролирующего кубита. Перед измерением его состояние корректируется для учета результатов предыдущих измерений путем фазового сдвига $R_z(\omega_k)$, т.е. вращения кубита вокруг оси Z на угол ω_k .

3. Экспериментальная квантовая оценка фазы с использованием процессора IBM

Аналогично работе [17] в качестве модельной задачи для квантовой оценки фазы выбрано определение энергии основного состояния молекулы водорода. В соответствии с работой [18] был взят минимальный базисный набор 1s-орбиталей Слэтера – Зенера STO-3G [19]. При расстоянии между ядрами атомов в молекуле водорода 1.4 ат. ед. матрица гамильтониана (в атомных единицах) имеет следующий вид [8]:

$$\hat{H}_{\text{mol}} = \begin{pmatrix} -1.8310 & 0.1813 \\ 0.1813 & -0.2537 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Собственному состоянию гамильтониана $|\psi_\lambda\rangle$ соответствует собственное число λ . Гамильтониан системы $|\hat{H}_{\text{mol}}\rangle$ генерирует унитарный оператор эволюции \hat{U} за время τ :

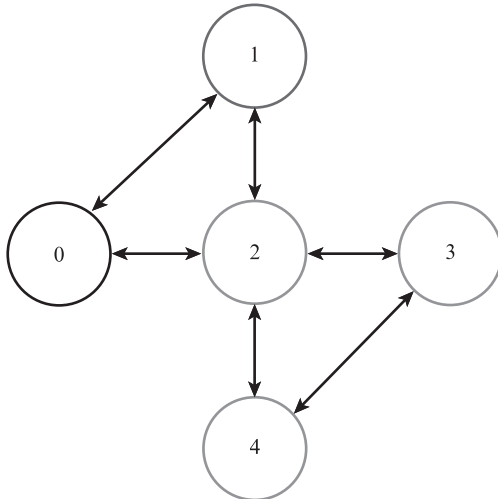


Рис.4. Схема 5-кубитового процессора ibmqx2. Кубиты показаны кружками, а соединения кубитов для реализации двухкубитовых вентиляей – стрелками.

$$\hat{U}|\psi_\lambda\rangle = \exp(-i\hat{H}_{\text{mol}}\tau)|\psi_\lambda\rangle = \exp(2\pi i\varphi)|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle. \quad (4)$$

Измерив фазу собственного числа φ , можно найти собственное значение гамильтониана (энергию молекулы) $E_{\text{meas}} = 2\pi\varphi/\tau$.

Для экспериментальной квантовой оценки фазы в среде IBM Quantum Experience была разработана программа, включающая в себя адиабатическое приготовление начального состояния $|\psi_\lambda\rangle$, аналогичное описанному в работе [17], декомпозицию унитарного оператора эволюции в виде последовательности однокубитовых вращений, измерение конечного состояния кубита и коррекцию фазы контролирующего кубита при последующих измерениях. В настоящее время компания IBM предоставляет доступ к квантовому симулятору, 1-кубитовому, семи 5-кубитовым и одному 15-кубитовому квантовым процессорам [4]. Схема 5-кубитового квантового процессора ibmqx2, использованного в нашей работе, показана на рис.4. Погрешности при выполнении двухкубитовых вентиляей составляют примерно 1.5% [4].

На рис.5 приведены экспериментально измеренные вероятности получения корректного значения каждого бита последовательности, состоящей из 25 значащих битов и задающей фазу унитарного оператора эволюции. Для квантового симулятора вероятность нахождения правильного значения каждого младшего бита отличается

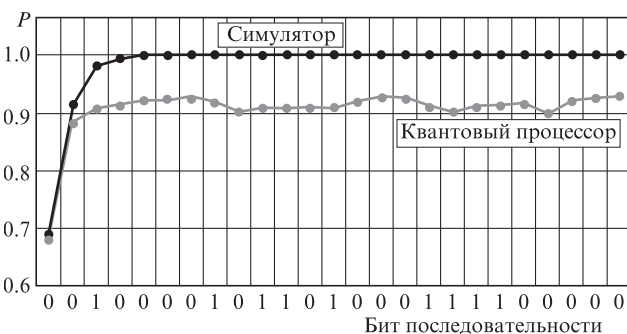


Рис.5. Измеренные вероятности получения корректных значений каждого бита последовательности, задающей фазу оператора эволюции (приведена внизу). Младшие биты находятся слева.

ся от единицы, поскольку в расчетах не могут быть учтены более младшие биты истинного значения фазы (начиная с 26-го). Для квантового процессора ibmqx2 из-за недостаточно высокой точности двухкубитовых вентиляей средняя вероятность получения правильного значения для старших 20 битов последовательности $P = 0.91$. Каждое значение вероятности найдено при усреднении по 1024 измерениям.

Это означает, что корректная последовательность битов при имеющейся точности процессора не может быть получена в результате одного измерения. В то же время выбор наиболее вероятного значения каждого бита при неоднократных измерениях позволяет найти корректное значение приведенной на рис.5 битовой последовательности, задающей фазу.

При выполнении квантовой оценки фазы с использованием квантового обратного преобразования Фурье удалось получить корректное значение фазы только с помощью квантового симулятора. При использовании квантового процессора ibmqx2 найти корректное значение не удалось, что связано с большей чувствительностью данного метода к точности двухкубитовых вентиляей.

4. Ошибка итерационного алгоритма

В работе [16] проведен анализ ошибок, возникающих при итерационном выполнении алгоритма Китаева. В соответствии с принятой в книге Нильсена и Чанга [2] системой обозначений представим фазу φ как последовательность n битов $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ в следующем виде:

$$\varphi = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_n = \frac{\varphi_1}{2} + \frac{\varphi_2}{4} + \dots + \frac{\varphi_n}{2^n}.$$

Из рис.5 видно, что даже для идеального квантового процессора (квантового симулятора) вероятность получения правильного значения младших битов отличается от единицы. Такой проблемы не возникло бы, если бы искомое значение фазы имело вид $\varphi = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_m0000\dots$, при этом число значащих битов m точно совпадает с длиной измеряемой последовательности. В данном случае при моделировании на квантовом симуляторе вероятность нахождения корректного значения равна единице для всех битов последовательности, поскольку нет вклада неучтенных младших битов.

В действительности измеренная последовательность битов $\tilde{\varphi} = 0.\varphi_1\varphi_2\dots\varphi_m0000$ отличается от истинного значения фазы φ на величину, которую можно характеризовать параметром δ , лежащим в диапазоне 0 – 1:

$$\varphi = \tilde{\varphi} + 2^{-m}\delta, \quad 0 \leq \delta < 1. \quad (5)$$

В работе [6] найдена условная вероятность P_k корректного измерения состояния каждого значащего бита при условии, что предыдущие биты были правильно измерены. Эта вероятность определяется значением δ в соответствии с выражением [16]

$$P_k = \cos^2(\pi 2^{k-m-1}\delta). \quad (6)$$

Следовательно, для получения корректной последовательности битов даже для идеального квантового процессора необходимо измерять состояние каждого бита неоднократно. Кроме того, неточность выполнения кванто-

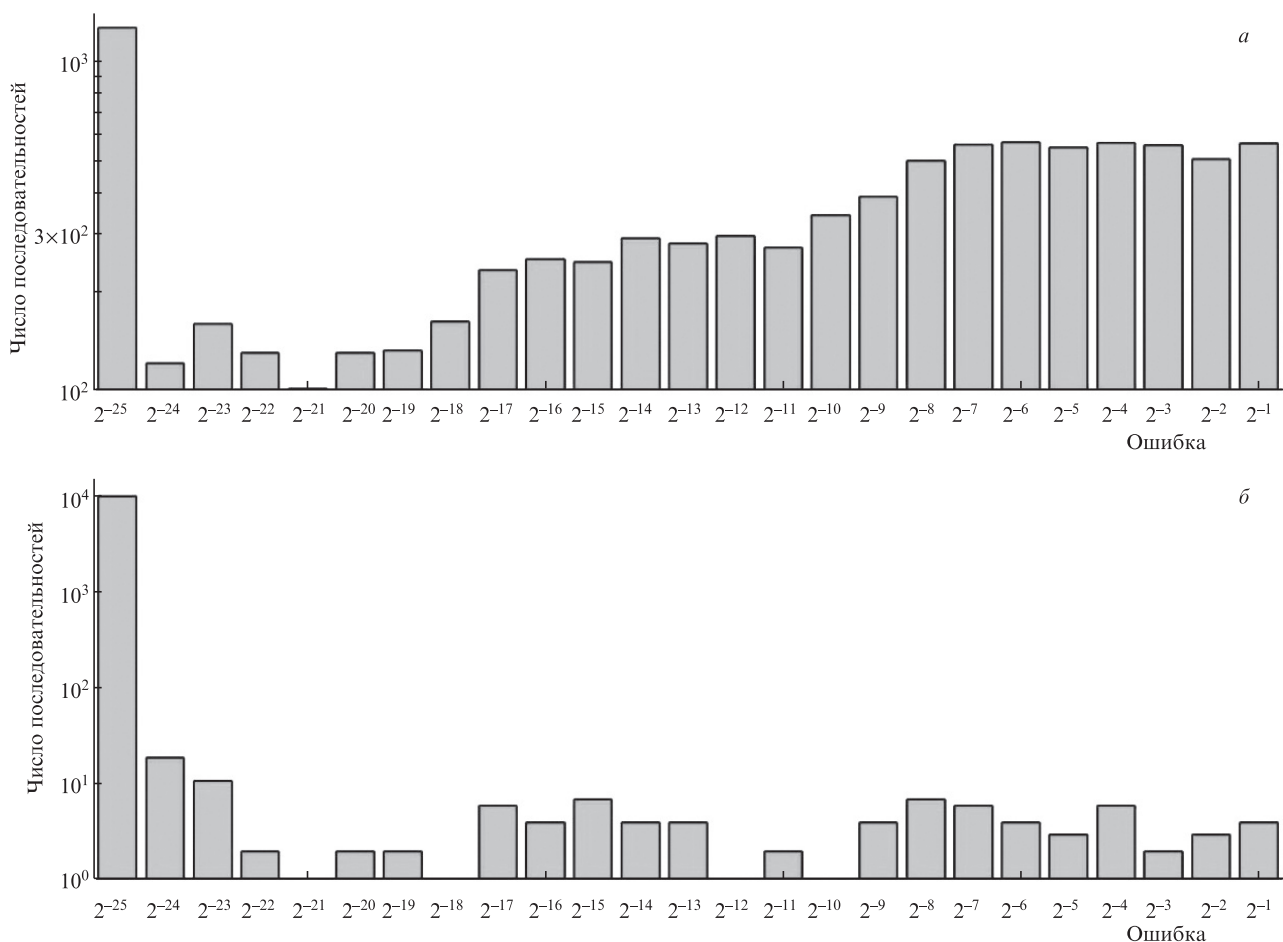


Рис.6. Распределение числа сгенерированных битовых последовательностей по величине ошибки для однократного измерения (а) и в случае усреднения по девяти измерениям с последующим выбором более вероятного значения каждого бита (б). Левые столбцы соответствуют точному совпадению последовательности с истинным значением (ошибка менее 2^{-25}).

вых вентилях приводит к дополнительным ошибкам, как это видно на рис.5.

Процессор IBM при квантовом измерении позволяет проводить не менее 1024 повторных измерений для набора статистических данных. Этого достаточно, чтобы эффективно корректировать ошибки при использовании следующего правила: если измеренная вероятность получить «1» составляет более 50%, то результат измерений принимается за «1».

Была проведена численная оценка вероятности нахождения правильного результата для меньшего числа повторных измерений. Для оценки точности однократного измерения построено 10^4 случайных 25-битовых последовательностей, для каждого бита которых вероятность получить заданное значение соответствовала экспериментальным результатам, представленным на рис.5. Для каждой последовательности рассчитана ошибка по отношению к истинному значению $|\varphi - \hat{\varphi}|$. Распределение числа последовательностей по выраженному в двоичной системе значению ошибки показано на рис.6,а. Видно, что вероятность точного совпадения (что соответствует ошибке менее 2^{-25} , левый столбец гистограммы) оказывается равной $\sim 12\%$, что близко к произведению вероятностей, приведенных на рис.5 для экспериментальной последовательности битов.

Если вместо одной битовой последовательности генерировать девять последовательностей с аналогичной вероятностью получить заданное значение каждого бита и

затем выбрать итоговую последовательность по наибольшему числу совпадений значений каждого бита среди всех девяти последовательностей, то вероятность найти правильное значение фазы существенно возрастает, как видно из рис.6,б. Результаты оценки точности измеренных значений фазы для различного числа повторных измерений приведены в табл.1. Видно, что уже при девяти повторных измерениях вероятность получить точную битовую последовательность превышает 98.8%, а вероятность получить ошибку менее 10^{-6} больше 99%.

Табл.1. Вероятность P получения заданной точности измеренного значения фазы при заданном числе итераций.

Число повторений	Максимальная ошибка измерения фазы		
	$\leq 2^{-25}$	$\leq 10^{-6}$	$\leq 10^{-3}$
1	0.1235	0.1782	0.4411
3	0.6037	0.6607	0.8112
5	0.8720	0.8972	0.9419
7	0.9589	0.9684	0.9839
9	0.9881	0.9917	0.9957

5. Заключение

В работе представлены результаты выполнения итеративной квантовой оценки фазы на основе алгоритма Китаева с использованием процессора IBM ibmqx2.

Показано, что за счет классической коррекции ошибок можно получить корректную последовательность 25 значащих битов, несмотря на ограниченную точность двухкубитовых вентилях. Численная оценка вероятности нахождения правильного результата показала, что корректная последовательность битов может быть получена и при числе измерений, существенно меньшем числа измерений, проведенных на процессоре ИВМ.

Настоящая работа была поддержана грантом РФФИ №19-52-15010-а.

1. Lloyd S. *Science*, **273**, 1073 (1996).
2. Nielsen M.A., Chuang I.L. *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: University Press, 2011).
3. Abrams D.S., Lloyd S. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5162 (1999).
4. <https://www.ibm.com/quantum-computing/>.
5. Arute F., Arya K., Babbush R., et al. *Nature*, **574**, 505 (2019).
6. <https://azure.microsoft.com/ru-ru/solutions/quantum-computing/>.
7. Grzesiak N., Blümel R., Wright K., et al. *Nat. Commun.*, **11**, 2963 (2020).
8. Федорова Е.С., Трегубов Д.О., Головизин А.А., Мишин Д.А., Проворченко Д.И., Хабарова К.Ю., Сорокин В.Н., Колачевский Н.Н. *Квантовая электроника*, **50** (3), 220 (2020) [*Quantum Electron.*, **50** (3), 220 (2020)].
9. Zhong H.-S. et al. *Science*, **370** (6523), 1460 (2020). DOI 10.1126/science.abe8770.
10. Saffman M. *J. Phys. B*, **49**, 202001 (2016).
11. Graham T.M., Kwon M., Grinkemeyer B., Marra Z., Jiang X., Lichtman M.T., Sun Y., Ebert M., Saffman M. *Phys. Rev. Lett.*, **123**, 230501 (2019).
12. Samoilenko S.R., Lisitsin A.V., Schepanovich D., Bobrov I.B., Straupe S.S., Kulik S.P. *Laser Phys. Lett.*, **17** (2), 025203 (2020).
13. Бетеров И.И., Якшина Е.А., Третьяков Д.Б., Энтин В.М., Альянова Н.В., Митянин К.Ю., Рябцев И.И. *ЖЭТФ*, **159** (3), 409 (2021) [*JETP*, **132** (3), 341 (2021)].
14. Lanyon B.P., Whitfield J.D., Gillett G.G., Goggin M.E., Almeida M.P., Kassal I., Biamonte J.D., Mohseni M., Powell B.J., Barbieri M., Aspuru-Guzik A., White A.G. *Nat. Chem.*, **2**, 106 (2010).
15. Китаев А.Ю. *УМН*, **52**, (6 (318)), 53 (1997).
16. Dobšiček M., Johansson G., Shumeiko V., Wendin G. *Phys. Rev. A*, **76**, 030306(R) (2007).
17. Ашкарин И.Н., Бетеров И.И., Третьяков Д.Б., Энтин В.М., Якшина Е.А., Рябцев И.И. *Квантовая электроника*, **49** (5), 449 (2019) [*Quantum Electron.*, **49** (5), 449 (2019)].
18. Du J., Xu N., Peng X., Wang P., Wu S., Lu D. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 030502 (2010).
19. Levine I.N. *Quantum Chemistry* (New York: Prentice-Hall Inc., 2000).