

量子计算与量子算法

徐晓思 中国工程物理研究院研究生院



GRADUATE SCHOOL
OF CHINA ACADEMY OF
ENGINEERING PHYSICS

课程内容

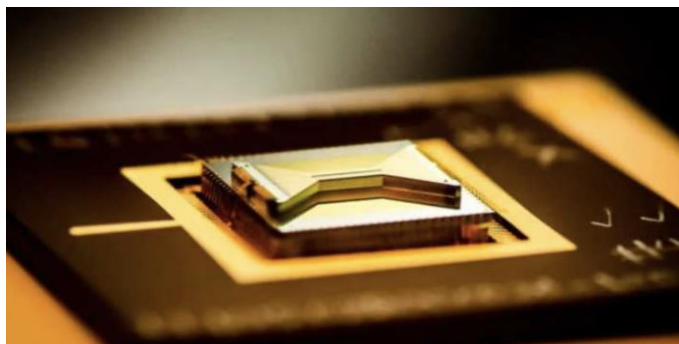
- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

量子计算背景：量子计算机

量子计算机是一种使用量子逻辑进行通用计算的设备。



中科大的九章部分装置

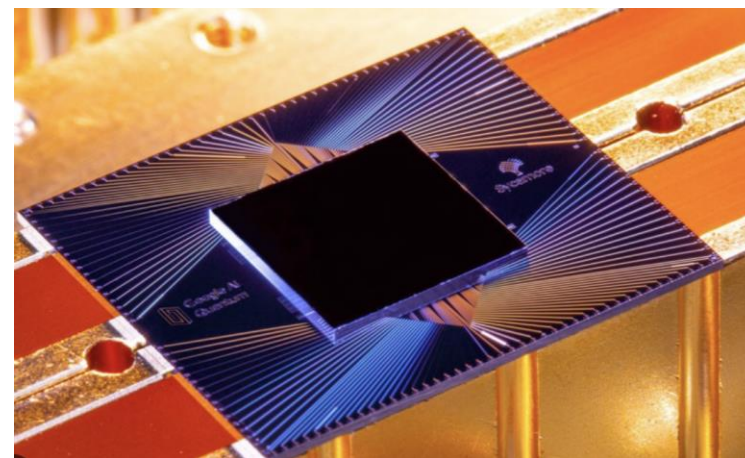


IonQ的离子阱芯片

实现量子计算的物理平台：超导，离子阱，原子，硅基，光子，氮空位色心等等。



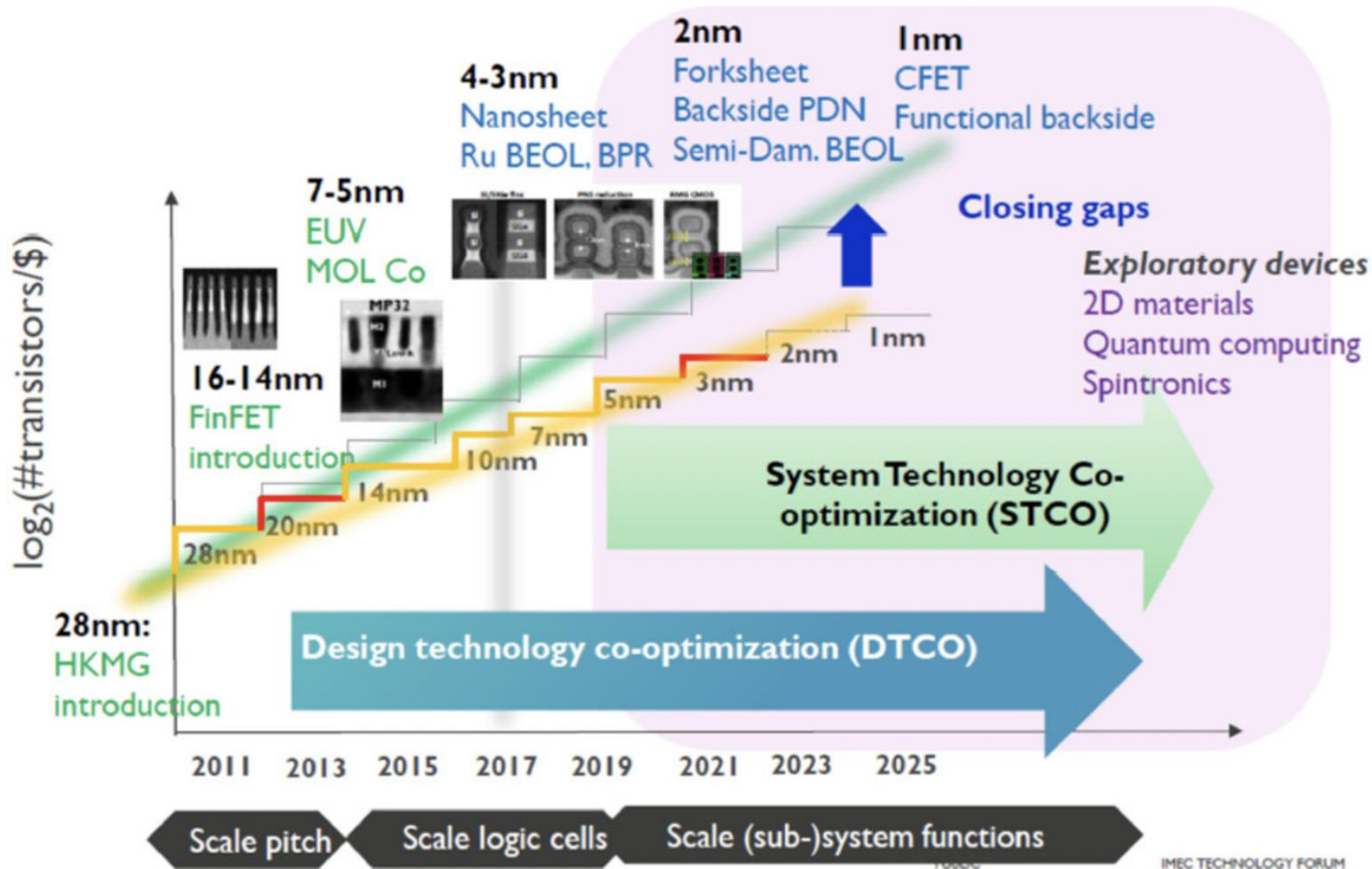
IBM 的超导系统



Google 的超导芯片

量子计算背景：为什么要造量子计算机

- 经典计算机的极限：
摩尔定律。
- 一些问题（如分子模拟、组合优化）随系统规模指数增长。
- 量子系统天然具有指数态空间。











量子计算背景：与经典计算对比

特性	经典计算	量子计算
信息单位	比特（0或1）	量子比特（叠加态）
操作	逻辑门	幺正门
并行性	数据并行	振幅并行
结果	确定	概率分布

量子计算背景：应用

- 量子计算在各种领域都有很多潜在的应用

							
Chemicals	Pharma	Finance	Aerospace	Automotive	Climate	Materials	ICT
Molecular modelling of chemical process (for example, nitrogenase) using quantum simulations	Simulation of complex organic molecules	Solve hard combinatorial optimization problems	Real-time optimization of commercial aircraft speed and fuel consumption	Live traffic-routing system, accurate to the millisecond	More accurate climate models that better mimic real-world conditions	Materials' property and behavior predictions with quantum-mechanical simulations	Optimization of machine learning algorithms through quantum-enhanced deep learning

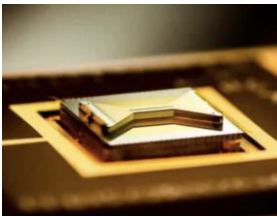
- 计算更大规模问题

- 量子多体问题
- 量子动力学演化
- 数学优化问题

- 超越经典算法

- 搜寻算法 (Grover): $O(N) \rightarrow O(\sqrt{N})$
- 质因数分解算法 (Shor): $O(\sqrt{N}) \rightarrow O(\log(N))$

量子计算背景：量子计算架构



量子硬件

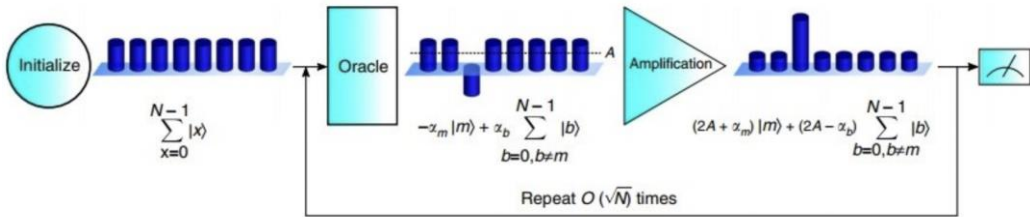
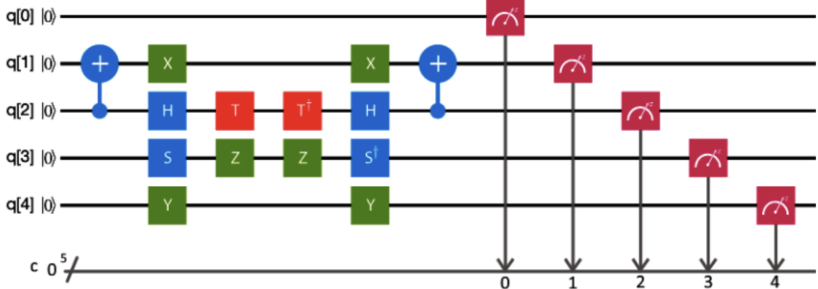
控制系统

量子编译

量子线路
安排和优化 (纠错)

量子算法

量子应用



$$\begin{aligned} S_z^{(2)} &= Z_2 Z_3 Z_5 Z_6 \\ S_x^{(2)} &= X_2 X_3 X_5 X_6 \\ S_z^{(1)} &= Z_1 Z_2 Z_3 Z_4 \\ S_x^{(1)} &= X_1 X_2 X_3 X_4 \\ S_z^{(3)} &= Z_3 Z_4 Z_6 Z_7 \\ S_x^{(3)} &= X_3 X_4 X_6 X_7 \end{aligned}$$



Chemicals



Pharma



Finance



Aerospace



Automotive



Climate



Materials



ICT

课程内容

- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

量子计算基础知识：量子态与叠加原理

➤ 量子叠加态

经典计算机：比特表示0 或者 1



1个比特：0 or 1

2个比特：00 or 01 or 10 or 11

量子计算机：量子比特是两能级的量子系统，表示0,1或其叠加态

1个量子比特：

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

2个量子比特：

$$|\psi\rangle = \alpha_1|00\rangle + \alpha_2|01\rangle + \alpha_3|10\rangle + \alpha_4|11\rangle$$

N个量子比特：

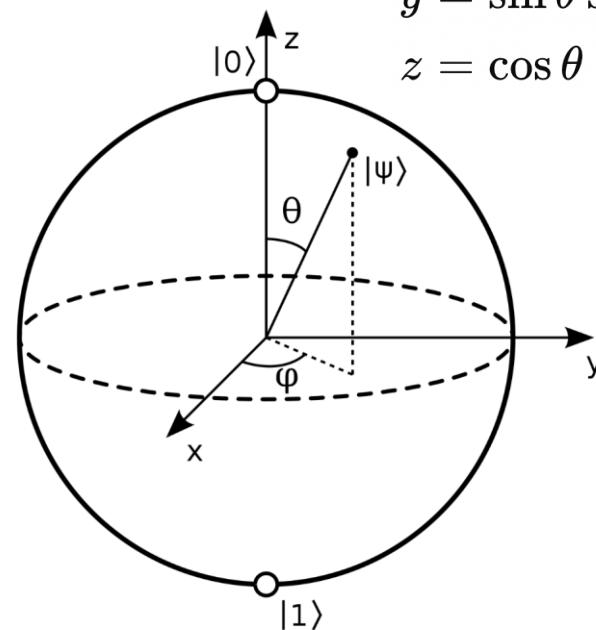
$$|\psi\rangle = \sum_i^{2^N} \alpha_i |\psi_i\rangle \quad \sum_i^{2^N} |\alpha_i|^2 = 1$$

Bloch 球

$$x = \sin \theta \cos \phi$$

$$y = \sin \theta \sin \phi$$

$$z = \cos \theta$$



$$|\psi(\theta, \phi)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle,$$

$$\theta \in [0, \pi], \phi \in [0, 2\pi]$$

量子计算基础知识：量子纠缠

- 一个双体系态 $|\psi\rangle$ 若不可写成

$$|\psi\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$$

的形式，则为一纠缠态

- 如 Bell 态：

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

- 特点：

- 不可分解
- 局域测量会瞬间影响全局状态
- 子系统处于最大混态，但整体仍是一个纯态

- 量子计算加速来源：

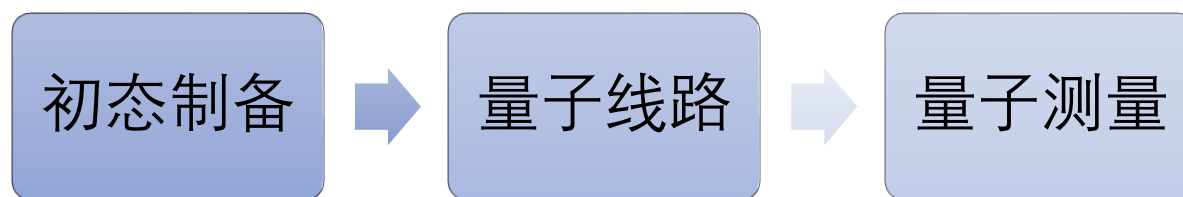
一个无纠缠的 N -qubit 状态表示仅需要 $O(N)$ 个参数
但一般纠缠态需要 2^N 个复数参数，才能完全描述

几乎所有量子算法的加速，都依赖纠缠

量子计算基础知识：量子演化

- 量子计算机是 N 个量子比特的集合，波函数属于一个 2^N 维的复Hilbert空间。
- 当与环境耦合忽略不计，波函数的演化是幺正的。
- 量子计算通过量子线路来实现。量子线路的本质是幺正变换和测量的组合。

通用的量子计算过程：



量子计算基础知识：量子模拟

➤ 量子模拟 (Analog quantum computing): 直接让量子系统按照哈密顿量自然演化。

➤ 通常是专用型

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$$

➤ 难以实现容错

➤ Digital quantum computing: 将演化离散成一系列量子逻辑门。

➤ 通用量子计算

$$U \approx \prod_j e^{-iH_j\Delta t}$$

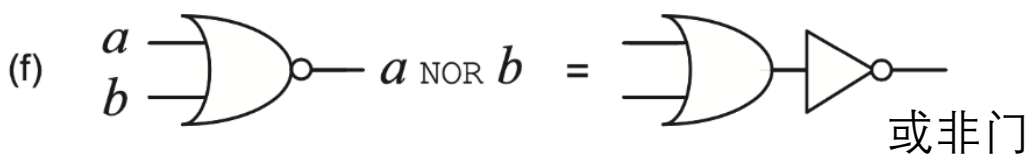
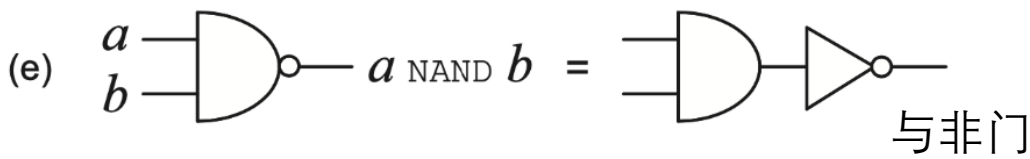
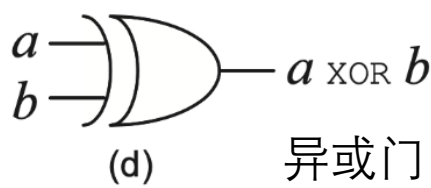
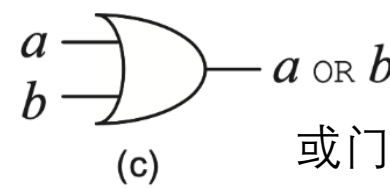
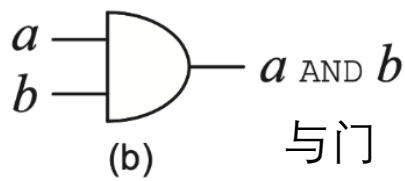
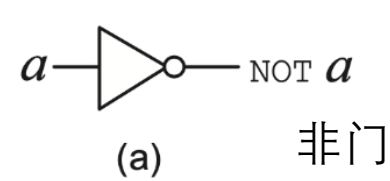
➤ 能实现容错计算

➤ 对硬件要求高

量子计算基础知识：经典逻辑门

➤ 通用布尔计算体系：利用非门、与门、或门和复制门这几个基本逻辑门，可以构造出任意布尔函数

$$f: \{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}^m$$



非门

输入A	输出NOT A
0	1
1	0

与门

A	B	A AND B
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

或门

A	B	A OR B
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

量子计算基础知识：量子线路和量子门


➤ 量子态

量子比特的状态是一个存在于二维复矢量空间的矢量

$$|0\rangle := \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle := \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$0.6|0\rangle + 0.8|1\rangle = 0.6 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + 0.8 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix}$$

➤ 单比特基本量子门：

X门:  $X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ Y门: $Y := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$

$$X|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle \quad Z门: \quad Z := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Hadamard门:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \\ H|1\rangle &= \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Phase 门 (S、T 等) :

$$S = \text{diag}(1, i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$T = \text{diag}\left(1, e^{i\pi/4}\right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}$$

量子计算基础知识：量子线路和量子门

➤ 通用旋转门（Bloch 球旋转）：

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -i \sin(\frac{\theta}{2}) \\ -i \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -\sin(\frac{\theta}{2}) \\ \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}$$

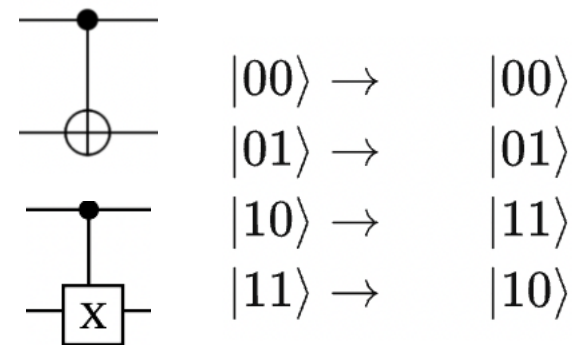
一般的单比特门： $U^\dagger := (U^T)^*$

任意单比特门都可以由 Rz-Ry-Rz 或 Rx-Rz-Rx 实现。

➤ 双比特基本量子门：创造纠缠

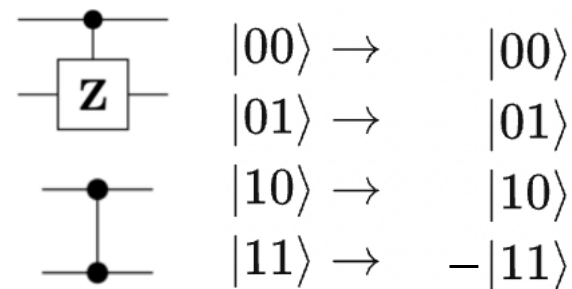
CNOT门：

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



CPhase门：

$$\text{CZ} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



量子计算基础知识：量子线路通用结构

➤ 通用门集：能够近似任意么正操作到任意精度的量子门组合，而且所需的门数仅多项式增加 (Solovay–Kitaev 定理)。

➤ 常用选择：

➤ CNOT, H, T

➤ CNOT, $R_y(\pi/4)$, S

➤ Clifford group:

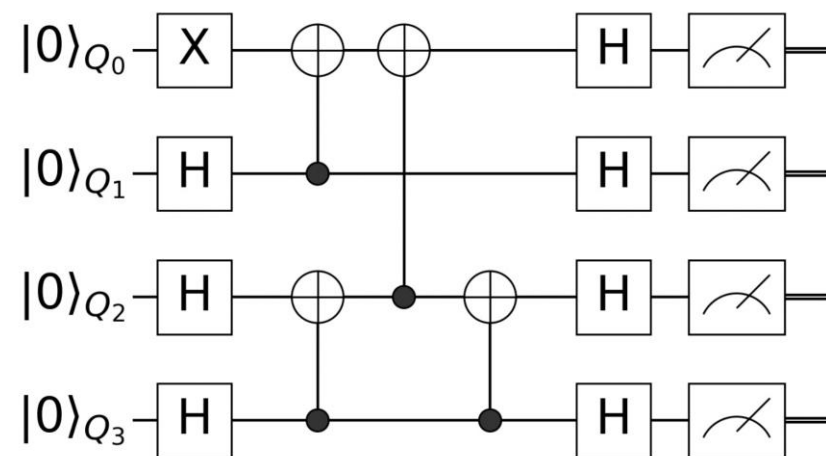
$$\mathcal{C}_n = \{U \mid UPU^\dagger \in \mathcal{P}_n \text{ for all } P \in \mathcal{P}_n\}$$

$$\mathcal{P}_n = \{\pm 1, \pm i\} \times \{I, X, Y, Z\}^{\otimes n} \text{ 为 } n \text{ 比特的 Pauli 群}$$

最小门集：CNOT, H, S

纯 Clifford 电路 + Pauli 初态 + Pauli 测量，可以高效地在经典计算机上模拟 (Gottesman–Knill 定理)

➤ 通用量子线路



量子计算基础知识：量子测量

- 量子计算中的测量是沿着某个方向 (basis) 测量

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad Y := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad Z := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- 量子测量的本质：沿某个可观测量 (Z, X, Y) 的本征态进行投影

Z 测量：投影到 $|0\rangle, |1\rangle$ $Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$

$$Z|0\rangle = +1|0\rangle, \quad Z|1\rangle = -1|1\rangle$$

X 测量：投影到 $|+\rangle, |-\rangle$

Y 测量：投影到 $|i\rangle, |-i\rangle$

量子态：

$$|\psi\rangle = a_1|0\rangle + a_2|1\rangle$$

↓ Z测量

$$P_1 = |a_1|^2 \text{ 的概率得到 } |0\rangle \text{ (测到 } +1)$$

$$P_2 = |a_2|^2 \text{ 的概率得到 } |1\rangle \text{ (测到 } -1)$$

- 对期望值的测量：

$$\langle P \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle$$

- 多比特测量：

旋转基 \rightarrow 测 Z \rightarrow 结果相乘

量子计算基础知识：噪声与退相干

➤ 基本门噪声模型：

- Bit flip (X): $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$
- Phase flip (Z): $|1\rangle \rightarrow -|1\rangle$

➤ 量子门噪声通道：

如退极化：

$$\mathcal{E}_d(\rho) = (1 - p_d)\rho + \frac{p_d}{3}(X\rho X + Y\rho Y + Z\rho Z).$$

➤ 测量噪声：把 0 读成 1、或把 1 读成 0

➤ 基本环境噪声模型：

- 退极化 (depolarizing): 描述随机泡利噪声的平均效果，是最常用的理论噪声模型
- 退相干 (dephasing): 丢失相位信息，幅值不变
- 振幅阻尼噪声 (amplitude damping): 激发态 $|1\rangle$ 自发弛豫到 $|0\rangle$
- 丢失噪声 (leakage): 比特从计算空间 $|0\rangle, |1\rangle$ 跑到了计算空间之外的其他能级

量子计算基础知识：量子错误缓解

➤ 量子错误缓解：通过对测量结果做数学修正或推断来减少噪声导致的偏差

➤ 只能降低误差而不能真正纠错

➤ 实现较容易，适合NISQ线路

➤ 方法：

➤ Zero-Noise Extrapolation

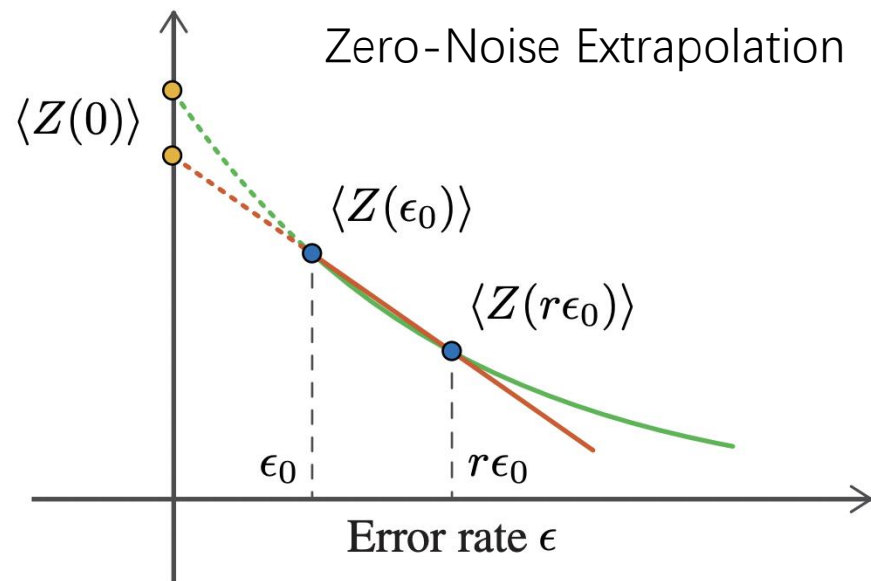
➤ Probabilistic Error Cancellation

➤ Virtual distillation

➤ Clifford-based calibration

➤ Readout mitigation

➤ ...



量子计算基础知识：量子纠错

➤ 量子纠错：持续检测与纠正错误，使量子信息在噪声环境中长期保持可靠。

➤ 非常困难：量子态不能直接读取；探错和纠错本身操作也有误差

➤ 策略：把逻辑比特编码进多个物理比特（使用大量冗余比特）

➤ 典型方法：表面码、LDPC 码、Steane 码、GKP 码等

➤ 三比特码： $|0\rangle_L = |000\rangle$, $|1\rangle_L = |111\rangle$

$$|\psi\rangle_L = \alpha|0\rangle_L + \beta|1\rangle_L = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$$

噪声会把态推到编码空间之外

纠错核心操作：测量稳定子 (Stabilizer) S

$$S_i|0_L\rangle = |0_L\rangle, \quad S_i|1_L\rangle = |1_L\rangle$$

$$Z_1 Z_2 |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L \quad Z_2 Z_3 |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L$$

错误导致状态不再是稳定子的

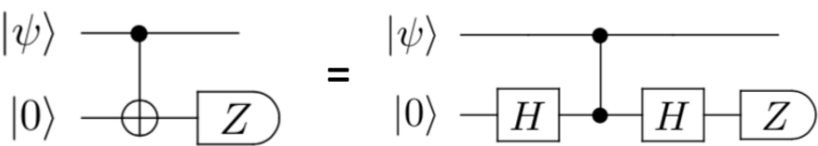
+1 本征态，会产生 -1 结果

量子计算基础知识：量子纠错

➤ 三比特码:

$$|\psi\rangle_L = \alpha|0\rangle_L + \beta|1\rangle_L = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$$

$$Z_1 Z_2 |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L \quad Z_2 Z_3 |\psi\rangle_L = |\psi\rangle_L$$



CZ gate: $|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes Z$

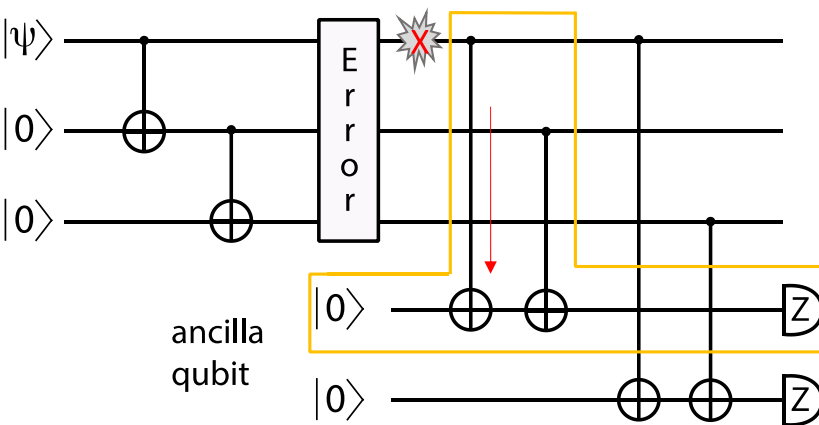
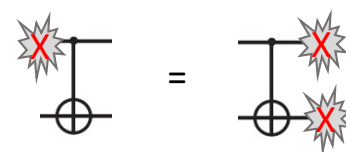
Apply the CZ $(|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes Z)|+\rangle|\psi\rangle_L$
gate:

$$= \frac{\sqrt{2}}{2}(|0\rangle \otimes I|\psi\rangle_L + |1\rangle \otimes Z|\psi\rangle_L)$$

If no error: $|+\rangle|\psi\rangle_L$

If with one X $|\phi\rangle = \alpha|010\rangle + \beta|101\rangle \quad Z_1 Z_2 |\phi\rangle = -|\phi\rangle$
error:

We get: $|-\rangle|\psi\rangle_L$



解码表:

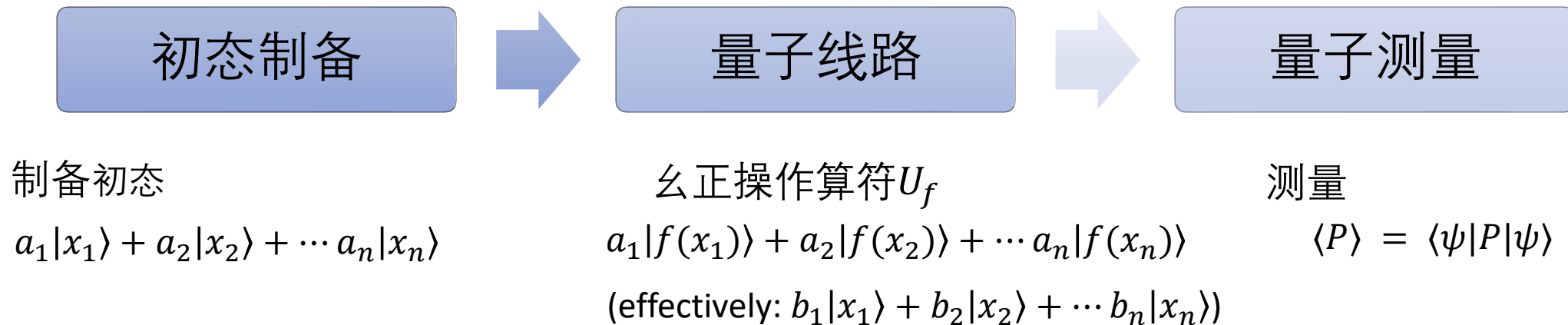
error location	no error	qubit 1	qubit 2	qubit 3
measured state	00	11	10	01

课程内容

- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

量子算法基础：基本框架

- 通用的量子计算过程：



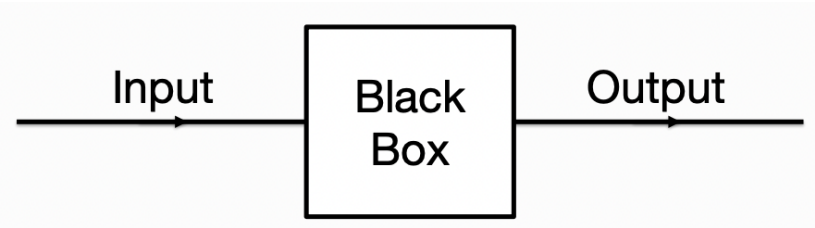
- 量子算法的设计思路：

- 利用量子加速特性
- 量子态中途不能被(完全)读取
- 操作算符必须是么正的
- 降低线路复杂度 (poly(n))

量子算法基础：Oracle

➤ Oracle: 黑盒子，一个已知结构不知内容的布尔函数

$$f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$$

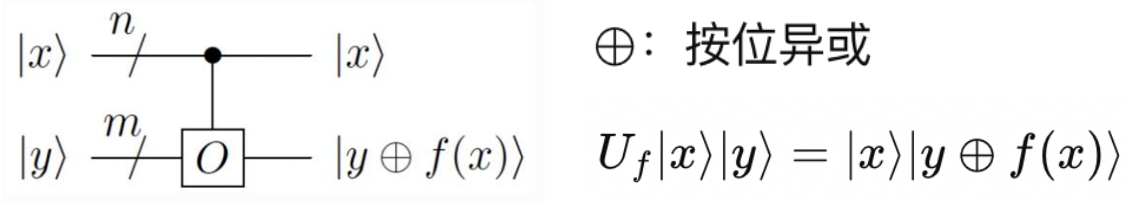


只能通过调用黑箱 (query) 得知 $f(x)$

量子算法绝大多数的加速来自于：
如何更少地调用 oracle

Query Complexity: 调用次数

➤ 量子 oracle 用量子门实现：



相位Oracle

$$\begin{aligned} &|x\rangle|0\rangle \xrightarrow{I \otimes X} |x\rangle|1\rangle \xrightarrow{I \otimes H} |x\rangle|-\rangle \\ &|x\rangle|-\rangle = |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \\ &\stackrel{O}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle|0\rangle - |x\rangle|1\rangle) \\ &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle|0 \oplus f(x)\rangle - |x\rangle|1 \oplus f(x)\rangle) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle|0\rangle - |x\rangle|1\rangle), & f(x) = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle|1\rangle - |x\rangle|0\rangle), & f(x) = 1 \end{cases} \\ &= \begin{cases} |x\rangle|-\rangle, & f(x) = 0 \\ -|x\rangle|-\rangle, & f(x) = 1 \end{cases} \\ &= (-1)^{f(x)}|x\rangle|-\rangle. \end{aligned}$$

A	B	输出Y
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

$$O_f|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$$

量子算法基础：量子傅里叶变换

- Quantum Fourier Transform QFT: 离散傅里叶变换的直接量子化形式

$$|x\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i x k / N} |k\rangle$$

$N = 2^n$

二进制展开

$$x = x_{n-1}2^{n-1} + x_{n-2}2^{n-2} + \cdots + x_12^1 + x_02^0$$

$x_j \in \{0, 1\}$

$$k = k_{n-1}2^{n-1} + \cdots + k_12^1 + k_0$$

则：

$$F_N|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}, \dots, k_0 \in \{0, 1\}} e^{2\pi i x k / 2^n} |k_{n-1} \dots k_0\rangle.$$

拆开相位： $e^{2\pi i x k / 2^n}$

$$\frac{xk}{2^n} = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{xk_j 2^j}{2^n} = \sum_{j=0}^{n-1} k_j \frac{x}{2^{n-j}} \quad e^{2\pi i x k / 2^n} = \prod_{j=0}^{n-1} e^{2\pi i k_j x / 2^{n-j}}$$

由于

$$|k_{n-1} \dots k_0\rangle = |k_{n-1}\rangle \otimes \cdots \otimes |k_0\rangle$$

$$\sum_{k_{n-1}, \dots, k_0} \prod_{j=0}^{n-1} (\cdots) = \bigotimes_{j=0}^{n-1} \left(\sum_{k_j=0}^1 e^{2\pi i k_j x / 2^{n-j}} |k_j\rangle \right)$$

由于

$$\sum_{k_j=0}^1 e^{2\pi i k_j x / 2^{n-j}} |k_j\rangle = |0\rangle + e^{2\pi i x / 2^{n-j}} |1\rangle.$$

得到：

$$F_N|x\rangle = \bigotimes_{j=0}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i x / 2^{n-j}} |1\rangle \right).$$

QFT 把 $|x\rangle$ 映射为 n 个比特的张量积

量子算法基础：量子傅里叶变换

$$F_N|x\rangle = \bigotimes_{j=0}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i x / 2^{n-j}} |1\rangle \right).$$

在二进制中, $\frac{x}{2^m}$ 的小数部分就是 $0.x_{m-1}x_{m-2}\dots x_0$

$$\frac{x}{2^{n-j}} = \text{整数} + 0.x_{n-j-1}x_{n-j-2}\dots x_0$$

$$e^{2\pi i x / 2^{n-j}} = e^{2\pi i (\text{整数})} \cdot e^{2\pi i (0.x_{n-j-1}\dots x_0)} = e^{2\pi i (0.x_{n-j-1}\dots x_0)}$$

得到:

$$F_N|x\rangle = \bigotimes_{j=0}^{n-1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i (0.x_{n-j-1}\dots x_0)} |1\rangle \right)$$

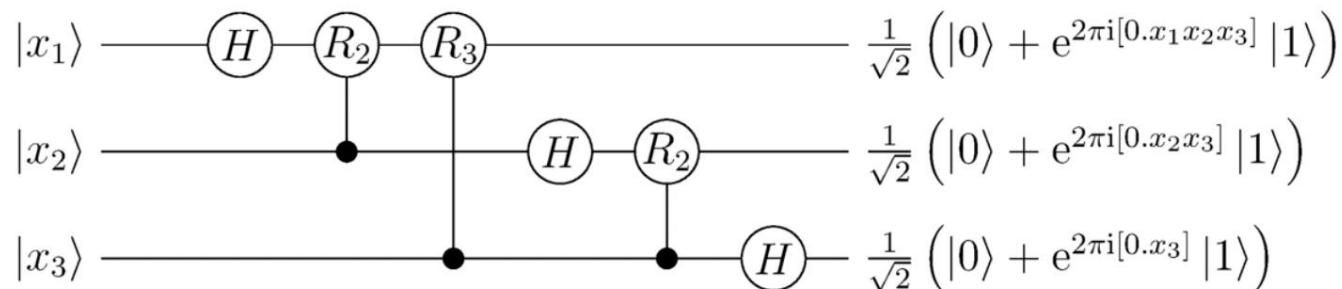
交换张量积顺序:

$$\frac{|0\rangle + e^{2\pi i (0.x_{n-1})} |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + e^{2\pi i (0.x_{n-2}x_{n-1})} |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dots$$

把输入态写进了输出各个比特的相位中

➤ 线路实现

$$R_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i2\pi/2^k} \end{pmatrix}$$



经典DFT 复杂度: $O(N^2)$

QFT 线路复杂度: $O(n^2)$

课程内容

- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

经典量子算法：Deutsch algorithm

- Deutsch 问题 (最早展示量子加速):

给定一个布尔函数

$$f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}$$

$$f(0) = 0, f(1) = 0 \text{ (常数函数)}$$

$$f(0) = 1, f(1) = 1 \text{ (常数函数)}$$

$$f(0) = 0, f(1) = 1 \text{ (平衡函数)}$$

$$f(0) = 1, f(1) = 0 \text{ (平衡函数)}$$

任务：判断函数是常数函数还是平衡函数

- 经典计算机：必须调用函数 f 两次，分别计算 $f(0), f(1)$ ，然后比较结果。
- 量子计算机：只需要调用函数一次

经典量子算法：Deutsch algorithm

➤ 使用Phase Oracle:

$$|x\rangle|0\rangle \xrightarrow{I \otimes X} |x\rangle|1\rangle \xrightarrow{I \otimes H} |x\rangle|-\rangle$$

$$U_f|x\rangle|-\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle|-\rangle$$

$$|x\rangle \text{ 初始为: } \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

使用Oracle后:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle \right) \otimes |-\rangle$$

对第一个比特再施加H门:

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$H|\psi\rangle = \frac{1}{2} \left[(-1)^{f(0)}(|0\rangle + |1\rangle) + (-1)^{f(1)}(|0\rangle - |1\rangle) \right]$$

$$|0\rangle \text{ 的系数: } \frac{(-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)}}{2}$$

$$|1\rangle \text{ 的系数: } \frac{(-1)^{f(0)} - (-1)^{f(1)}}{2}$$

最后, 测量第一个比特:

如果 f 是常数的, $f(0) = f(1)$: 始终得到 $|0\rangle$

如果 f 是平衡的, $f(x) = x$ 或 $f(x) = 1 - x$: 始终得到 $|1\rangle$

只用测一次!

经典量子算法：Deutsch-Jozsa algorithm

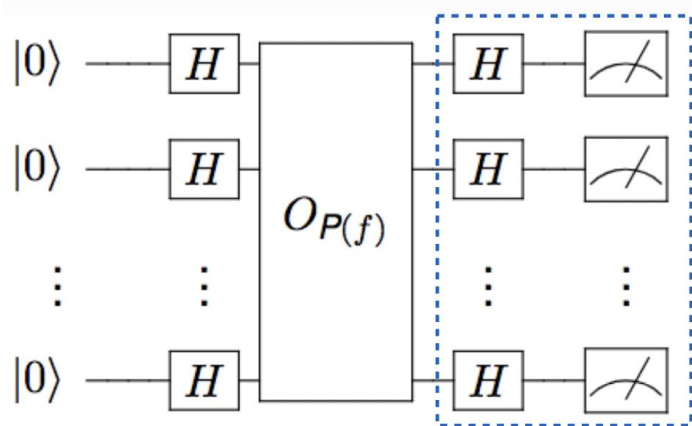
- 推广到多比特的场景：

$$f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$$

constant: 对所有输入输出相同

balanced: 一半输出 0，一半输出 1

- 经典计算机：最差需要调用 $f(x)$ $2^{n-1} + 1$ 次
- 量子计算机：只需要调用函数一次



初始态为： $|0\rangle^{\otimes n} |1\rangle$

对所有比特做H门： $\frac{1}{2^{n/2}} \sum_x |x\rangle \cdot |-\rangle$

使用Oracle后：

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes |-\rangle$$

对所有比特在 X basis 下测量：

$$\begin{aligned} \langle + |^{\otimes n} | \psi_2 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y \in \mathbb{B}_n} \langle y | \right) \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \mathbb{B}_n} (-1)^{f(x)} |x\rangle \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{x \in \mathbb{B}_n} \sum_{y \in \mathbb{B}_n} (-1)^{f(x)} \langle y | x \rangle \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{x \in \mathbb{B}_n} \sum_{y \in \mathbb{B}_n} (-1)^{f(x)} \delta_{x,y} \\ &= \frac{1}{2^n} \sum_{x \in \mathbb{B}_n} (-1)^{f(x)} \end{aligned}$$

如果 f 是常数的：得到 ± 1

如果 f 是平衡的：得到 0

经典量子算法： Grover's algorithm

➤ 问题：从包含N个数的无序数列中判断特定的一个数 x_0 是否在数列中

经典算法：一个个地去对无序列表中的所有元素进行判断，运气最好的情况下一击即中，运气最差的情况下则需要判断 N 次，复杂度为 $O(N)$

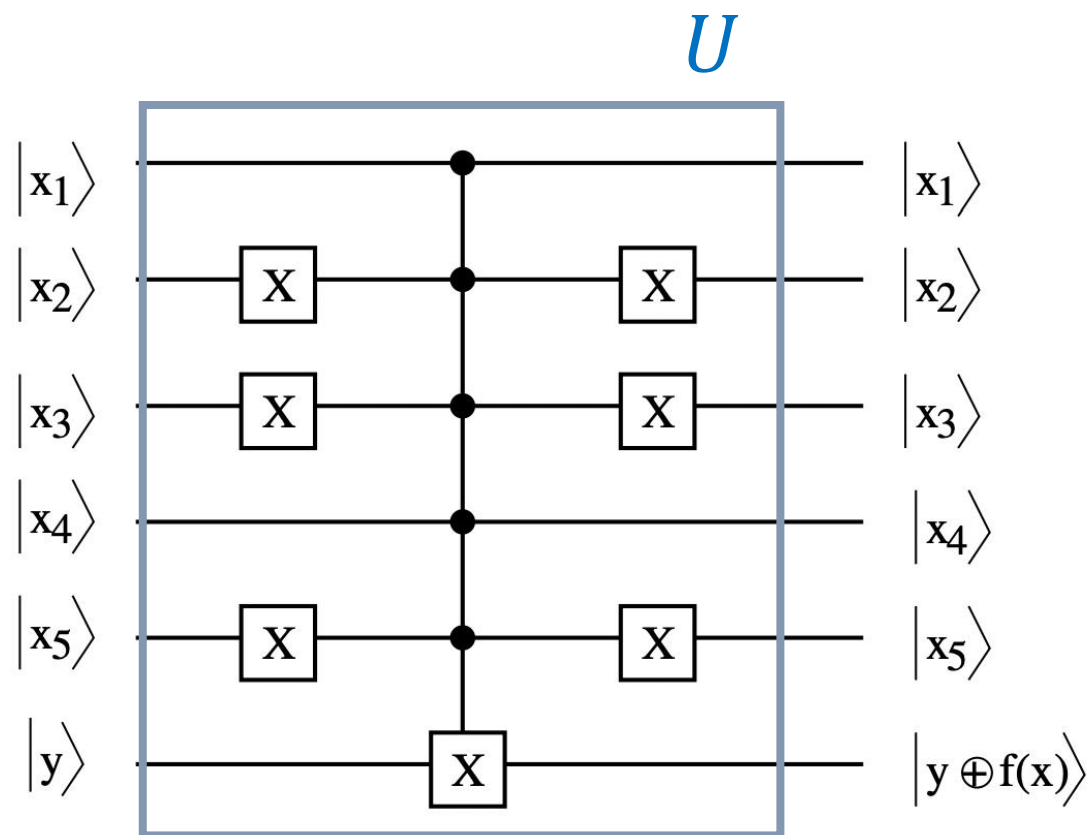
量子算法：我们对数进行二进制编码，可以通过设计黑盒子（oracle）找出 x_0

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x = x_0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

假设我们要找的数是10010，则可以设计右图来实现：

$$U|x\rangle_n|y\rangle_1 = |x\rangle_n|y \oplus f(x)\rangle_1$$

但是没有量子加速



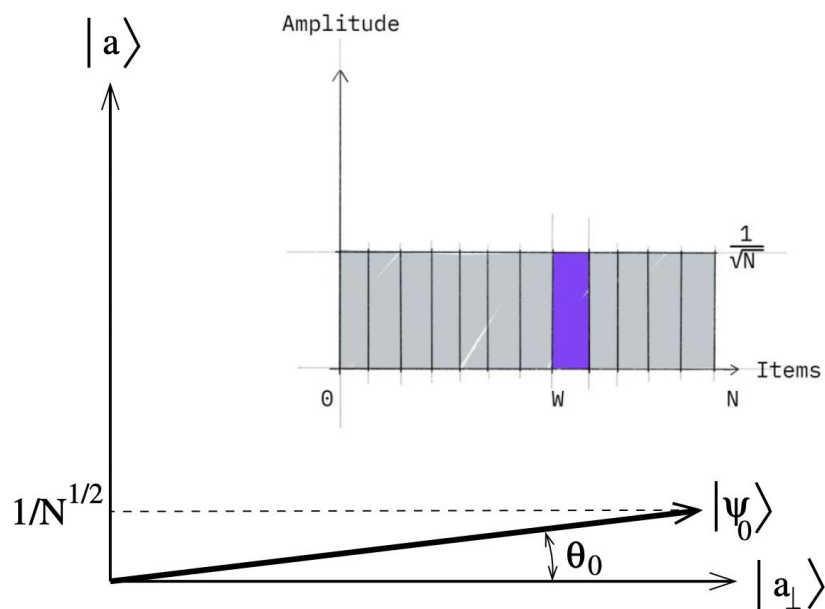
经典量子算法： Grover's algorithm

➤ 如何实现量子加速？

对所有比特做H门： $|\psi_0\rangle = H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$ 包含所有可能

$$\sin \theta_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad \cos \theta_0 = \sqrt{\frac{N-1}{N}} \quad N = 2^n$$

$$|\psi_0\rangle = \sin \theta_0 |x_0\rangle + \cos \theta_0 |r\rangle \quad |r\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{x \neq x_0} |x\rangle$$

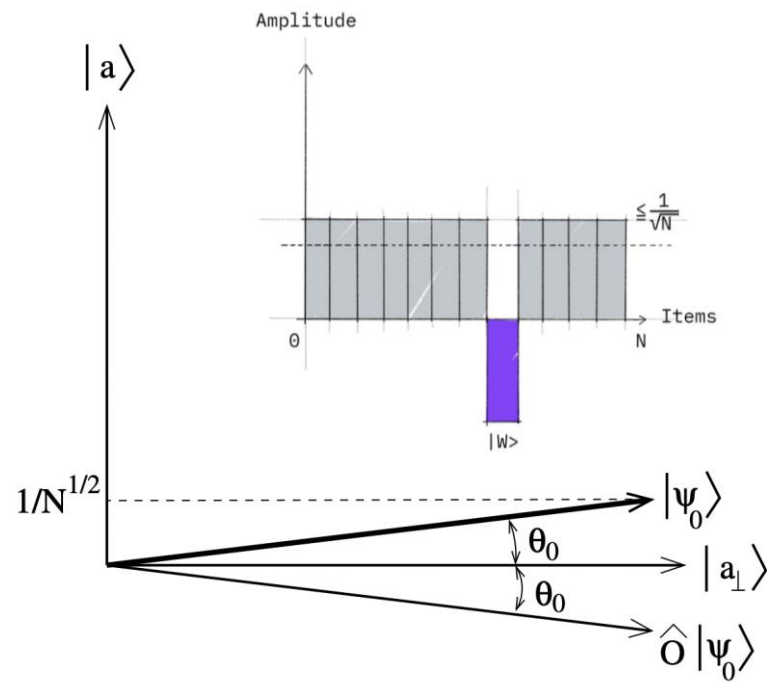


使用Oracle: $O_f|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$

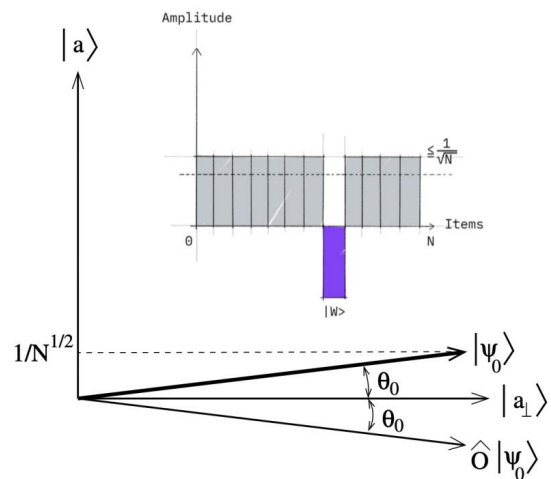
$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x = x_0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$O|x_0\rangle = -|x_0\rangle, \quad O|x\rangle = |x\rangle \quad (x \neq x_0)$$

$$|\psi_1\rangle = O|\psi_0\rangle = -\sin \theta_0 |x_0\rangle + \cos \theta_0 |r\rangle$$



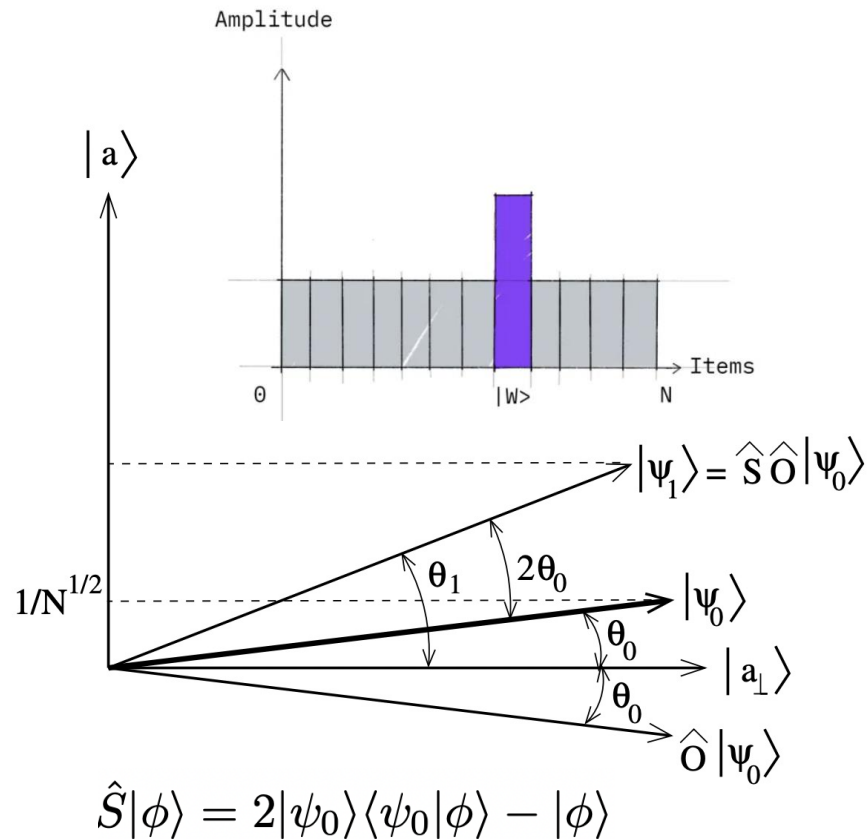
经典量子算法： Grover's algorithm



$$|\psi_0\rangle = \sin \theta_0 |x_0\rangle + \cos \theta_0 |r\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = O|\psi_0\rangle = -\sin \theta_0 |x_0\rangle + \cos \theta_0 |r\rangle$$

- 到现在找出了这个态，但无法通过测量将其与其他态区分开



$$\hat{S}|\phi\rangle = 2|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\phi\rangle - |\phi\rangle$$

效果为以 $|\psi_0\rangle$ 为轴将 $|\phi\rangle$ 翻转
 $|\phi\rangle$ 为任意态

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} -\cos 2\theta_0 & \sin 2\theta_0 \\ \sin 2\theta_0 & \cos 2\theta_0 \end{pmatrix}$$

$$|\psi_2\rangle = \hat{S}|\psi_1\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \sin(3\theta_0) |x_0\rangle + \cos(3\theta_0) |r\rangle$$

- 通过这样的方式翻转多次，
让 x_0 的态的振幅接近于1

迭代 k 次：

$$|\psi_k\rangle = \sin((2k+1)\theta) |x_0\rangle + \cos((2k+1)\theta) |r\rangle$$

$$\sin((2k+1)\theta) \approx 1$$

$$k \approx \frac{\pi}{4\theta} - \frac{1}{2} \approx \frac{\pi}{4} \sqrt{N}$$

复杂度降为 $O(\sqrt{N})$

经典量子算法： QPE

➤ 量子相位估计算法 (Quantum phase estimation algorithm)

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes n} |\psi\rangle$$

$$|\Psi_1\rangle = (H^{\otimes n} \otimes I_m) |\Psi_0\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} (|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes n} |\psi\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle |\psi\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle \equiv U_C |\Psi_1\rangle = \left(\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i \theta k} |k\rangle \right) \otimes |\psi\rangle$$

where we used $U^k |\psi\rangle = e^{2\pi i k \theta} |\psi\rangle$.

$$|\tilde{\Psi}_3\rangle = \mathcal{QFT}_{2^n}^{-1} |\tilde{\Psi}_2\rangle \quad \mathcal{QFT}_N^{-1} |k\rangle = N^{-1/2} \sum_{x=0}^{N-1} e^{-\frac{2\pi i}{N} xk} |x\rangle$$

$$F_N |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i xk/N} |k\rangle$$

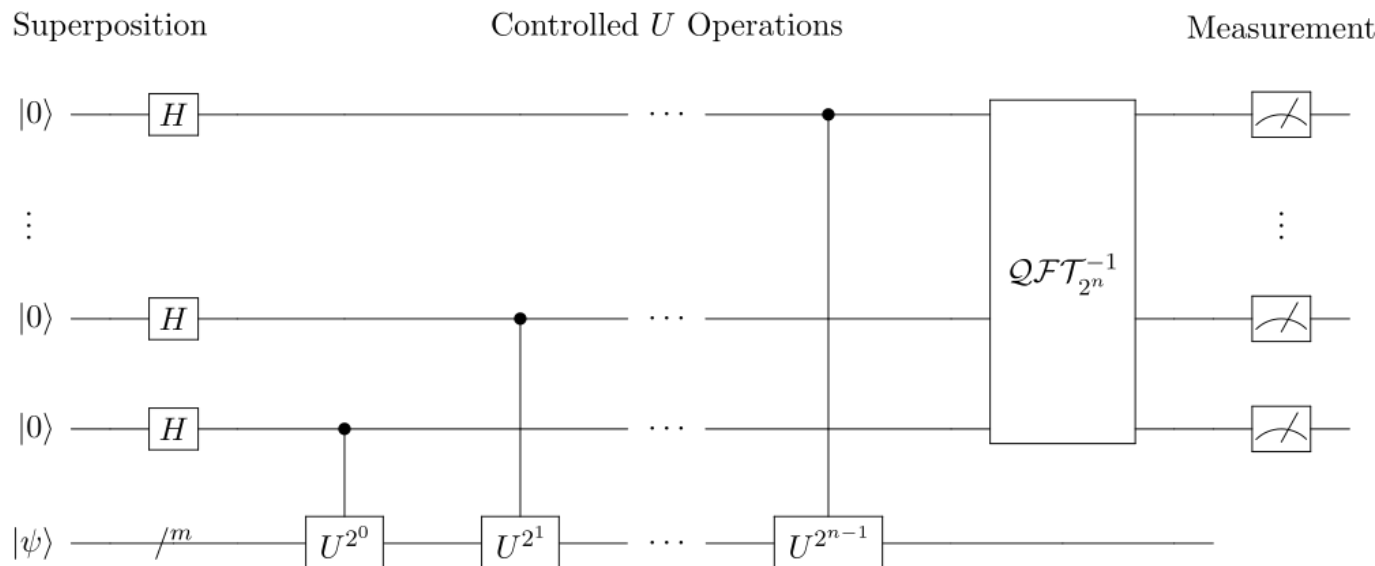
$$|\tilde{\Psi}_3\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i \theta k} \left(\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n-1} e^{-\frac{2\pi i kx}{2^n}} |x\rangle \right) = \frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{-\frac{2\pi i k}{2^n} (x - 2^n \theta)} |x\rangle$$

经典量子算法： QPE

➤ 实现线路

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes n} |\psi\rangle \quad |\Psi_1\rangle = (H^{\otimes n} \otimes I_m) |\Psi_0\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle \equiv U_C |\Psi_1\rangle \quad U^k |\psi\rangle = e^{2\pi i k \theta} |\psi\rangle \quad |\tilde{\Psi}_3\rangle = QFT_{2^n}^{-1} |\tilde{\Psi}_2\rangle$$



$$\frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{-\frac{2\pi i k}{2^n} (x - 2^n \theta)} |x\rangle |\psi\rangle$$

➤ 把U替换成哈密顿量演化算符，即可测能谱

$$U(t) = e^{-iHt} \quad |\psi\rangle = \sum_k c_k |E_k\rangle$$

$$U(t) |E_k\rangle = e^{-iE_k t} |E_k\rangle$$

$$\theta = \frac{E_k t}{2\pi}$$

$$P(\text{测得能量 } E_k) = |c_k|^2$$

➤ 优势：精度高，能得到整个本征谱，适用性广，误差可控

➤ 困难：线路复杂，对噪声敏感

课程内容

- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

从NISQ到早期容错量子时代的量子算法

➤ Noisy intermediate-scale quantum (NISQ)

时代:

- 中规模量子比特: 几十到几百个物理比特
- 噪声相对较大、没有量子纠错 (或纠错能力极弱)
- 只能运行较浅线路
- 可能出现量子优势

从当前量子硬件到未来容错量子计算机之间的时代

➤ 量子算法设计:

- 量子线路深度
- 量子比特数目
- 测量次数和精度
- Non-Clifford 门个数
- 算法的实际实现

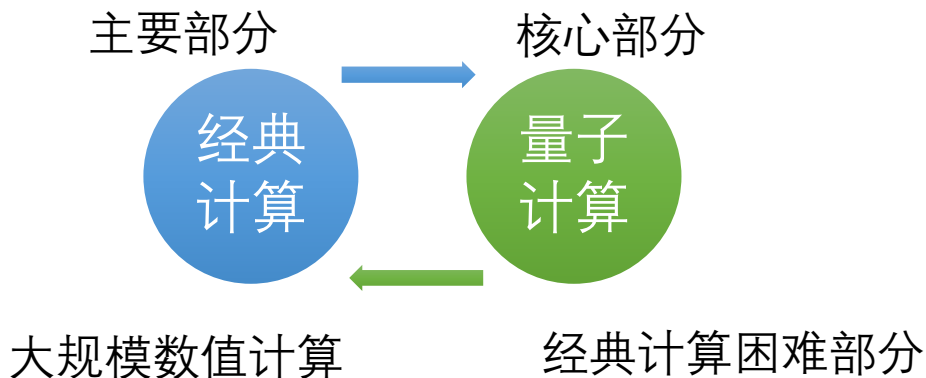
因素

噪声, 器件大小、结构, 器件原始门类型等等

方案

优化算法, 量子纠错、错误缓解, 量子编译等等

➤ 发展经典-量子混合的算法



NISQ - early FT 算法：量子应用

- 量子系统模拟（求解量子系统能量，量子系统动力学问题）
 - 分子电子结构、模拟化学反应
 - 固体模型（Hubbard、Heisenberg、Ising）
 - 核结构和核反应
 - 开放量子系统
- 线性代数问题
 - 求解 $Ax=b$
 - 矩阵特征值、奇异值分解
 - 微分方程
- 组合优化问题
 - 最大分割
 - 最大独立集
 - 旅行商问题
 - 图着色
- 量子机器学习
 - 分类、聚类
 - 量子态压缩、重构
 - 线性代数，高维特征映射
- 其他 (概率估计、积分计算、随机过程模拟)

NISQ - early FT 算法：量子算法概览

➤ 量子变分算法

- Variational quantum eigensolver (VQE) 变分量子本征值求解器：求能谱
- Variational quantum simulator (VQS): 模拟时间演化
- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA): 求能谱，组合优化问题

➤ 不基于变分的静态算法

- Quantum Lanczos
- Hybrid quantum Monte-Carlo
- Time-series analysis
- Quantum imaginary-time evolution (QITE) 量子虚时间演化

➤ 哈密顿量模拟算法

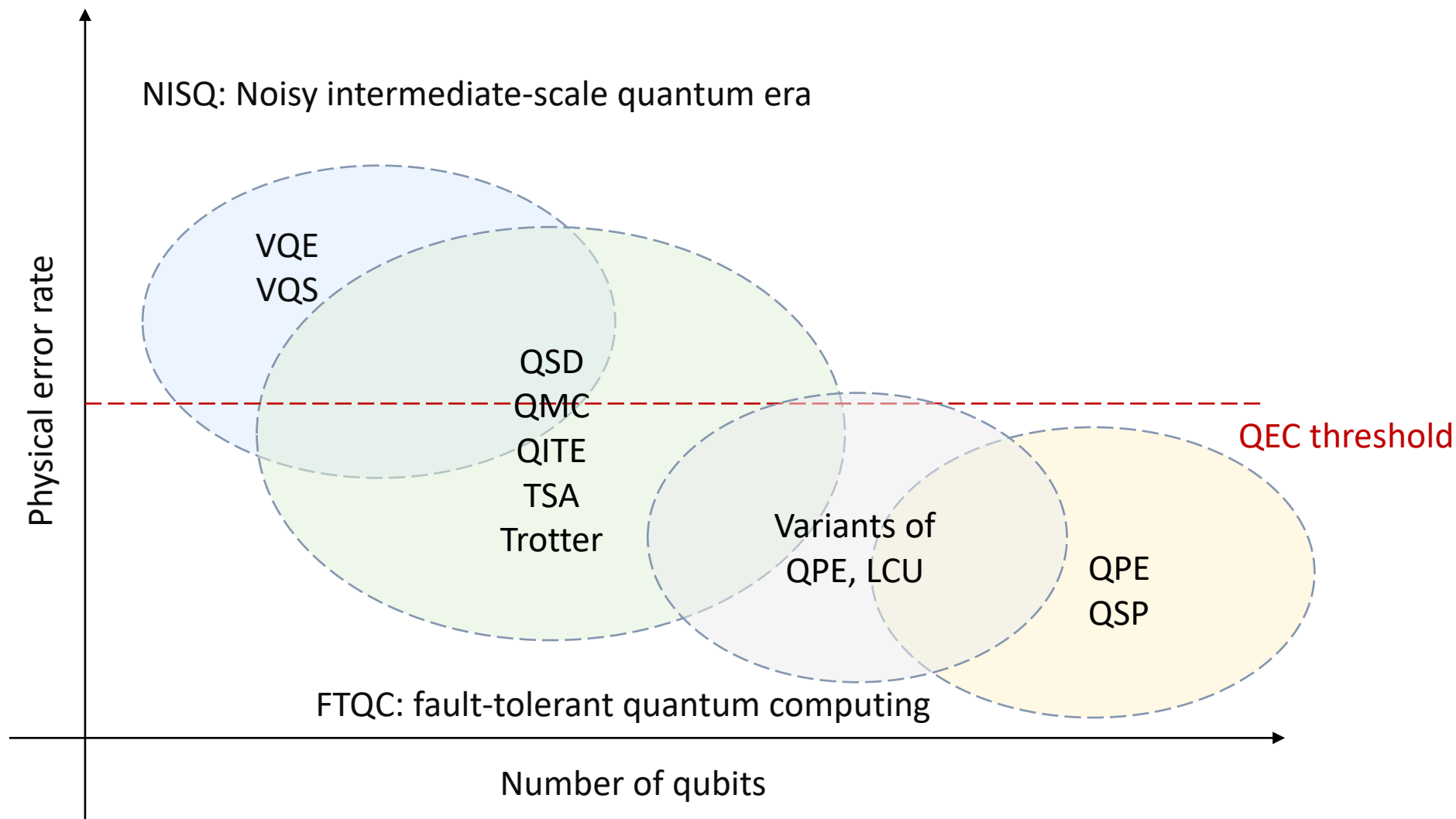
- Trotter分解
- Qubitization
- Linear combination of unitaries (LCU)
- QSP
- 绝热演化/量子退火

➤ 机器学习算法

- Quantum Kernel methods
- Quantum classifier

NISQ - early FT 算法：量子算法概览

- 量子系统模拟（求解量子系统能量，量子系统动力学问题）的主要量子算法



NISQ - early FT 算法： 量子变分算法

- 静态问题：寻找哈密顿量的基态/激发态

$$E_0 = \min_{|\psi\rangle} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \longrightarrow \vec{\theta}_{\min} = \arg \min_{\vec{\theta}} \langle \phi(\vec{\theta}) | H | \phi(\vec{\theta}) \rangle$$

- 动态问题：模拟物理系统的动态演化.

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = -iH |\psi(t)\rangle$$

出发点：Pauli矩阵形式的哈密顿量

$$H = \sum_j h_j P_j = \sum_j h_j \prod_i \sigma_i^j$$

$$\text{二次量子化的哈密顿量: } H = \sum_{p,q} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s \quad H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + a_{j,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} \right) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$$

分子模型

费米-哈伯德模型

NISQ - early FT 算法：VQE

➤ 变分量子本征值求解器 (VQE)

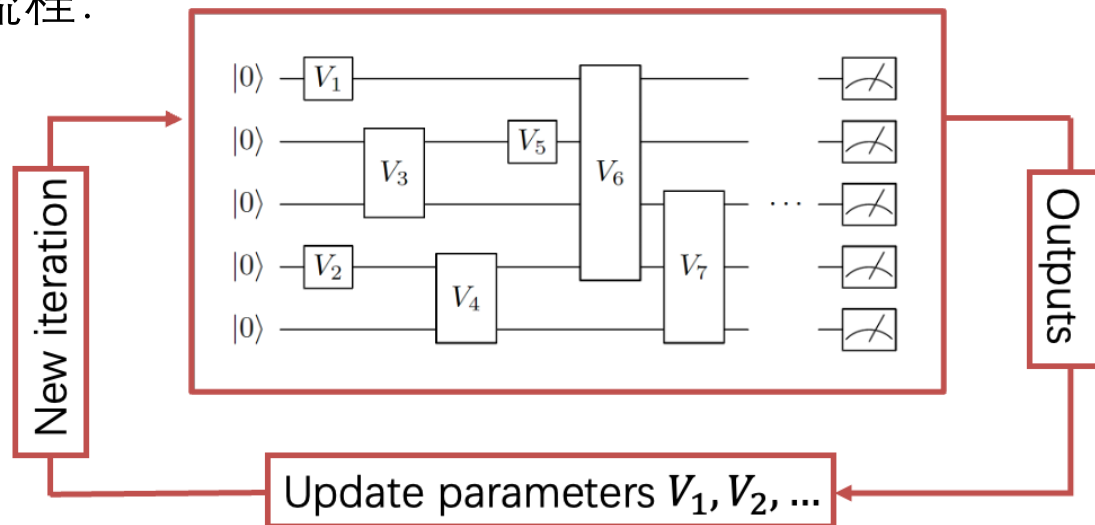
➤ 问题：求解哈密顿量基态

$$E_0 = \min_{|\psi\rangle} \frac{\langle\psi| H |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

➤ 构建试验态 (ansatz)

$$|\phi(\vec{\theta})\rangle = V(\vec{\theta}) |\bar{0}\rangle \quad V(\vec{\theta}) = V_L(\theta_L) V_{L-1}(\theta_{L-1}) \dots V_2(\theta_2) V_1(\theta_1)$$

➤ 流程：



➤ 算法核心问题：

➤ 目标函数

➤ 试探态的选取

➤ 参数的优化

➤ 线路测量

✓ 优势：线路相对较浅，适用性广

✓ 困难：测量成本高，对大体系优化困难，线路表达度依赖强

NISQ - early FT 算法：VQE 目标函数

- 哈密顿量期望值形式

$$\langle H \rangle = \langle 0 | U^\dagger(\theta) H U(\theta) | 0 \rangle$$

- 量子态保真度：目标是制备某个态

$$F(\Psi, \Psi(\theta)) = |\langle \Psi | \Psi(\theta) \rangle|^2$$

- 变分态的能量方差

$$\text{Var}_H(\psi) = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

用于求激发态：

$$C(\theta) = \text{Var}_H(\psi(\theta)) + \lambda(\langle H \rangle - E_n)^2$$

- 寻找开放系统稳态

$$C(\theta) = \|\mathcal{L}[\rho(\theta)]\|^2$$

- 求解线性代数问题

$$C(\theta) = \|A|\psi\rangle - |b\rangle\|^2$$

- 最大化交叉熵

$$C(\theta) = - \sum_i y_i \log p_\theta(x_i)$$

形式灵活，适用性广

NISQ - early FT 算法：VQE 试验态 (ansatz)

➤ 初态选择：尽量接近目标态，满足对称性条件

如：全零态 $|0\dots 0\rangle$ ，GHZ态，Hartree-Fock态

➤ 主流ansatz的选择

✓ UCC (unitary coupled cluster): 量子化学问题

$$U(\theta) = e^{T(\theta) - T^\dagger(\theta)}$$

$$T = T_1 + T_2 + \dots$$
$$T_1 = \sum_{i,a} t_i^a a_a^\dagger a_i$$
$$T_2 = \frac{1}{4} \sum_{ijab} t_{ij}^{ab} a_a^\dagger a_b^\dagger a_i a_j.$$

算法高度依赖Ansatz的表达能力

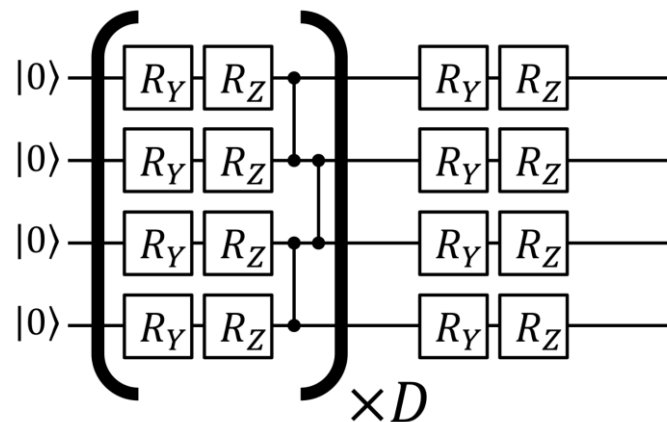
✓ 对称性守恒的

$$U(\theta) = \prod_k \exp(\theta_k (a_i^\dagger a_j - a_j^\dagger a_i))$$

✓ Hamiltonian ansatz: 基于哈密顿量

$$U(\theta) = \prod_{\ell=1}^p [\exp(-i\theta_{x,\ell} H_x) \exp(-i\theta_{z,\ell} H_z)]$$

✓ Hardware efficient ansatz



NISQ - early FT 算法：VQE 参数优化

➤ 基于梯度的

$$\theta_i^{(t+1)} = \theta_i^{(t)} - \eta \partial_i f(\theta)$$

➤ Finite Difference (有限差分法)

$$\partial_i f(\theta) \approx \frac{f(\theta + \epsilon e_i) - f(\theta - \epsilon e_i)}{2\epsilon}$$

➤ Parameter-shift Rule (参数偏移规则)

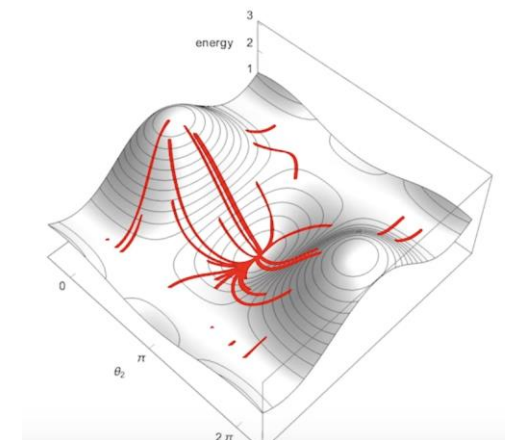
$$\partial_i f(\theta) = \frac{f(\theta + \frac{\pi}{2} e_i) - f(\theta - \frac{\pi}{2} e_i)}{2}$$

➤ 不基于梯度的

➤ SPSA

$$\theta_k^{(t+1)} = \theta_k^{(t)} - a_t g_k(\theta)$$

$$g_k(\theta_k) = \frac{f(\theta_k + b_k \Delta_k) - f(\theta_k - b_k \Delta_k)}{2b_k \Delta_k}$$



优化困难：高维 ansatz 可能出现梯度消失，噪声导致梯度估计不可信

NISQ - early FT 算法：VQE 线路测量

➤ 线路测量

Z: 直接测量 0/1 基底概率

X: 施加 Hadamard 变换

Y: 施加 $R_x(-\pi/2)$

多体 Pauli string 测量: 对每个比特旋转, 统一在 Z 基底测量

$$H = \sum_k c_k P_k$$

实际测量变为测量每个 Pauli string 的期望值

分子电子结构问题, 哈密顿量项数 $O(n^3) \sim O(n^4)$

➤ 分组测量

➤ Commuting Grouping

两个 Pauli strings 满足相对应位置相同或者为 I

➤ Classical shadow

重构密度矩阵

➤ 分组+重要性采样

先测权重大的项, 小系数的只做随机抽样

NISQ - early FT 算法: VQE 应用

- 分子电子结构问题: 给定原子核的位置 (Born-Oppenheimer 近似), 求体系电子的能量

$$\hat{H}_e(\{R\})|\Psi_e\rangle = E_e|\Psi_e\rangle$$

$$\hat{H}_e = -\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{iA} \frac{Z_A}{|r_i - R_A|} + \sum_{i<j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + E_{nn}(\{R_A\})$$

目标:

基态能量 $E_0 \rightarrow$ 决定分子是否稳定

波函数 $|\Psi_0\rangle \rightarrow$ 决定键性质、电子密度、偶极矩等

激发态能量 \rightarrow 光谱、化学反应路径

势能面 (PES) \rightarrow 分子结构优化、动力学、化学反应

氢分子:



$$H = \sum_{p,q} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s$$

STO-3G 基组: 有四个轨道 $|1s_{A\uparrow}\rangle, |1s_{A\downarrow}\rangle, |1s_{B\uparrow}\rangle, |1s_{B\downarrow}\rangle$
需要4比特, 利用对称性, 减到2比特

Jordan-Wigner 变换:

$$a_p = \left(\prod_{j=0}^{p-1} Z_j \right) \frac{X_p + iY_p}{2} \quad a_p^\dagger = \left(\prod_{j=0}^{p-1} Z_j \right) \frac{X_p - iY_p}{2}$$

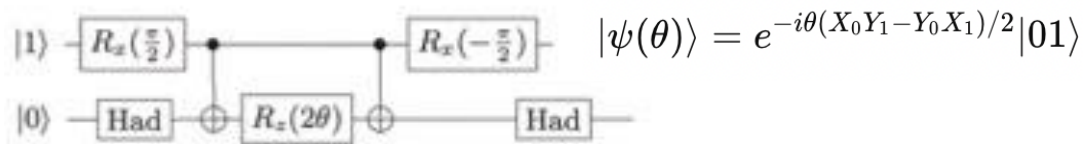
$$H = \alpha_0 I + \alpha_1 Z_0 + \alpha_2 Z_1 + \alpha_3 Z_0 Z_1 + \alpha_4 X_0 X_1 + \alpha_5 Y_0 Y_1$$

Ansatz:

$$|\psi(\theta)\rangle = e^{-i\theta(X_0 Y_1 - Y_0 X_1)/2} |01\rangle$$

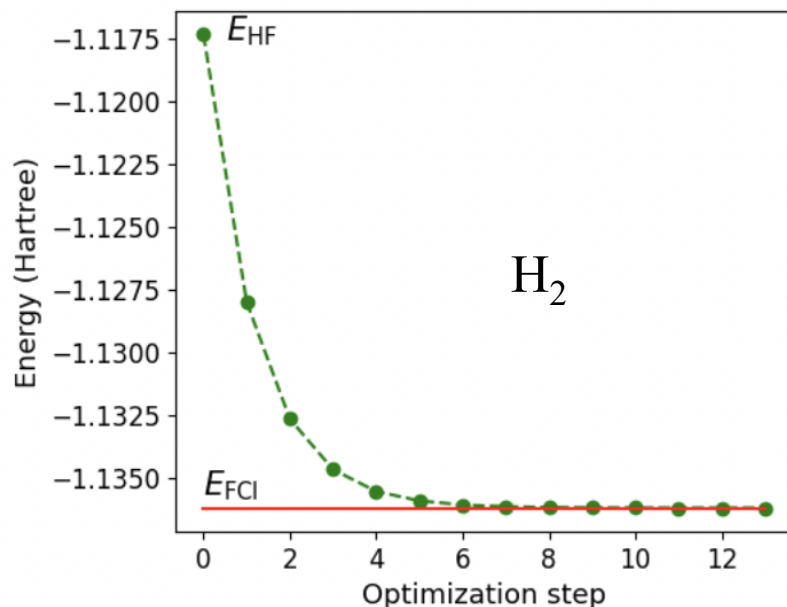
NISQ - early FT 算法: VQE 应用

➤ 分子电子结构问题



$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$$

$$H = \sum_i c_i P_i \quad E(\theta) = \sum_i c_i \langle \psi(\theta) | P_i | \psi(\theta) \rangle$$



➤ 线性代数

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 + x_3 &= 1 \\ 2x_2 - x_3 &= 1 \\ 2x_1 + 3x_2 &= 1 \end{aligned}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 2 & 3 & 0 \end{bmatrix}}_A \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}}_X = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}}_B$$

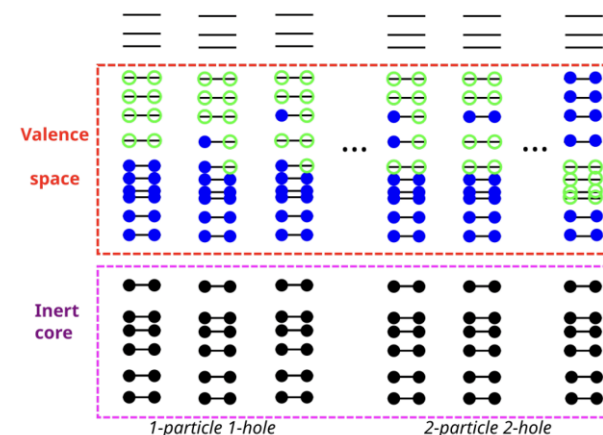
为了求解: $|x\rangle = \frac{A^{-1}|B\rangle}{||A^{-1}|B\rangle||}$, 设计哈密顿量:

$$H = A^\dagger (I - |B\rangle \langle B|) A$$

使 $|x\rangle$ 为哈密顿量的能量为0的基态

➤ 壳模型

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{i < j, k < l} \nu_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$



NISQ - early FT 算法: VQS

- 动态问题—量子变分模拟算法: 模拟物理系统的动态演化

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = -iH |\psi(t)\rangle$$

考虑一个试验态 $|\phi(\vec{\theta}(t))\rangle$

希望能用来代表 $|\psi(t)\rangle$

试验态的薛定谔方程:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = -iH |\phi(t)\rangle$$

McLachlan's 变分原理:

$$\delta \|(\partial/\partial t + iH) |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle\| = 0$$

$$\begin{aligned} & \| (d/dt + iH) |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle \|^2 \\ &= (d/dt + iH) |\psi(t)\rangle^\dagger (d/dt + iH) |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle, \\ &= \sum_{i,j} \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} \frac{\partial |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle}{\partial \theta_j} \dot{\theta}_i^* \dot{\theta}_j + i \sum_i \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle \dot{\theta}_i^* \\ &\quad - i \sum_i \langle \phi(\vec{\theta}(t)) | H \frac{\partial |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle}{\partial \theta_i} \dot{\theta}_i + \langle \phi(\vec{\theta}(t)) | H^2 |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \delta \| (d/dt + iH) |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle \|^2 \\ &= \left(\sum_j \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} \frac{\partial |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle}{\partial \theta_j} \dot{\theta}_j + i \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle \right) \delta \dot{\theta}_i^*, \\ &\quad + \left(\sum_j \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_j} \frac{\partial |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle}{\partial \theta_i} \dot{\theta}_j^* - i \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle \right) \delta \dot{\theta}_i \end{aligned}$$

其解为:

$$\sum_j \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} \frac{\partial |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle}{\partial \theta_j} \dot{\theta}_j = -i \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H |\phi(\vec{\theta}(t))\rangle$$

NISQ - early FT 算法: VQS

$$\sum_j \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} \frac{\partial | \phi(\vec{\theta}(t)) \rangle}{\partial \theta_j} \dot{\theta}_j = -i \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H | \phi(\vec{\theta}(t)) \rangle$$

这样的解的形式可以转化为:

$$\sum_j A_{i,j} \dot{\theta}_j = -i C_i$$

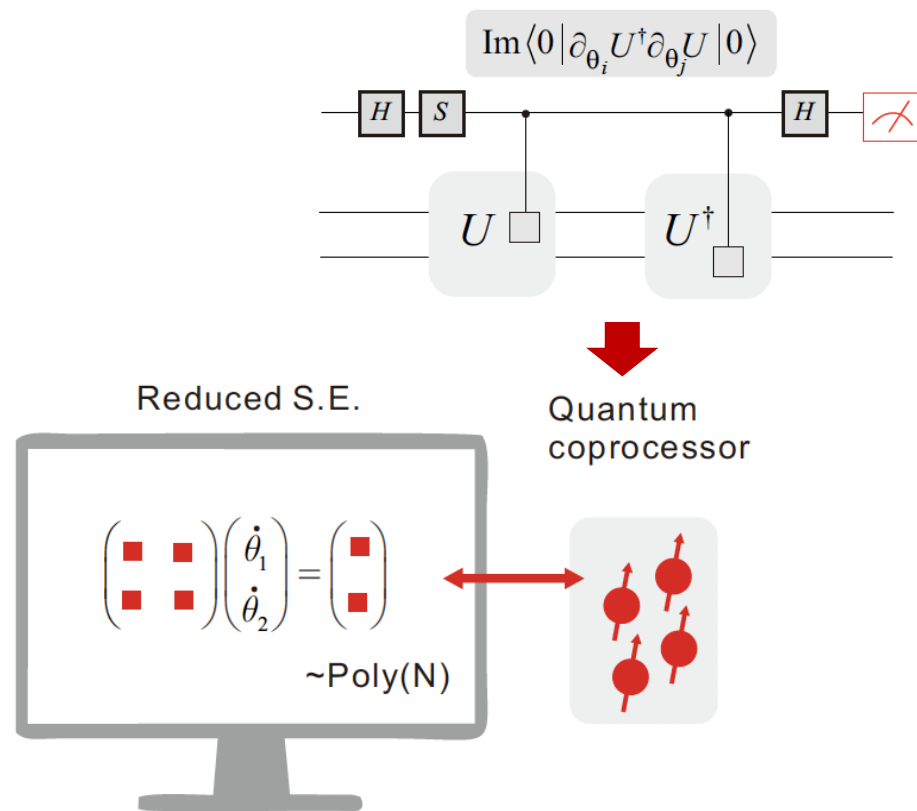
其中: $A_{i,j} = \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} \frac{\partial | \phi(\vec{\theta}(t)) \rangle}{\partial \theta_j}$

$$C_i = \frac{\partial \langle \phi(\vec{\theta}(t)) |}{\partial \theta_i} H | \phi(\vec{\theta}(t)) \rangle$$

因此可以更新参数, 从而来更新量子态,
即模拟量子态随时间的变化:

$$\vec{\theta}(t + \delta t) = \vec{\theta}(t) - \delta t \dot{\vec{\theta}}(t)$$

A和C的元素值用量子计算机测,
线性方程用经典计算机求解

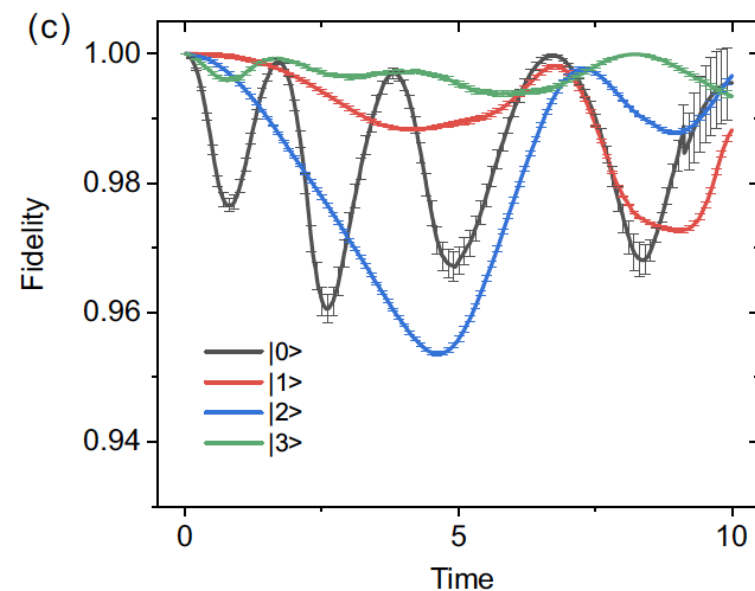
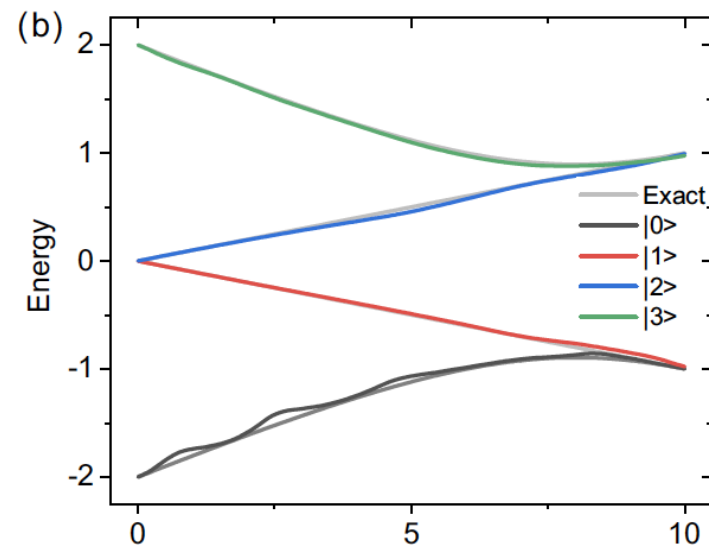
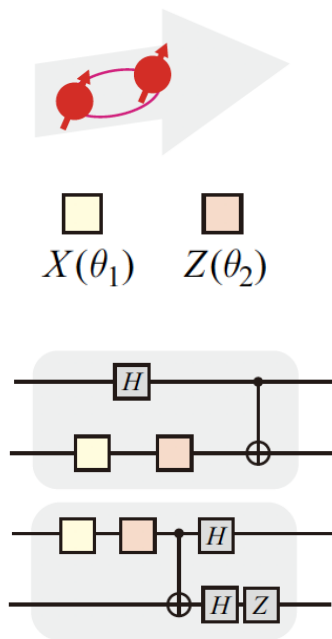
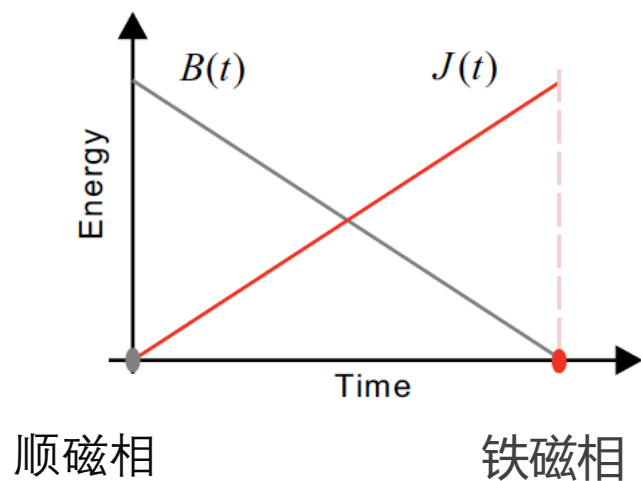


NISQ - early FT 算法：VQS 应用

➤ 模拟伊辛模型演化

$$H(t) = B(t)H_0 + J(t)H_T$$

$$H_0 = -\sum_j \sigma_x^j \text{ and } H_T = -\sum_j \sigma_z^j \sigma_z^{j+1}$$



NISQ - early FT 算法： QAOA

- Quantum Approximate Optimization Algorithm 量子近似优化算法： 主要用于求解组合优化和约束满足问题
- QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 问题

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} f(x) = x^T Q x = \sum_i Q_{ii} x_i + \sum_{i < j} Q_{ij} x_i x_j$$

Q : $n \times n$ 的实矩阵

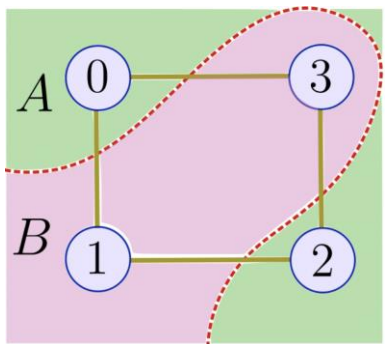
目标： 在二元空间中找到使 $f(x)$ 最小的 x

等价形式： Ising 模型 $x_i = \frac{1 - s_i}{2}$

$$H(s) = \sum_i h_i s_i + \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j + C$$

NISQ - early FT 算法: QAOA

➤ 例: Maxcut 问题



$$G = (V, E), \quad |V| = n,$$

每条边 $(i, j) \in E$ 有权重 $w_{ij} \geq 0$ 。

$$\text{Cut}(S, \bar{S}) = \{(i, j) \in E \mid i \in S, j \in \bar{S} \text{ 或反之}\}$$

$$\max_S C(S) = \sum_{(i,j) \in \text{Cut}(S, \bar{S})} w_{ij}$$

QUBO 建模:

$x_i = 0$: 顶点 i 属于子集 S

$x_i = 1$: 顶点 i 属于子集 \bar{S}

$$[x_i \neq x_j] = x_i + x_j - 2x_i x_j$$

$$\text{总权重: } C(x) = \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i + x_j - 2x_i x_j)$$

$$\max C(x) \iff \min f(x) = -C(x)$$

$$f(x) = \sum_i Q_{ii} x_i + \sum_{i < j} Q_{ij} x_i x_j$$

$$Q_{ij} = \begin{cases} w_{ij}, & (i, j) \in E, i < j, \\ 0, & \text{否则.} \end{cases}$$

$$x_i = \frac{1 - s_i}{2}$$

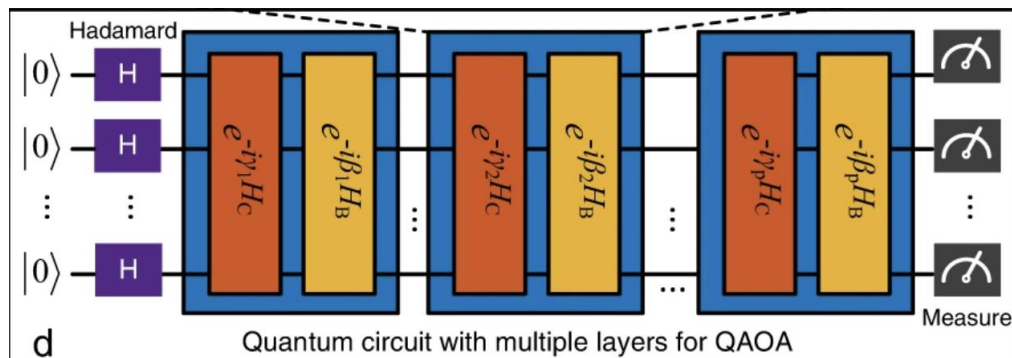
$$H_{\text{Ising}}(s) = \sum_{(i,j) \in E} \frac{w_{ij}}{2} s_i s_j + \text{const}$$

$$s_i \longrightarrow Z_i$$

$$H_C = \sum_{(i,j) \in E} \frac{w_{ij}}{2} Z_i Z_j + \text{const.}$$

NISQ - early FT 算法: QAOA

➤ 线路结构:



$$|\psi_p(\gamma, \beta)\rangle = \prod_{k=1}^p \left[e^{-i\beta_k H_M} e^{-i\gamma_k H_C} \right] |+\rangle^{\otimes n}$$

H_C : 基于问题图构造: Z 、 ZZ 、 $Z_i Z_j$

$H_M = \sum_i X_i$: 驱动叠加、跳跃到新解



变分优化

Maxcut 问题:

$$H_C = \sum_{(i,j) \in E} \frac{1 - Z_i Z_j}{2}$$

每个 $|x\rangle$ 都是 H_C 的本征态, 对应所有候选解

- ✓ 优势: 线路相对较浅, 适用性广, 结构明确, 可证明的性能界
- ✓ 困难: 对大体系优化困难, 某些问题无量子优势

NISQ - early FT 算法：不基于变分的能谱算法

算法	所需硬件	主要优势	主要困难
VQE	NISQ	线路浅、适用广	优化困难，表达能力依赖强
Quantum Subspace Diagonalization	NISQ → early FT	精度可系统提高、线路浅	对误差敏感、测量成本高
Time-series Analysis	NISQ → early FT	能得全谱、对噪声不敏感	适用范围窄、初态与测量要求高
Quantum Phase Estimation (QPE)	early FT → FT	高精度、谱信息全、适用广	线路复杂、对噪声极敏感
Quantum-assisted QMC	NISQ	缓解符号问题、线路浅	测量成本高

- 不同算法各有取舍，适用范围和目标系统是选择关键；
- 算法之间常会组合使用（如VQE+子空间、辅助QMC+子空间）。

NISQ - early FT 算法: QSD

➤ 从经典Lanczos算法演化而来:

➤ 构造Krylov 子空间 $\mathcal{K}_m(H, |v_0\rangle) = \text{span}\{|v_0\rangle, H|v_0\rangle, H^2|v_0\rangle, \dots, H^{m-1}|v_0\rangle\}$

➤ 量子算法:

$$H^s \vec{x} = E S \vec{x}$$

$$H_{ij}^s = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \quad \text{and} \quad S_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle$$

子空间的构造 $|\psi_j\rangle = e^{-iHt_j} |\bar{0}\rangle$

✓ 优势: 可以系统性提高精度

✓ 困难: 对误差敏感, 测量要求高

子空间的构造方法 $|\phi_k\rangle = f_k(H)|\varphi\rangle$

Abbr.	$f_k(x)$	Refs.
P	x^{k-1}	[19, 12]
CP	$T_{k-1}(x/h_{tot})$	[20]
GP	$x^{k-1} e^{-\frac{1}{2}x^2\tau^2}$	This work
IP	$x^{-(k-1)}$	[18]
ITE	$e^{-\tau(k-1)x}$	[8, 9]
RTE	$e^{-ix\Delta t(k-\frac{d+1}{2})}$	[10–17]
F	$L^{-1} \sum_{l=1}^L e^{-i[x-\Delta E(k-1)]\Delta t(l-\frac{L+1}{2})}$	[15]

NISQ - early FT 算法: TSA

➤ Time-series analysis (spectral analysis) 时间序列分析算法

➤ 能隙计算: $C(E) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{iEt} dt$

其中

$$f(t) = p(t) \text{Tr}[O |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|] \quad |\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi_0\rangle$$

$$\text{则 } C(E) = \int_{-\infty}^{\infty} p(t) \text{Tr}[O |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|] e^{iEt} dt$$

$$= \text{Tr} \left[O \sum_{i,j=0}^N |i\rangle \langle i| \psi_0 \rangle \langle \psi_0| j\rangle \langle j| \right. \\ \left. \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(E_i - E_j - E)t} p(t) dt \right].$$

量子线路实现

当 $p(t) = e^{-a^2 t^2}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(E_i - E_j - E)t} p(t) dt = e^{-\frac{[E - (E_i - E_j)]^2}{4a^2}}$$

$$C(E) = \text{Tr} \left[O \sum_{i,j=0}^N |i\rangle \langle i| \psi_0 \rangle \langle \psi_0| j\rangle \langle j| \frac{\sqrt{\pi}}{a} e^{-\frac{[E - (E_i - E_j)]^2}{4a^2}} \right]$$

增大 E , 峰值在 $E = E_i - E_j$ 取到

➤ 能量计算:

$$C(x, x') = \iint_{-\infty}^{\infty} f(t, t') e^{ixt} e^{ix't'} dt dt'$$

$$C(E, 0) = \text{Tr} \left[O \sum_{i=0}^N |i\rangle \langle i| \psi_0 \rangle \langle \psi_0| \frac{\sqrt{\pi}}{a} e^{-\frac{(E - E_i)^2}{4a^2}} \right]$$

✓ 优势: 能得到整个本征谱, 能直接得到能隙, 对噪声不敏感

✓ 困难: 适用于特定系统, 对初态要求高, 测量要求高

NISQ - early FT 算法: hybrid QMC

➤ Variational Monte Carlo (VMC) 变分蒙特卡罗

$$E(\lambda) = \frac{\langle \psi_T(\lambda) | H | \psi_T(\lambda) \rangle}{\langle \psi_T(\lambda) | \psi_T(\lambda) \rangle} \quad |\psi_T(\lambda)\rangle: \text{含参试验态}$$

当 $|\psi_T(\lambda)\rangle = |\psi_0\rangle$ 时, $E(\lambda) = E_0$

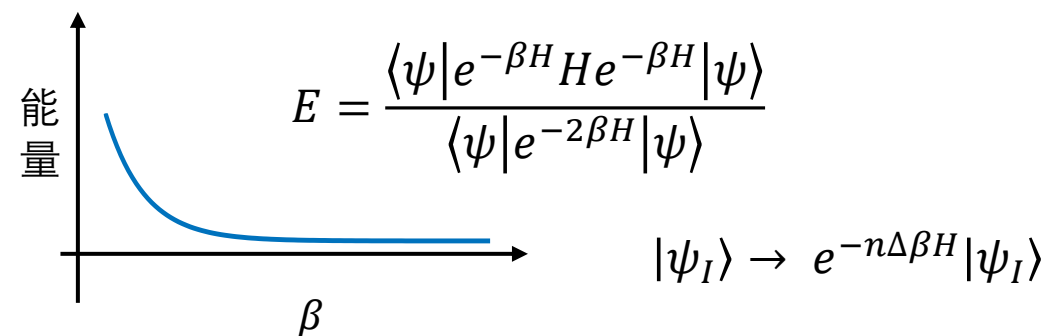
将 $|\psi_T\rangle$ 在一组基矢下展开: $|\psi_T\rangle = \sum_i^N \langle R_i | \psi_T \rangle |R_i\rangle = \sum_i^N r_i |R_i\rangle$,
 $\{|R_i\rangle\}$: Fock states

$$E = \frac{\sum_i^N \langle \psi_T | R_i \rangle \langle R_j | \psi_T \rangle \langle R_j | H | R_i \rangle}{\sum_k^N \langle \psi_T | R_k \rangle \langle R_k | \psi_T \rangle} = \frac{\sum_{ij}^N r_i^* r_j \langle R_i | H | R_j \rangle}{\sum_k^N r_k^2}$$

定义 $E_{loc}(i) = \frac{\sum_j^N r_j \langle R_i | H | R_j \rangle}{r_i}$, 则 $E = \sum_i^N \frac{r_i^2}{\sum_k^N r_k^2} E_{loc}(i)$

$$\Rightarrow \hat{E} = \langle E_{loc}(s) \rangle_{s \sim P(s)} \quad P(s) = \frac{r_s^2}{\sum_s^N r_s^2}$$

➤ Projector Monte Carlo methods



Green's function Monte Carlo (GFMC)

$$e^{-\Delta\beta H} |\psi_I\rangle \approx (1 - \Delta\beta H) |\psi_I\rangle$$

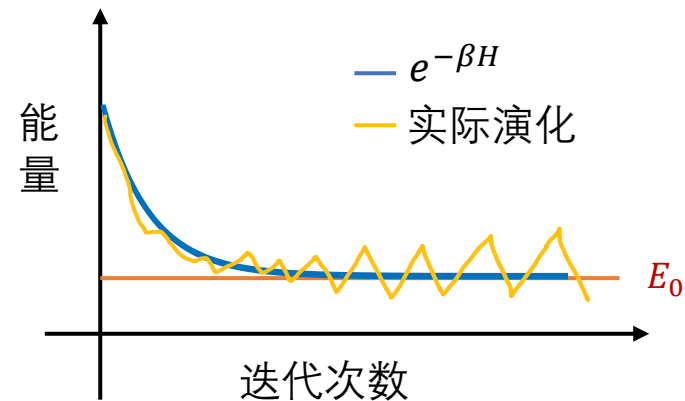
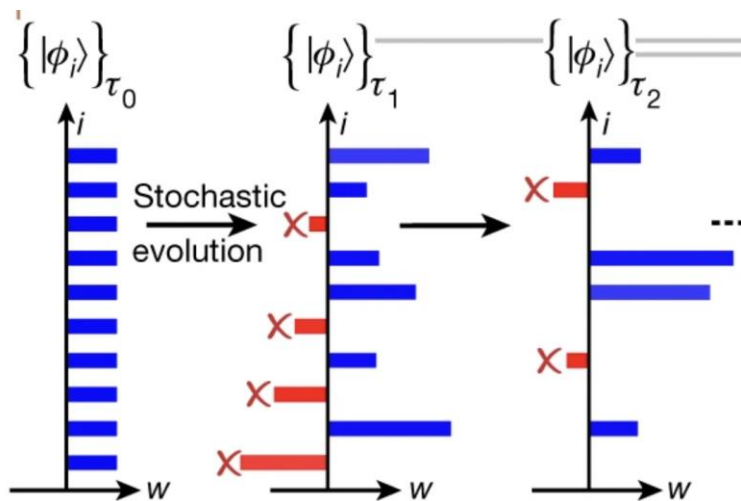
$$|\psi_I\rangle = \sum_s^N \langle R_s | \psi_I \rangle |R_s\rangle$$

初始态通过随机过程演化n步得到 $w_s, \theta_s, E_{loc}(s)$

$$E = \frac{\sum_s^N w_s e^{i\theta_s} E_{loc}(s)}{\sum_s^N w_s e^{i\theta_s}}$$

NISQ - early FT 算法: hybrid QMC

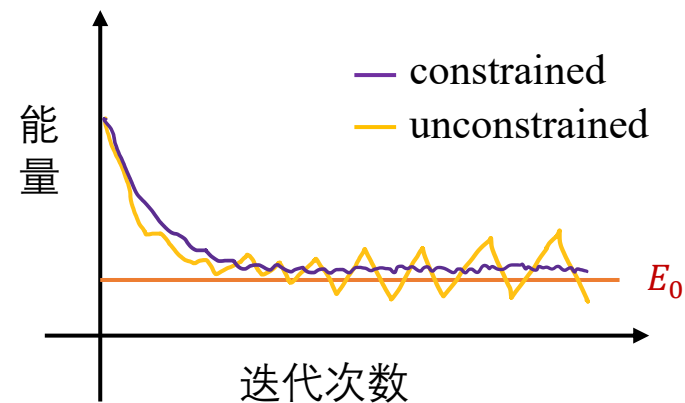
➤ 符号问题



➤ QMC with constraints

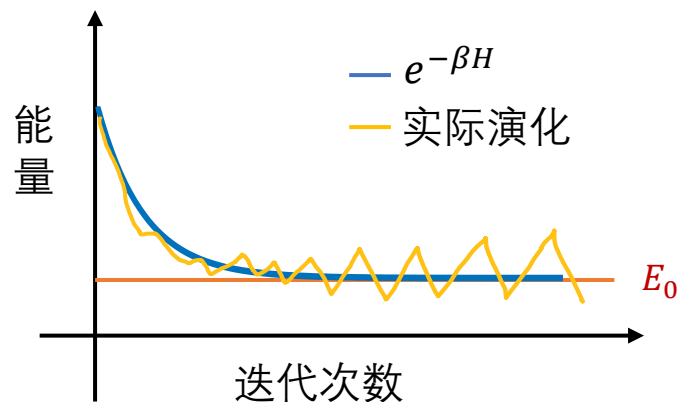
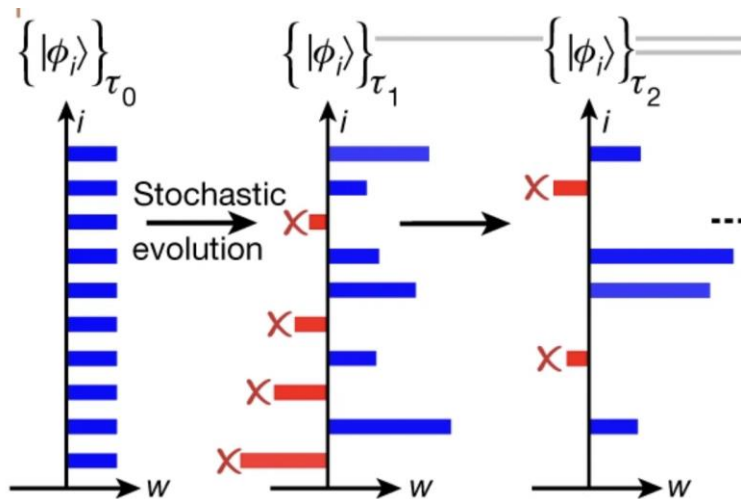
GFMC: fixed-node approximation

AFMC: phaseless approximation



NISQ - early FT 算法: hybrid QMC

➤ 符号问题



➤ $|\psi_T\rangle$ 用量子态替代

$$E = \frac{\sum_S^N w'_S E_{loc}(s)}{\sum_S^N w'_S} \quad E_{loc}(s) = \frac{\langle \psi_T | H | \phi_s \rangle}{\langle \psi_T | \phi_s \rangle}$$

- Consistent QC-GMC 和 QC-VMC 算法

用量子计算机事先采样 $\langle \psi_T | R_i \rangle$

$$\rightarrow \hat{r}_i = \langle \psi_T | R_i \rangle \rightarrow |\hat{\psi}_Q\rangle = \sum_i^N \hat{r}_i |R_i\rangle$$

- Quantum-assisted energy evaluation

$$E = \frac{\sum_{s=1}^N w_s \frac{\langle \psi_Q | H | \phi_s \rangle}{\langle \psi_C | \phi_s \rangle}}{\sum_{s=1}^N w_s \frac{\langle \psi_Q | \phi_s \rangle}{\langle \psi_C | \phi_s \rangle}}$$

$|\psi_Q\rangle$: 量子试验态

$|\psi_C\rangle$: 经典试验态

 : 量子计算

 : 经典计算

只用量子计算机计算 $E_{loc}(s)$

✓ 优势: 减轻符号问题, 线路

相对较浅

✓ 困难: 测量要求高

NISQ - early FT 算法：哈密顿量模拟算法

➤ 动态问题: 模拟物理系统的动态演化

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = -iH |\psi(t)\rangle$$

➤ 给定哈密顿量和初始量子态 $|\psi(0)\rangle$, 计算出经过一段时间 t 后的最终量子态 $|\psi(t)\rangle$

➤ 在量子计算机上实现: $U(t) = e^{-iHt}$

➤ 量子电路近似实现 e^{-iHt}

➤ 精度 ϵ 、时间 t 的成本尽可能低。

方法	精度依赖	复杂度	NISQ 适用性
Trotter	$O(t^2/r)$	差	✓
高阶 Suzuki	$O(t^{2k+1}/r^{2k})$	较差	✓
LCU	$\text{polylog}(1/\epsilon)$	很好	△
Qubitization + QSP	$\log(1/\epsilon)$	最佳	✗
VQS (变分)	中等	中等	✓✓
Analog	物理依赖	优异	✓✓✓

NISQ - early FT 算法: Trotterization

➤ 目标: $U(t) = e^{-iHt}$

$$H = \sum_j h_j P_j = \sum_j h_j \prod_i \sigma_i^j$$

每个子项 $e^{-iH_j t}$ 容易实现,

但整体 e^{-iHt} 无法直接实现

原因: $[H_j, H_k] \neq 0$

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}([A,[A,B]]+[B,[B,A]])+\dots}$$

(Baker–Campbell–Hausdorff 公式)

如果: $[H_j, H_k] = 0, \quad \forall j, k$

$$e^{-i \sum_j H_j t} = \prod_j e^{-i H_j t}$$

➤ 一阶Trotterization (Trotter–Suzuki 分解) :

$$U(t) \approx \left(e^{-iH_1 t/r} e^{-iH_2 t/r} \dots e^{-iH_L t/r} \right)^r$$

$$\epsilon = O\left(\frac{t^2}{r} \sum_{i < j} \|[H_i, H_j]\|\right)$$

➤ 二阶Trotter

$$U_2(\Delta t) = \prod_{j=1}^m e^{-iH_j \frac{\Delta t}{2}} \prod_{j=m}^1 e^{-iH_j \frac{\Delta t}{2}}$$

$$U(t) \approx \left[e^{-iH_1 t/(2r)} e^{-iH_2 t/(2r)} \dots e^{-iH_L t/(2r)} e^{-iH_L t/(2r)} \dots e^{-iH_2 t/(2r)} e^{-iH_1 t/(2r)} \right]^r$$

➤ 更高阶Trotter

$$O\left(\frac{t^{2k+1}}{r^{2k}}\right)$$

✓ 优势: 原理简单

✓ 困难: 需要深线路, 存在误差

NISQ - early FT 算法: LCU

➤ Linear combination of unitaries:

$$A = \sum_j \alpha_j U_j, \quad \alpha_j > 0$$

A是想实现的non-unitary 操作, 比如哈密顿量, 演化的多项式等

归一化:

$$\alpha = \sum_{j=0}^{L-1} \alpha_j, \quad \beta_j = \frac{\alpha_j}{\alpha} \quad \sum_j \beta_j = 1$$

在ancilla上准备态 (大概 $\log_2 L$ 个比特):

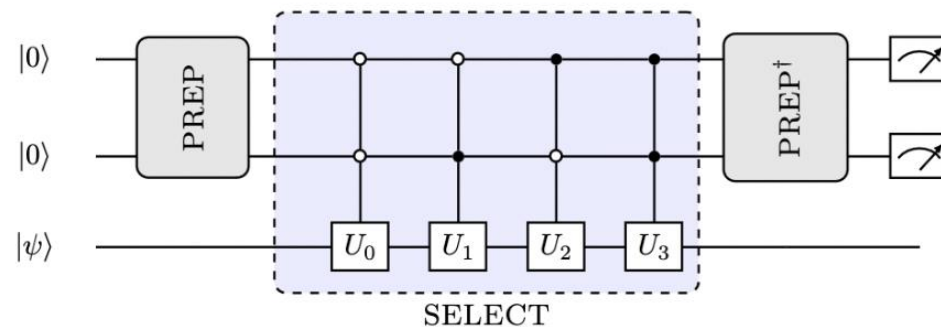
$$|0\rangle|\psi\rangle \mapsto \sum_j \sqrt{\beta_j} |j\rangle|\psi\rangle$$

Select作用在量子态 $|\psi\rangle$ 上:

$$\sum_j \sqrt{\beta_j} |j\rangle|\psi\rangle \mapsto \sum_j \sqrt{\beta_j} |j\rangle U_j |\psi\rangle$$

对ancilla逆操作:

$$\text{PREP}^\dagger \left(\sum_j \sqrt{\beta_j} |j\rangle U_j |\psi\rangle \right) = |0\rangle \left(\sum_j \beta_j U_j |\psi\rangle \right) + (\text{ancilla 非 0 分量})$$



对ancilla测量0: $\sum_j \beta_j U_j |\psi\rangle = \frac{1}{\alpha} \sum_j \alpha_j U_j |\psi\rangle = \frac{A}{\alpha} |\psi\rangle$

概率为: $\|A|\psi\rangle\|^2/\alpha^2$, 可以进行振幅放大

NISQ - early FT 算法: LCU

- Linear combination of unitaries:

$$A = \sum_j \alpha_j U_j, \quad \alpha_j > 0$$

- 哈密顿量模拟:

$$e^{-iHt} \approx \sum_{k=0}^K \frac{(-iHt)^k}{k!}$$

$$(-iHt)^k = (-i)^k t^k \left(\sum_{\ell} h_{\ell} H_{\ell} \right)^k$$

吸收相位:

$$c_j U_j = |c_j| e^{i\phi_j} U_j \quad U'_j := e^{i\phi_j} U_j$$

- ✓ 优势: 精度依赖好($\text{polylog}(1/\epsilon)$), 能实现任意函数
- ✓ 困难: 线路复杂, 需要ancilla

NISQ - early FT 算法: qubitization

➤ Qubitization:

$$H = \sum_{j=0}^{L-1} \alpha_j U_j, \quad \alpha_j > 0.$$

Block encoding:

$$U = \begin{pmatrix} H/\alpha & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$(\langle 0^a | \otimes I) U (|0^a\rangle \otimes I) |\psi\rangle = \frac{H}{\alpha} |\psi\rangle$$

$$U = (\text{PREP}^\dagger \otimes I) \text{SELECT}(U) (\text{PREP} \otimes I)$$

归一化: $\tilde{H} := \frac{H}{\alpha}$

本征态: $\tilde{H} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle, \quad \lambda \in [-1, 1]$

定义: $|0_\lambda\rangle := |0^a\rangle \otimes |\psi_\lambda\rangle$

则有: $\langle 0_\lambda | U | 0_\lambda \rangle = \langle \psi_\lambda | \tilde{H} | \psi_\lambda \rangle = \lambda.$

$$U | 0_\lambda \rangle = \lambda | 0_\lambda \rangle + \sqrt{1 - \lambda^2} | 1_\lambda \rangle$$

定义: $S := (2|0^a\rangle\langle 0^a| - I) \otimes I.$

$$S | 0_\lambda \rangle = | 0_\lambda \rangle \quad S | 1_\lambda \rangle = -| 1_\lambda \rangle.$$

定义: $W := SU$

$$\begin{aligned} W | 0_\lambda \rangle &= SU | 0_\lambda \rangle = S(\lambda | 0_\lambda \rangle + \sqrt{1 - \lambda^2} | 1_\lambda \rangle) \\ &= \lambda | 0_\lambda \rangle - \sqrt{1 - \lambda^2} | 1_\lambda \rangle \end{aligned}$$

NISQ - early FT 算法: QSP

➤ Quantum signal processing QSP:

$$W := SU$$

$$W_\lambda = \begin{pmatrix} \lambda & \sqrt{1-\lambda^2} \\ -\sqrt{1-\lambda^2} & \lambda \end{pmatrix}$$

QSP的一般结构:

$$U_\Phi(\lambda) = e^{i\phi_0 Z} W_\lambda e^{i\phi_1 Z} W_\lambda \cdots W_\lambda e^{i\phi_d Z}$$

长度为 d 的任意 QSP 序列, 对每个本征值 λ , 有

$$U_d(\lambda) = \begin{pmatrix} A_d(\lambda) & B_d(\lambda)\sqrt{1-\lambda^2} \\ -C_d(\lambda)\sqrt{1-\lambda^2} & D_d(\lambda) \end{pmatrix}$$

$$A(\lambda) = P(\lambda) \quad P(\lambda) \approx e^{-i\alpha\lambda t}, \quad \lambda \in [-1, 1]$$

对于 degree-d 的目标多项式 $P(\lambda)$, 一定存在一串 d+1 个相位 ϕ_k , 使得 $A(\lambda) = P(\lambda)$ (用 Chebyshev 展开)

$$(\langle 0| \otimes I) U_\Phi(W) (|0\rangle \otimes |\psi_\lambda\rangle) = P(\lambda) |\psi_\lambda\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda |\psi_\lambda\rangle \quad e^{-iHt} |\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda e^{-iE_\lambda t} |\psi_\lambda\rangle$$

$$\sum_\lambda c_\lambda P(\lambda) |\psi_\lambda\rangle = \sum_\lambda c_\lambda e^{-iE_\lambda t} |\psi_\lambda\rangle = e^{-iHt} |\psi\rangle$$

$$P(\tilde{H}) \approx e^{-iHt}$$

- ✓ 优势: 复杂度好 $\mathcal{O}(t \cdot \alpha + \log(1/\epsilon))$, 能实现任意函数, 非常稳定
- ✓ 困难: 线路复杂, 需要 ancilla

课程内容

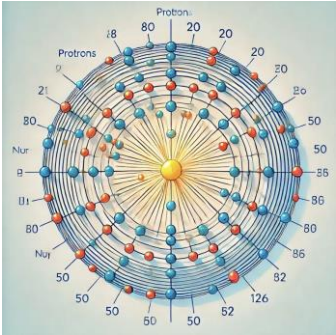
- 量子计算背景
- 量子计算基础知识
- 量子算法
 - 量子算法基础
 - 经典量子算法
 - 从NISQ到早期容错量子时代的量子算法
 - 量子算法在核物理方向的应用

核物理应用

- 基态和激发态计算
 - 不同壳模型 (Lipkin model)
 - 不同量子算法
 - 不同量子线路
 - 不同encoding方法
- 动力学模拟
 - 核子-核子散射
 - 中微子-核子散射
 - 中微子振荡
 - 低能反应 (如 $n+p \rightarrow d+\gamma$)
 - 转动、振动模式的集体动力学

核物理应用：核结构问题

- Nuclear Shell model: 在强相互作用产生的平均势场中，核子占据单粒子能级，形成壳层结构，壳层被填满时，原子核特别稳定。



Cohen-Kurath SM: ^4He core with valence nucleons filling the p shell (^4He to ^{16}O)

Wildental SM: ^{16}O core with valence nucleons filling the s-d shell (^{16}O to ^{40}Ca)

哈密顿量:

$$H = \sum_{ab} t_{ab} a_a^\dagger a_b + \frac{1}{4} \sum_{abcd} V_{ab,cd} a_a^\dagger a_b^\dagger a_d a_c$$

PHYSICAL REVIEW LETTERS **120**, 210501 (2018)

Editors' Suggestion Featured in Physics

Cloud Quantum Computing of an Atomic Nucleus

E. F. Dumitrescu,¹ A. J. McCaskey,² G. Hagen,^{3,4} G. R. Jansen,^{5,3} T. D. Morris,^{4,3} T. Papenbrock,^{4,3,*}
R. C. Pooser,^{1,4} D. J. Dean,³ and P. Lougovski^{1,†}

- ✓ 计算氦核的基态， VQE算法
- ✓ 使用谐振子基底下的离散变量表象， 截断N个 s-wave 基函数

$$H_N = \sum_{n,n'=0}^{N-1} \langle n' | (T + V) | n \rangle a_n^\dagger a_n$$

E from exact diagonalization				
N	E_N	$O(e^{-2kL})$	$O(kLe^{-4kL})$	$O(e^{-4kL})$
2	-1.749	-2.39	-2.19	
3	-2.046	-2.33	-2.20	-2.21
E from quantum computing				
N	E_N	$O(e^{-2kL})$	$O(kLe^{-4kL})$	$O(e^{-4kL})$
2	-1.74(3)	-2.38(4)	-2.18(3)	
3	-2.08(3)	-2.35(2)	-2.21(3)	-2.28(3)

核物理应用：核结构问题

➤ Nuclear Shell model

Cohen-Kurath SM: ${}^4\text{He}$ core with valence nucleons
filling the p shell (${}^4\text{He}$ to ${}^{16}\text{O}$)

Wildental SM: ${}^{16}\text{O}$ core with valence nucleons
filling the s-d shell (${}^{16}\text{O}$ to ${}^{40}\text{Ca}$)

降低测量影响: classical shadow

所需测量次数: $N \sim O(d^{3/2}/\epsilon_0^{1/2})$
($\sim O(d/N)$: when $N \gg d^2$)

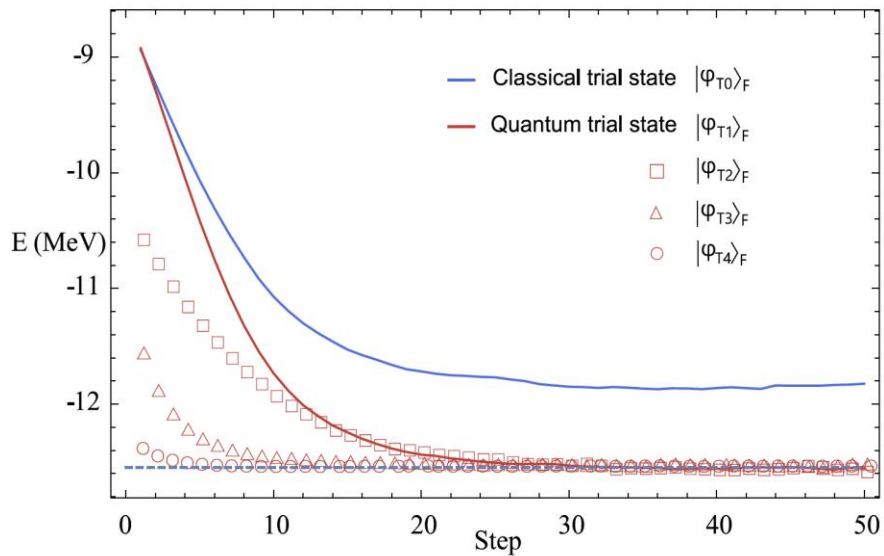
Nucleus	${}^6\text{He}$	${}^6\text{Li}$	${}^7\text{Bo}$	${}^8\text{Li}$	${}^{18}\text{F}$	${}^{18}\text{O}$
MNES	2	4	3	7	4	3
Qubits	4	6	5	7	8	6
Shots	10^4	10^5	10^4	3×10^5	10^5	10^5
Difference (MeV)	0.1957	0.2398	0.0776	0.8616	0.4402	0.0316

➤ 试验态 $|\psi_T\rangle$: 量子子空间对角化算法

$\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$ $|\psi_0\rangle$: 初态 $|\psi_1\rangle = U|\psi_0\rangle$

$$H_{ij}^S = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle \quad S_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle$$

➡ $|\tilde{\psi}_0\rangle, |\tilde{\psi}_1\rangle$ ➡ $|\tilde{\psi}_1\rangle \rightarrow (I - |\tilde{\psi}_0\rangle\langle\tilde{\psi}_0|)|\tilde{\psi}_1\rangle$



总结与展望

- 量子计算技术发展阶段：从 NISQ 到 Early Fault-Tolerant 时代
 - 可控量子比特数持续增长：超导、离子阱、光量子、Rydberg 等体系快速推进
 - 容错量子计算（FTQC）仍需更低噪声、更高门保真度和可扩展纠错方案
 - 主流纠错码：表面码、LDPC 码、量子 LDPC 纠错逐渐成熟
- 算法研究：从 NISQ 混合算法到容错量子算法
- NISQ-early FT 时代：变分类（VQE/ QAOA）、非变分类、哈密顿量模拟等
- FT 时代潜在加速：Shor、Grover、HHL、QPE、QSP等
- 算法研究重点：表达能力、资源估计、抗噪声、量子线路、量子测量