



## Algoritm cuantic cuantic de rezolvare proprie în cascadă

Daniel Gunlycke,  C. Stephen Hellberg și  John PT Stenger  
Laboratorul de cercetare navală din SUA, Washington, DC 20375, SUA

(Primit la 6 ianuarie 2023; revizuit la 9 iunie 2023; acceptat la 29 ianuarie 2024; publicat la 6 martie 2024)

Prezentăm un algoritm de soluție proprie cuantică variabilă în cascadă care necesită doar executarea unui set de circuite cuantice o dată, mai degrabă decât la fiecare iterație în timpul procesului de optimizare a parametrilor, crescând astfel randamentul de calcul. Acest algoritm folosește o unitate de procesare cuantică pentru a sonda funcțiile de masă de probabilitate necesare, iar o unitate de procesare clasică efectuează calculele rămase, inclusiv minimizarea energiei. Forma ansatz nu restrânge spațiul Fock și oferă control deplin asupra stării de încercare, inclusiv implementarea simetriei și a altor constrângeri motivate fizic.

DOI: [10.1103/PhysRevResearch.6.013238](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.6.013238)

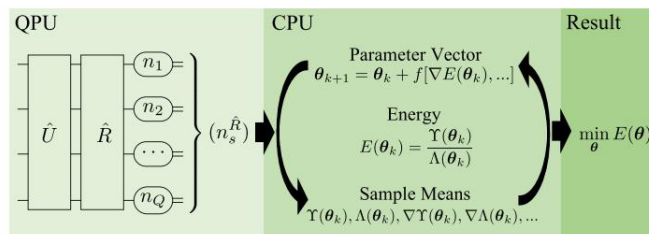
## I. INTRODUCERE

Calculul cuantic (QC) oferă avantaje inerente față de calculul clasic pentru rezolvarea anumitor sarcini matematice [1–8]. Una dintre cele mai promițătoare domenii de aplicare este simularea sistemelor mecanice cuantice [7,9,10]. Deoarece dimensiunea spațiului Hilbert care cuprinde stările cuantice ale unui sistem fermionic crește exponențial cu dimensiunea sistemului, efectuarea de operații pe acest spațiu este o sarcină insolubilă pentru calculatoarele clasice convenționale pentru toate sistemele, cu excepția celor mai mici. Un computer cuantic, pe de altă parte, poate procesa un astfel de spațiu Hilbert mapându-l la spațiul Hilbert al unui registru cuantic - a cărui dimensiune crește exponențial cu numărul de qubiți - și apoi efectuând operații de poartă cuantică pe acest registru.

Cei doi algoritmi principali pentru calculele QC ale sistemelor mecanice cuantice sunt algoritmul de estimare a fazei cuantice [11] și algoritmul variabil cuantic eigensolver (VQE) [12]. Prin recrutarea calculatoarelor clasice pentru sarcini eficiente din punct de vedere computațional, acest din urmă algoritm necesită relativ puține operații de poartă, ceea ce limitează decoerența în timpul calculelor. Deoarece expunerea mai redusă la decoerență permite fidelități de calcul mai mari, acest algoritm are o nevoie redusă de corecție a erorilor cuantice, făcându-l ideal pentru calculul cuantic zgomotos la scară intermediară [13]. De la introducerea sa, algoritmul VQE a fost aplicat pentru a calcula energia stării fundamentale a unui număr de sisteme din chimie și fizică [12,14–33].

Un dezavantaj al algoritmului VQE este că debitul de calcul este limitat de numărul mare de execuții de circuit cuantic necesare pe unitatea de procesare cuantică (QPU). Pentru fiecare minimizare a energiei, acest număr este

produsul numărului de coeficienți nenuli în expansiunea Pauli a Hamiltonianului care descrie sistemul înmulțit cu numărul de fotografii din procesul de eşantionare ori cu numărul de iterații din procesul de optimizare ori cu numărul de valori ale energiei necesare per iterație în rutina de optimizare aleasă. Limitarea este în parte cauzată de dependența circuitelor cuantice de parametrii variabili, care împletește procesele de eşantionare și optimizare și necesită ca circuitele cuantice să fie executate din nou de fiecare dată când parametrii sunt actualizați. Pentru a face față acestei provocări, propunem algoritmul de soluție proprie cuantică variabilă în cascadă (CVQE), în care parametrii variabili sunt procesați exclusiv pe unitatea de procesare clasică (CPU). QPU este încă necesar pentru implementarea și măsurarea unei stări de ghidare pentru a produce funcții de masă de probabilitate care sunt apoi utilizate în procesul de optimizare. Această abordare este posibilă deoarece, deși dimensiunea spațiului Hilbert crește exponențial



SMOCHIN. 1. Schema unei implementări a algoritmului cuantic eigensolver variabil în cascadă. QPU execută un set de circuite cuantice, fiecare generând o stare cuantică unică  $\hat{R} \hat{U} |0\rangle$  care, atunci când este măsurată, generează o familie de numere de ocupație  $(n_1, n_2, \dots, n_Q)$  înregistrate ca  $n_s$ . Repetarea aceluiași măsurători de mai multe ori pentru diferite  $\hat{R}$  produce colecții de familii  $(nR^s)$  care sunt transmise ca intrare către CPU. CPU folosește aceste eşantioane împreună cu un vector de parametru  $\theta_k$  pentru a calcula derivatele energiei  $E(\theta)$  a stării de încercare  $|\theta\rangle$  la  $\theta = \theta_k$  prin obținerea mijloacelor eşantionului pentru  $\Upsilon(\theta_k)$ ,  $\Lambda(\theta_k)$ ,  $\Upsilon'(\theta_k)$ , și  $\Lambda'(\theta_k)$  în ecuațiile (14) și (21). Aceste derivate sunt apoi folosite pentru a genera un nou vector de parametri  $\theta_{k+1}$ , folosind o metodă de optimizare  $f[\nabla E(\theta_k), \dots]$ , iar procesul se repetă până când optimizarea este finalizată și se obține energia minimă căutată.

\*lennart.d.gunlycke.civ@us.navy.mil

Publicat de Societatea Americană de Fizică în condițiile Creative Commons Attribution 4.0 International licență. Distribuirea ulterioară a acestei lucrări trebuie să mențină atribuirea autorului (autorilor) și titlul articolului publicat, citarea revistei și DOI.

odată cu dimensiunea sistemului, numărul de parametri variaționali din orice algoritm VQE poate crește cel mult polinomial - altfel cantitatea de resurse de calcul necesare ar crește exponențial. Un alt beneficiu al separării execuțiilor circuitului cuantic de pe QPU și a procesului de optimizare pe CPU este că procesul de optimizare din algoritmul CVQE compensează parțial erorile introduse în timpul execuțiilor circuitului cuantic.

După cum este ilustrat în Fig. 1, având în vedere mostrele dintr-un set inițial de măsurători pe QPU, minimizarea energiei poate fi ulterior finalizată numai pe CPU. Prin întreruperea dusătorilor între QPU și CPU în fiecare iterație a procesului de optimizare în algoritmul VQE, algoritmul CVQE reduce numărul de execuții ale circuitului cuantic cu factorul numărului de valori ale energiei care trebuie calculate în timpul procesului de optimizare. De exemplu, luăm în considerare un proces de optimizare care estimează gradientul folosind aproximarea stocastică a perturbațiilor simultane [34], care necesită 2 valori de energie pe iterație și necesită 250 de iterații (cf. calculele lui BeH2 din Ref. [18]). Debitul de calcul folosind algoritmul CVQE ar fi crescut în acest caz cu un factor de 500. Cu alte cuvinte, acum am putea finaliza calcule care anterior ar fi durat luni în câteva ore.

## II. METODĂ

Pentru a demonstra metoda din spatele algoritmului CVQE, luăm în considerare un sistem de fermioni identici descris de Hamiltonianul  $H$  și lăsam spațiul Fock antisimetric  $F$  să servească drept spațiu de reprezentare pentru stările cuantice ale acestui sistem. Scopul nostru este să obținem o limită superioară pentru energia stării fundamentale, de exemplu, a sistemului, prin aplicarea metodei variaționale a mecanicii cuantice, care poate fi afirmată ca

$$\text{De exemplu, } \min_{\theta} E(\theta), \quad (1)$$

unde  $\theta$  este un vector de parametri variaționali în parametrul care este o spațiu  $\mathbb{R}^d$  submulțime a spațiului de coordonate real  $d$ -dimensional, în ansatz, iar  $E(\theta)$  este energia stării de încercare  $|\theta\rangle$

Construim starea de încercare  $|\theta\rangle$  din starea de ghidare normalizată

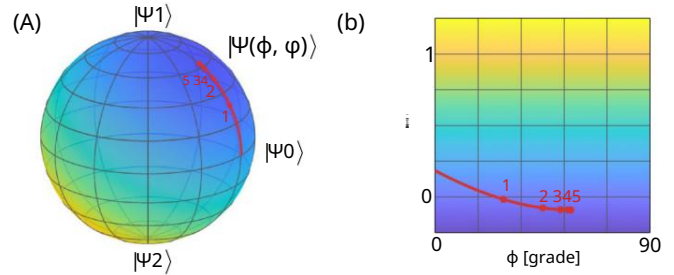
$$|\theta\rangle = U^\dagger |\theta\rangle, \quad \text{unde} \quad (2)$$

$U^\dagger$  este un operator unitar și  $|\theta\rangle$  este starea de vid în  $F$ , pe care o pregătim pe QPU pentru eşantionare. Spre deosebire de operatorii unitari aplicați pe QPU în ansatz-ul cuplat unitar utilizat în mod obișnuit [12,14,15,35-49], ansatz-ul eficient din punct de vedere hardware [18,50-57] și cei utilizați în diverse Algoritmi VQE adaptabili sau antrenabili [58-66], se cere ca  $U^\dagger$  să fie independent de  $\theta$ . În schimb, introducem dependența de  $\theta$  prin operatorul  $e^{i\lambda^\dagger(\theta)}$  care transformă  $|\theta\rangle$  în starea noastră de încercare

$$|\theta\rangle = e^{i\lambda^\dagger(\theta)} |\theta\rangle, \quad \text{unde} \quad (3)$$

$\lambda^\dagger(\theta)$  este un operator. În consecință, energia lui  $|\theta\rangle$  este de forma

$$E(\theta) = \langle \theta | \frac{Y(\theta)}{N}, \quad (4)$$



SMOCHIN. 2. Energia  $E(\phi, \varphi)$  a stării de încercare singlet cu doi electroni  $|\Psi(\phi, \varphi)\rangle$  a modelului Hubbard cu două locuri cu hamiltonian  $H = t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \sum_i \epsilon_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ , unde  $t$  și  $\epsilon_i$  sunt coeficienți și  $i, j \in \{0, 1\}$  și  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  de situs și spin, astfel încât toate perechile de indici sunt elemente din set de indici cu un electron  $(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)$ . Spațiul parametrilor a fost restricționat lăsând  $\lambda_i$  pentru toate familiile  $n$  de numere de ocupație, cu excepția celor asociate cu doi electroni cu o componentă z zero a spinului total. Simetria permutării necesită ca stările singlet să se transforme ca  $A_{1g}$  în grupul de puncte  $D_{4h}$ , ceea ce înseamnă că  $|\Psi(\phi, \varphi)\rangle$  este o combinație liniară a  $|\Psi_1\rangle = (|0110\rangle + |1001\rangle)/\sqrt{2}$  și  $|\Psi_2\rangle = (|0011\rangle + |1100\rangle)/\sqrt{2}$ . Această cerință este impusă de constrângerile de simetrie  $\lambda_{0110} = \lambda_{1001} = \lambda$  și  $\lambda_{0011} = \lambda_{1100} = \lambda$ . Ecuația parametrică  $\lambda = \lambda(\phi, \varphi) = \varphi/2 \ln \tan(\varphi/2)$  este definită pe spațiul parametrilor  $\{(\phi, \varphi): \phi \in (\pi/2, \pi/2), \varphi \in (\pi, \pi)\}$ , unde  $\phi$  și  $\varphi$  reprezintă latitudinea și, respectiv, longitudinea pe o sferă. Energia  $E(\phi, \varphi)$  pentru  $t/U = 0,158$  este prezentată colorat în (a) cu bara de culori din (b).

Curbele roșii urmăresc trasee gradient-coborâre de-a lungul  $\varphi = 0$  de la starea de ghidare inițială  $|\theta\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}$  până la starea fundamentală la  $\phi = 1$  rad.

cu valorile așteptărilor

$$Y(\theta) = \langle \theta | e^{-i\lambda^\dagger(\theta)} H e^{i\lambda^\dagger(\theta)} | \theta \rangle, \quad (5a)$$

$$N(\theta) = \langle \theta | e^{-i\lambda^\dagger(\theta)} e^{i\lambda^\dagger(\theta)} | \theta \rangle. \quad (5b)$$

Pentru a face progrese suplimentare, avem nevoie de o bază pentru spațiul Fock  $F$ . Mai întâi, totuși, introducem setul de indici  $Q$  total ordonat pentru baza  $(|\psi_q\rangle)_{q \in Q}$  pentru spațiul Hilbert cu un fermion  $H$ . Cardinalitatea  $Q$  din acest set (adică dimensiunea lui  $H$ ) este aici măsura noastră a mărimii sistemului. Fiecare  $q \in Q$  are un număr de ocupație  $n_q \in \{0, 1\}$  care este zero dacă  $|\psi_q\rangle$  este neocupat și  $n_q = 1$  dacă este ocupat. Fiecare familie de numere de ocupație  $n = (n_q)_{q \in Q}$  în puterea carteziană  $N = \{0, 1\}^Q$  identifică operatorul asociat,

$$c_n^\dagger = \prod_{q \in Q} (c_q^\dagger)^{n_q}, \quad (6)$$

pe  $F$ , unde  $c_q^\dagger$  este operatorul de creație fermionică pentru fiecare  $q$  din  $Q$ . Folosind acești operatori, generăm stările Fock  $|n\rangle = c_n^\dagger |\theta\rangle$ , pentru tot  $n \in N$  și apoi selectăm mulțimea tuturor Fock afirmă că  $\{|n\rangle\}$  este baza noastră pentru  $F$ .

Alegem ca operatorul  $\lambda^\dagger(\theta)$  să fie diagonal în această bază, deci aceea

$$\lambda^\dagger(\theta) = \sum_{n \in N} \lambda_n(\theta) |nn\rangle, \quad (7)$$

TABEL I. Coeficienții  $h_l$ , operatori  $C_l^\dagger$   $C_l$ , familii  $n_{\pm}$  și submulțimile  $Q_l^\dagger$  și  $Q_l$  și subfamiliile  $n_{\pm}^+$  și  $n_{\pm}^-$  pentru fiecare interacțiune din model Hubbard cu două locuri cu Hamiltonianul  $H = t \sum_{\sigma} (c_0^\dagger c_1 \sigma + H_c) + U \sum_i c_i^\dagger c_i c_i c_i$ , unde  $t$  și  $U$  sunt coeficienți și  $i, j \in \{0, 1\}$  și  $\sigma \in \{ \uparrow, \downarrow \}$  sunt indici de situs și, respectiv, de spin, astfel încât toate perechile de indici sunt elemente în  $Q = (0, 0, 1, 1)$ .

$h_l$	$C_l^\dagger C_l$	$n_{\pm}^+$	$n_{\pm}^-$	$Q_l^\dagger$	$Q_l$	$n_{\pm}^+$	$n_{\pm}^-$	$n_{\pm}$	$n_{\pm}$
t	$c_0^\dagger c_1$	(1, 0, 0, 0)	(0, 0, 1, 0)	(0, 1)	(0, 1)	(1, 0)	(0, 0)	(0, 1)	(0, 0)
t	$c_1^\dagger c_0$	(0, 0, 1, 0)	(1, 0, 0, 0)	(0, 1)	(0, 1)	(0, 1)	(0, 0)	(1, 0)	(0, 0)
t	$c_0^\dagger c_1$	(0, 1, 0, 0)	(0, 0, 0, 1)	(0, 1)	(0, 1)	(1, 0)	(0, 0)	(0, 1)	(0, 0)
t	$c_1^\dagger c_0$	(0, 0, 0, 1)	(0, 1, 0, 0)	(0, 1)	(0, 1)	(0, 1)	(0, 0)	(1, 0)	(0, 0)
U	$c_0^\dagger c_0 c_0 c_0$	(1, 1, 0, 0)	(1, 1, 0, 0)	( )	(0, 0, 1, 1)	( )	(1, 1, 0, 0)	( )	(1, 1, 0, 0)
U	$c_1^\dagger c_1 c_1 c_1$	(0, 0, 1, 1)	(0, 0, 1, 1)	( )	(0, 0, 1, 1)	( )	(0, 0, 1, 1)	( )	(0, 0, 1, 1)

unde  $\lambda_n(\theta)$   $C$  sunt ecuații parametrice complexe. Procesul nostru stare în Ec. (3) poate fi astfel exprimat ca

$$|\theta\rangle = \sum_{n \in N} e^{i\lambda_n(\theta)} |n\rangle, \quad (8)$$

unde este componenta lui  $|0\rangle$  asociată cu  $|n\rangle$ . Această formă este atât generală, cât și intuitivă. Este general pentru că dacă alegem ca setul nostru de ecuații parametrice  $\{\lambda_n(\theta)\}$  să fie a hartă surjectivă a pe  $C^2Q$  și componentele noastre  $0_n$  la să fie diferit de zero, pentru tot, apoi ansatz acoperă întregul spațiu  $n \in N$  Fock. Este intuitiv deoarece fiecare  $\lambda_n(\theta)$  este asociat cu o stare Fock  $|n\rangle$ , care ne permite atât să excludem stările Fock specifice lăsând  $\lambda_n(\theta)$  și să impunem simetria constrângerii furnizate în termeni de stări Fock pe mulțimea noastră  $\{\lambda_n(\theta)\}$ . Este oferit un exemplu de set de ecuații parametrice care atât exclud stări, cât și impun constrângerii de simetrie. În legenda Fig. 2 și în Anexa A, pentru un singlet starea de încercare cu doi electroni a modelului Hubbard cu două site-uri. Noi poate chiar alege ansatz-ul nostru să depindă de operatorii numerici ca în implementarea recentă [67] a Jastrow-Gutzwiller ansatz [68,69] în cadrul algoritmului CVQE, unde  $\lambda_n(\theta) = \sum_{q \in Q} \theta q_n q_n$ . În sfârșit, prin implementarea starea de ghidare  $|0\rangle$  pe QPU, am putea crea ansatz-uri mai aproape de starea fundamentală decât ar putea fi atins prin metode clasice, cum ar fi metoda Hartree-Fock și Monte variată ional Carlo.

Deoarece dimensiunea lui  $F$  crește exponențial cu dimensiunea sistemului, în general nu putem diagonaliza  $e^{-i\lambda^\dagger(\theta) H e^{-i\lambda(\theta)}}$  pe un CPU pentru  $Q$  mare. În schimb, observăm că valoarea așteptată a unui operator este o funcție liniară, care ne permite să extindem valoarea așteptată în Eq. (5a) și diagnosticat operatorul în fiecare valoare așteptată în mod independent. Înainte de a face acest lucru, totuși, exprimăm Hamiltonianul, folosind operatorii din Ec. (6), sub forma de

$$H = \sum_l h_l C_l^\dagger C_l, \quad (9)$$

unde mulțimea  $L$  conține toți indicii, pentru care coeficienții  $h_l$   $C$  sunt nenule, iar familiile  $n_{\pm} = (n_{\pm}^+ |q\rangle) \in N$  sunt definit de termeni

$$n_{lq}^+ = \begin{cases} 1, & \text{dacă } c_l^\dagger \text{ este prezent,} \\ 0, & \text{dacă } c_l^\dagger \text{ nu este prezent,} \end{cases} \quad (10a)$$

$$n_{lq}^- = \begin{cases} 1, & \text{dacă } c_l \text{ este prezent,} \\ 0, & \text{dacă } c_l \text{ nu este prezent.} \end{cases} \quad (10b)$$

De exemplu, coeficienții și familiile pentru cele două site-uri Modelul Hubbard a fost prezentat în tabelul I.

Presupunem că fiecare  $l$   $L$  afectează doar o submulțime a stărilor de un fermion, pe care le identificăm prin mulțimea de indici  $Q_l = Q$ , și că numărul acestor stări  $Q_l$  (care nu mai este decât doi pentru interacțiuni cu un fermion, patru pentru doi fermion interacțiuni etc.) nu crește cu dimensiunea sistemului  $Q$ . Noi definiți de asemenea mulțimea complementară  $Q_l^c = Q \setminus Q_l$ , care conține indicii stărilor care nu sunt afectate de interacțiune și, spre deosebire de prima, numărul acestor din urmă stări  $Q_l^c = Q \setminus Q_l$  crește cu dimensiunea sistemului. Rețineți că accentele de puncte și săgeți de aici se referă la „câteva specifice” și „toți și mulți și alți” indici din  $Q$ , respectiv. Prin afectat stări, ne referim la stări fie cu o creație asociată  $c_l^\dagger$  sau operator de anihilare  $c_l$  în termenul hamiltonian — dar nu ambele, ca operator numeric  $n_l = c_l^\dagger c_l$  ar putea fi apoi format, care cu excepția unui scalar lasă stările intacte. Astfel, cel seturile de indici complementari pot fi exprimate ca

$$Q_l^\dagger = \{q \in Q : n_{lq}^+ = n_{lq}^-\}, \\ Q_l = \{q \in Q : n_{lq}^+ = n_{lq}^-\}. \quad (11)$$

Folosind aceste seturi, împărțim familiile  $n$  cu harta

$$n = n^+ n^-, \quad (12)$$

în perechi de subfamilii  $n^+$  și  $n^-$  de  $n$ , pentru toate  $n \in N$  unde by definiție numerele de ocupație sunt potrivite astfel încât

$$n^+ q = n_q, \text{ pentru toate } q \in Q_l^\dagger, \\ n^- q = n_q, \text{ pentru toate } q \in Q_l. \quad (13)$$

După cum arată Anexa B, această separare ne permite să ne extindem fiecare termen din Hamiltonianul din Ec. (9) folosind un complet

multime de  $2Q$  operatori hermitieni, pe care totii îi diagonalizăm analitic folosind o multime de operatori unitari  $\{R^{\hat{m}}\}$  indexați cu  $M = \{x, y\}Q$ .

După această diagonalizare, constatăm că valorile așteptate din Ec. (5) poate fi exprimat ca

$$Y(\theta) = \sum_{l, m, n} \langle l | M | n \rangle \sum_{m'} \langle m' | R^{\hat{m}} | m \rangle e^{i\lambda_{m'}(\theta)} \langle m | R^{\hat{m}} | m' \rangle \langle m | R^{\hat{m}} | n \rangle \quad (14a)$$

$$\langle \theta | = \sum_{n, N} e^{2 \operatorname{Im} \lambda_n(\theta)} | 0 \rangle_n \quad (14b)$$

unde sunt coeficienți complexi

$$u_{lmn} = \frac{\pi |h|}{2Q!} N! n! m! z_{ln}, \quad (15)$$

unde  $\pi \{ \pm 1 \}$  este dat de permutarea care separă operatorii fermionici indexați de  $Q$  și  $Q$ , tors  $N$ ,  $V$  și  $Z$  sunt furnizați iar în ecuațiile (B13), (B18) și respectiv (B25). Vezi Anexele A și B pentru o aplicare și o derivare a Eq. (14), respectiv, și originea și semnificația fiecărui factor din Ec. (15).

Pe măsură ce starea de ghidare  $|0\rangle$  este pregătită pe QPU, avem nevoie de o hartă de la spațiul Fock la spațiul Hilbert al stărilor cuantice ale registrului de qubit QPU. Deoarece qubiții sunt distincți, spațiul Hilbert pentru un registru qubit este o putere tensorială a spațiului Hilbert bidimensional de un qubit  $H$ . Pentru a exista un izomorfism între spațiul Fock și această putere tensorială, avem nevoie de un registru care să cuprindă exact  $Q$  qubiți, astfel încât  $\dim H^{\otimes Q}$  este egal cu  $\dim F$ . Fie  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  baza noastră pentru fiecare spațiu de qubit  $H$  și definim izomorfismul  $F \rightarrow H^{\otimes Q}$  prin maparea stărilor Fock  $|n\rangle$  la produse tensoriale

$$|n\rangle = \prod_{q \in Q} |n_q\rangle \quad (16)$$

pentru toate  $n \in N$ . Această mapare Jordan-Wigner [10] transformă starea de ghidare  $|0\rangle$  la sine și, astfel, păstrează toate ei. Acest lucru face simplu pentru  $U^{\hat{c}}$  care construiește componentele  $0_n$  un circuit cuantic folosește teorema  $X$ -port pentru a genera starea fundamentală  $|n\rangle$  a unui model de sistem în cadrul aproximării fermionilor independente, pentru care componentele și de acolo introduc ponderi asociate cu alte stări sunt  $0_n$ , Fock prin adăugarea suplimentară. portii.

Operatorii unitari utilizați în diagonalizare sunt reprezentați de

$$R^{\hat{m}} = \prod_{q \in Q} \left( \prod_{y \in Q} \delta_{mqx} R^{\hat{m}} \delta_{ymq} \right) \quad (17)$$

pe  $H^{\otimes Q}$  pentru toate familiile  $m = (m_q)_{q \in Q} \in M$ , unde operatorul  $\hat{\pi}$  este definit astfel încât să permute operatorii de pe spațiul Hilbert individuale  $H$  din  $H^{\otimes Q}$  la ordinea dată de  $Q$  (cf. Anexa B),  $R^{\hat{x}}$  și  $R^{\hat{y}}$  sunt operatori care descriu rotații de un qubit în jurul axelor  $x$  și  $y$  cu  $\pi/2$  și  $i$ , respectiv,  $\pi/2$ , iar  $\hat{I}$  este operatorul de identitate pe  $H$ . Operatorii de rotație  $R^{\hat{x}}$  și  $R^{\hat{y}}$  poate fi implementat într-un circuit folosind secvențele de port  $i-X$  și  $-X-H$  (sau  $-H-Z$ ), respectiv.

### III. PRELEVARE

În eșantionarea noastră pe QPU, folosim faptul că probabilitatea ca o măsurătoare în baza  $\{|n\rangle\}$  pentru  $H^{\otimes Q}$  să prăbușească starea  $R^{\hat{c}}|0\rangle$ , pentru orice operator unitar  $R^{\hat{c}}$ , la starea  $|n\rangle$  asociată cu un rezultat particular  $n$  în spațiul  $n$  este dat de funcția de masă de probabilitate  $P[R^{\hat{c}}|0\rangle = |0\rangle_n \otimes |n\rangle$ . (18)

Efectuând  $S$  măsurători identice ale  $R^{\hat{c}}|0\rangle$  și înregistrând rezultatul  $n$  al fiecărei lovituri și într-o mulțime  $S$ , obținem o colecție de familii  $(nR^{\hat{c}})_S$ . Având în vedere acest eșantion, putem aplica apoi legea statisticianului inconștient și putem aproxima valoarea așteptată a unei funcții  $g(n)$  cu media aritmetică, care rezultă

$$g(n) = \frac{1}{S} \sum_{s \in S} g(nR^{\hat{c}}_s) \quad (19)$$

unde dimensiunea eșantionului  $S$  este aleasă astfel încât să se obțină acuratețea statistică dorită.

În funcțiile de ansatz-ul particular de interes - care ar putea depinde în mod remarcabil chiar de eșantionarea în sine prin ecuațiile parametrice - nu există neapărat o abordare unică pentru a calcula valorile așteptate în Ec. (14). O abordare care este garantată să funcționeze este colectarea de mostre pentru toți operatorii unitari  $R^{\hat{m}}$  (și operatorul de identitate dacă nu a fost deja inclus). Constatăm că numărul acestor eșantioane este egal cu numărul de coeficienți nenuli în expansiunea Pauli a Hamiltonianului în algoritmul VQE. După aplicarea ecuațiilor (18) și (19), numărul de termeni din Ec. (14) crește doar polinomial cu dimensiunea sistemului. Astfel, putem calcula apoi energia  $E(\theta)$  în Eq. (4), pentru orice vector parametru variațional  $\theta$  în  $n$ , folosind CPU. În consecință, prin reutilizarea probelor colectate, realizăm optimizarea în întregime pe un CPU. Numărul total de execuții ale circuitului cuantic în CVQE este, în cel mai general caz, dat de numărul de probe înmulțit cu numărul de lovituri. După cum s-a menționat mai sus, numărul de execuții de circuit cuantic în CVQE a fost ca rezultat, comparativ cu VQE, redus cu factorul numărului de valori energetice care trebuie calculate în timpul procesului de optimizare.

### IV. OPTIMIZAREA

Deoarece minimizarea energiei din algoritmul CVQE este eficientă pe un procesor, multe metode de optimizare și implementări devin disponibile. O abordare este calcularea gradientului energetic

$$E(\theta) = \frac{\langle \theta | Y(\theta) | \theta \rangle}{\langle \theta | \theta \rangle} \quad (20)$$

folosind gradientii

$$Y(\theta) = \sum_{l, m, n} \langle l | M | n \rangle \sum_{m'} \langle m' | R^{\hat{m}} | m \rangle e^{i\lambda_{m'}(\theta)} \langle m | R^{\hat{m}} | m' \rangle \langle m | R^{\hat{m}} | n \rangle \quad (21a)$$

$$\langle \theta | = \sum_{n, N} e^{2 \operatorname{Im} \lambda_n(\theta)} [2 \operatorname{Im} \lambda_n(\theta)] | 0 \rangle_n \quad (21b)$$

folosind probele colectate și derivații analitici pentru gradientii ecuațiilor parametrice. Gradientul energetic, împreună cu derivații mai mari, dacă este necesar, pot fi utilizați în orice metoda de optimizare iterativă sub formă de

$$\theta_{k+1} = \theta_k + f[E(\theta_k), \dots], \quad (22)$$

unde fiecare  $k = 0, 1, 2, \dots$  generează succesiv un nou vector parametru, pornind de la vectorul de probă inițial  $\theta_0$  și  $f[E(\theta_k), \dots]$  este o funcțională care definește metoda. Unu metoda acestei forme este coborârea gradientului  $f[E(\theta_k), \dots] = \gamma_k E(\theta_k)$ , pe care l-am folosit pentru optimizarea din Fig. 2 cu dimensiunea pasului  $\gamma_k = 1$  (pentru mai multe detalii, vezi Anexa A). Dacă convergent, atunci vectorul soluției  $\theta$  minimizează  $E(\theta)$ , și energia  $E(\theta)$  este limita superioară căutată pentru energia stării fundamentale.

#### MULȚUMIRI

Această lucrare a fost susținută de Oficiul Naval Cercetare (ONR) prin Laboratorul de Cercetare Navală din SUA (NRL). JPTS mulțumesc Consiliului Național de Cercetare Programe de cercetare asociată pentru sprijin în timpul mandatului său post-doctoral la NRL.

#### ANEXA A

Pentru a testa expresia în formă închisă a energiei  $E(\theta)$  în Ec. (4) dat de Ec. (14), să luăm în considerare un sistem electronic descris de un model Hubbard cu două site-uri, pentru care putem obține în mod direct prin calcularea valorii așteptate analitic pentru toți  $\theta$  din spațiul parametrilor.

Dacă notăm site-ul  $i \in \{0, 1\}$  și spinurile  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ , atunci Hamiltonianul pentru acest sistem poate fi exprimat ca

$$\hat{H} = t \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (A1)$$

unde  $t$  și  $U$  sunt parametrii de salt al modelului și  $i$ , respectiv, parametrii Hubbard-U. Urmând abordarea în principal text, introducem baza  $\{|\psi_i\rangle\}$  pentru cele patru dimensiuni, spațiul Hilbert de un electron format din cele patru stări  $|\psi_i\rangle = c_{i\sigma}^\dagger |0\rangle$  indexat de setul de rotație a site-ului  $Q = \{0, \pi, 1, 1\}$ . Noi construim baza  $\{|n\rangle\}$  pentru spațiul Fock  $F$  din Fock stări  $|n\rangle = C^\dagger |0\rangle$ , care sunt etichetate de familiile  $n = (n_i\sigma)$ , unde  $n_i\sigma$  este numărul de electroni din  $|\psi_i\rangle$ . Din Ec. (6), care în acest exemplu este dat de

$$C_{i\sigma}^\dagger = (c_{i\sigma}^\dagger)^{n_i\sigma}, \quad (A2)$$

constatăm că starea Fock  $|1001\rangle = c_{1\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow}^\dagger |0\rangle$ , să zicem, poate fi identificat de familia care are un electron în  $|\psi_0\rangle$ , zero electroni în  $|\psi_1\rangle$ , zero electroni în  $|\psi_2\rangle$  și un electron în  $|\psi_3\rangle$ .

Pentru demonstrația noastră de testare, alegem starea noastră de ghidare  $|0\rangle$  în Ec. (2) se definește prin

$$|0\rangle = \frac{|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle}{2}, \quad (A3)$$

astfel încât să putem calcula funcțiile de masă de probabilitate în Ec. (18) analitic. Acest lucru ne permite, de asemenea, să calculăm

energie folosind ecuațiile (4) și (14) analitic și verificat rezultat în mpotriva valorii de așteptare a hamiltonianului în stare de încercare  $|\theta\rangle$ . Dacă unul ar fi în schimb să efectueze prelevarea a statului călăuzitor

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} |n\rangle \quad (A4)$$

pe QPU urmând algoritmul CVQE așa cum este ilustrat în Fig. 1, atunci operatorul  $U^\dagger$  ar fi implementat de un circuit cuantic care execută o poartă Hadamard  $-H-$ , pentru fiecare qubit în registru.

Suntem interesați în mod special de starea fundamentală cu doi electroni, spin-singlet. În baza noastră  $\{|n\rangle\}$  pentru  $F$ , există șase stări Fock cu doi electroni, dintre care patru cu componenta  $z$  din spin total fiind zero. Aceste stări sunt  $|0011\rangle$ ,  $|0110\rangle$ ,  $|1001\rangle$  și  $|1100\rangle$ . De asemenea, observăm că Hubbard cu două site-uri modelul are simetria grupului de puncte  $D_{2h}$  și operația de simetrie relevantă în raport cu cele patru Fock menționate states este operatorul de inversare. Scopul nostru este de a forma stări adaptate la simetrie, care sunt fie simetrice, fie antisimetrice sub inversare. Deoarece electronii sunt fermioni, stările trebuie să fie antisimetrice în raport cu schimbul de doi electroni. Deoarece stările spin-singlet sunt antisimetrice sub acest schimb, stările noastre adaptate la simetrie spațială trebuie să fie simetrice în raport cu schimbul de electroni. Este nevoie de o stare fundamentală se transformă ca reprezentare ireductibilă  $A_{1g}$  a lui  $D_{2h}$ . Există două astfel de stări adaptate la simetrie care poate fi format din stările de bază  $|0011\rangle$ ,  $|0110\rangle$ ,  $|1001\rangle$  și  $|1100\rangle$ . Sunt

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0110\rangle + |1001\rangle), \quad (A5a)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0011\rangle + |1100\rangle). \quad (A5b)$$

Se poate verifica cu ușurință că atât  $|1\rangle$  cât și  $|2\rangle$  sunt simetrice sub inversare, care în modelul Hubbard cu două locuri schimbă locurile 0 și 1. Pentru a impune această simetrie necesară, alegem  $\lambda_{0110} = \lambda_{1001} = \lambda$  și  $\lambda_{0011} = \lambda_{1100} = -\lambda$  și  $\lambda_n = 1$  pentru toate familiile  $n$  care nu sunt în  $\{0011, 0110, 1001, 1100\}$ . Unde

$$\lambda(\phi, \varphi) = 2 \frac{\phi}{2} \frac{i}{2} \frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2}, \quad (A6)$$

este definită pe spațiul parametrilor  $(\phi, \varphi) \in (\pi/2, \pi/2)$ ,  $\varphi \in (\pi, \pi]$ . Această formă a lui  $\lambda(\phi, \varphi)$  reprezintă în mod convenabil starea de încercare normalizată

$$|\theta(\phi, \varphi)\rangle = \sin \left( \frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2} \right) e^{i\varphi/2} |1\rangle + \cos \left( \frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2} \right) e^{-i\varphi/2} |2\rangle \quad (A7)$$

pe sfera Bloch, unde  $\phi$  și  $\varphi$  sunt latitudinea și longitudinea, respectiv, și  $|1\rangle$  și  $|2\rangle$  sunt nordul și respectiv polul sud (cf. Fig. 2).

Pentru alegerea noastră de funcție de masă de probabilitate pentru a măsura starea de ghidare  $|0\rangle$  este

$$P[0] = 16. \quad (A8)$$

După ceva algebră, se constată că numitorul de energie în Ec. (14b) pentru acest model este

$$(\phi, \varphi) = 4 \frac{1}{\cos \phi}. \quad (\text{A9})$$

Înainte de a putea calcula numărul de energie corespunzător din Ec. (14a), trebuie să identificăm coeficienții și în Ec. (9) pentru Hamiltonianul din Eq. (A1). Aceasta este simplu deoarece coeficienții și sunt dați direct și familiile și în identifică doar ce perechi de indici și {0, 0, 1, 1} au operatori de creare și, respectiv, de anihilare în termenul I. De exemplu, primul termen în Ec. (A1),  $t c_{10}^\dagger c_{10}$ , corespunde  $h_1 = t, n_1 = (1, 0, 0, 0)$ , și  $n = (0, 0, 1, 0)$  în Ec. (9). Pentru o listă completă a persoanelor identificate 1 coeficienți și în familii, vezi tabelul I.

Pentru fiecare interacțiune  $l \in L$ , trebuie de asemenea să identificăm perechile de indici afectate  $i \in Q_l$ , care formează submulțimea  $Q_l$ . Acest iar submulțimea ei complementară sunt date de Ec. (11) și  $i$ , de asemenea prevăzute în Tabelul I. Reține că perechile de indici pentru număr operatorii nu sunt considerați afectați și, prin urmare, submulțimea  $Q_l$  este gol pentru termenii cu doi electroni. Odată afectat iar submulțimile neafectate au fost definite, împărțim familia a numerelor de ocupație în  $n_{\pm l}$  într-o colecție de ocupație și numerele afectate  $n_{\pm l}$  și neafectate  $n_{\pm l}$  prin fiecare interacțiune, în conformitate cu ecuațiile (12) și (13). Colecțiile rezultate sunt prezentate și în tabelul I.

În continuare, trebuie să identificăm coeficienții din Ec. (15). The semnul  $\pi_l$  poate fi negativ numai pentru interacțiunile care conțin operatorii de creare, anihilare și număr; permutări ale operatorii de creare sau anihilare ordonați de Ec. (6) mai apoi fi necesar pentru formarea operatorilor numerici. Cum asta nu este cazul oricăreia dintre interacțiunile din modelul Hubbard, noi au  $\pi_l = +1$  pentru toate  $l \in L$ .

Coeficienții  $N_l$  din Ec. (B13) încorporează un Kronecker funcția delta pentru fiecare operator numeric din interacțiune, ceea ce asigură că un electron ocupă fiecare orbital de spin care are un operator numeric. Acești coeficienți sunt unitate pentru toți termenii de un electron în hamiltonian și  $\delta_{n_i, 1\delta_{n_i}}$  pentru termenii cu doi electroni identificați de site  $i$ . Astfel, doar când există doi electroni pe locul  $i$ , termenul corespunzător de doi electroni contribuie la energie. Coeficienții  $V_{lm}$  în Ec. (B18) conțin în factorii de fază care rezultă din extinderea termenilor de interacțiune reprezentată pe qubit în nregistrează spațiul Hilbert. Ele sunt listate pentru fiecare interacțiune în modelul Hubbard din tabelul II.

Pentru a determina funcția de masă de probabilitate pentru măsurătorile stării  $R^{\dagger} |m\rangle_0$ , observăm mai întâi că starea de ghidare în Ec. (A4) este reprezentată de puterea tensorului

$$|0\rangle = |+\rangle_Q, \quad (\text{A10})$$

pe  $H_Q$ , unde  $|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ . Din hărți

$$R^{\dagger} |+\rangle = e^{-i\pi/4} |+\rangle, \quad (\text{A11a})$$

$$R^{\dagger} |-\rangle = |-\rangle, \quad (\text{A11b})$$

apoi urmați funcția de masă de probabilitate

$$P[R^{\dagger} |m\rangle_0] = \frac{1}{2^{|Q|}} \sum_{n \in Q} \delta_{nq}^{\delta_{mq}} + 2 \delta_{mq}. \quad (\text{A12})$$

TABELUL II. Coeficienții de dilatare aplicabili  $V_{lm}$  pentru fiecare interacțiune identificată de  $C_{\eta}^{\dagger} C_{\eta}$  iar indicele de expansiune  $m$ .

$C_{\eta}^{\dagger} C_{\eta}$	$V_l()$	$V_l(x,x)$	$V_l(x,y)$	$V_l(y,x)$	$V_l(y,y)$
$c_{10}^{\dagger} c_{10}$		+1	+i	i	+1
$c_{10}^{\dagger} c_{00}$		+1	i	+i	+1
$c_{01}^{\dagger} c_{10}$		+1	+i	i	+1
$c_{11}^{\dagger} c_{00}$		+1	i	+i	+1
$c_{10}^{\dagger} c_{10} c_{00} c_{00}$	+1				
$c_{11}^{\dagger} c_{11} c_{10} c_{10}$	+1				

Folosind această funcție de masă de probabilitate, numărătorul în Ec. (14a) poate fi exprimat ca

$$Y(\phi, \varphi) = \cos\left[\frac{t}{2} \text{Re} \lambda(\phi, \varphi)\right] + \frac{U}{2} e^{2 \text{Im} \lambda(\phi, \varphi)}, \quad (\text{A13})$$

unde am folosit

$$\frac{1}{2^{|Q|}} \sum_{m \in M} \frac{V_{lm} Z \ln P[R^{\dagger} |m\rangle_0]}{M_l N_l} = \frac{1}{16}, \quad (\text{A14})$$

pentru toate interacțiunile  $l \in L$ , unde  $N_l = \{0, 1\}^{|Q_l|}$ . Inserarea Ec. (A6) în Ec. (A13) și împărțirea la Ec. (A9), în sfârșit produce energia

$$E(\phi, \varphi) = 2t \cos \phi \cos \varphi + \frac{U}{2} (1 + \sin \phi). \quad (\text{A15})$$

Pentru a verifica rezultatul de mai sus, găsim matricea hamiltoniană elemente

$$\begin{aligned} 1 |H^{\dagger} |1\rangle &= 0, \\ 1 |H^{\dagger} |2\rangle &= 2t, \\ 2 |H^{\dagger} |1\rangle &= 2t, \\ 2 |H^{\dagger} |2\rangle &= U, \end{aligned} \quad (\text{A16})$$

și aplicați-le pentru a calcula valoarea așteptată

$$E(\phi, \varphi) = \langle \phi, \varphi | H^{\dagger} | \phi, \varphi \rangle. \quad (\text{A17})$$

a Hamiltonianului în starea de încercare în Ec. (A7). După cum era de așteptat, găsim aceeași expresie pentru energia prezentată în Ec. (A15). Rețineți că acest calcul direct, desigur, nu este disponibile în general ca dimensiune a spațiului pe care procesul starea și Hamiltonianul este reprezentat pe creșteri exponențiale cu dimensiunea sistemului. După cum se arată aici, totuși, energie în Ec. (4) poate fi încă obținut cu resurse CPU care creșterea doar polinom cu dimensiunea sistemului prin calcul Ec. (14), cu condiția ca probele de măsurători să fi fost mai întâi colectate pe QPU astfel încât media este antionului în Ec. (19) poate a fi aplicat. Gradientul energiei este

$$E(\phi, \varphi) = 2t \sin \phi \cos \varphi + \frac{U}{2} \cos \phi e^{\phi} - 2t \sin \varphi e^{\varphi}, \quad (\text{A18})$$

unde  $e^{\phi}$  și  $e^{\varphi}$  sunt vectorii de bază standard pentru o sferică sistem de coordonate cu rază constantă. Folosind la fel

TABELUL III. Optimizarea parametrului  $\phi$  în ansatz pentru modelul Hubbard cu două locații ( $t/U = 0,158$ ) și energia asociată  $E(\phi_k, 0)$ .

$\phi_k$ (grade)	$E(\phi_k, 0)$ (unități de $U$ )
0	0,1840
35,1077	0,0461
47,5575	0,0822
53,0757	0,0896
55,5872	0,0911
56,7362	0,0914
57,2624	0,0915
57,5034	0,0915
57,6138	0,0915
57,6644	0,0915
57,6875	0,0915
57,6981	0,0915
57,7030	0,0915
57,7052	0,0915
57,7063	0,0915
57,7067	0,0915
57,7069	0,0915
57,7070	0,0915
57,7071	0,0915
57,7071	0,0915

vectori de bază, vectorul parametru este

$$\theta = \phi e\phi + \varphi e\varphi. \quad (A19)$$

Pornind de la vectorul de încercare inițial  $\theta_0 = 0$ , noul parametru vectorii în coborâre în gradient sunt dați de

$$\theta_{k+1} = \theta_k - E(\theta_k), \quad (A20)$$

pentru  $k = 0, 1, 2, \dots$ , unde am ales parametrul pasului  $\gamma_k = 1$  în Ec. (22). În formă de coordonate, avem

$$\phi_{k+1} = \phi_k + 2t \sin \phi_k \cos \phi_k + \frac{U}{2} \cos \phi_k, \quad (A21a)$$

$$\varphi_{k+1} = \varphi_k + 2t \sin \varphi_k. \quad (A21b)$$

Ca  $\varphi_0 = 0$ , găsim din ecuația din urmă că  $\varphi_k = 0$ , pentru toți  $k$ . Pentru  $t$  negativ, aflăm că  $2E/\varphi^2(\phi, 0) > 0$ , pentru  $\phi \in (\pi/2, \pi/2)$ , și astfel  $\varphi = 0$  este un minim în direcția  $e\varphi$ . Optimizarea în direcția  $e\phi$  este dată de Ec. (A21a) cu  $\cos \phi_k = 1$ . Primii 20 de parametri  $\phi_k$  sunt prezentați în Tabelul III. Soluția minimizată este  $(\phi, \varphi) = (57,7071, 0)$  și energia minimizată asociată  $E(\phi, \varphi) = 0,0915U$ .

#### ANEXA B

O componentă critică a algoritmului CVQE este expresia în formă închisă pentru energia  $E(\theta)$  din Eq. (4) dat de Ec. (14) care poate fi calculat eficient pe CPU pentru orice vectorul parametru  $\theta$  în spațiul parametrilor folosind Eq. (19) cu probele de măsurare colectate în prealabil pe QPU. Mai jos, oferim mai multe detalii despre modul în care Eq. (14) a fost derivat din valorile așteptate din Ec. (5).

Pentru a calcula valorile așteptate cu ajutorul a QPU fără a fi nevoie să introducă qubiți suplimentari, operatorii din valorile așteptate trebuie să fie diagonale în baza de măsurare. Provoacă este aceea că diagonalizarea operatorii din Ec. (5) analitic sau numeric este în general cu cât dimensiunea spațiului Fock  $F = 2^Q$  crește exponențial cu dimensiunea sistemului  $Q$ . Din fericire, totuși, valoarea așteptată a unui operator este liniară funcție. Astfel, dacă luăm în considerare sistemul de interes fiind a colecție de interacțiuni indexate de  $L$  și descrise de Hamiltonieni

$$H^L = \sum_l h_l C_{n_l}^\dagger C_{n_l}, \quad (B1)$$

pe  $F$ , pentru tot  $l \in L$ , valoarea așteptată din Eq. (5a) este combinație liniară

$$\langle 0 | e^{-i\lambda^\dagger(\theta)} H^L e^{-i\lambda(\theta)} | 0 \rangle = \sum_{l \in L} \langle 0 | e^{-i\lambda^\dagger(\theta)} h_l e^{i\lambda(\theta)} | 0 \rangle \quad (B2)$$

peste interacțiunile individuale.

Ordinea operatorilor de creare și anihilare în  $H^L$  impus de setul de indici  $Q$  prin Eq. (6) este în general bine, cu excepția acele interacțiuni cu unii – dar nu toți – operatori de creație și anihilare care formează operatori numerici. În acest caz, operatorii de creare și anihilare ar putea fi necesari reordonați pentru a permite formarea tuturor operatorilor numerici posibili. O singură comandă care funcționează întotdeauna este dat de permutația  $\pi^L$  definită astfel că maparea  $\pi^L: Q \rightarrow Q$  produce

$$\pi^L: iQ \rightarrow Q^i, \quad (B3)$$

unde se referă la concatenare (adică, ordinea indicilor din  $Q$  se păstrează cu excepția faptului că toți indicii  $q \in Q^i$  au fost mutați în stânga tuturor  $q \in Q^j$ ). Pentru a obține această ordine în rândul creației noastre și operatori de anihilare, aplicăm permutarea inversă  $\pi^L{}^{-1}$  la fiecare instanță a operatorului din Ec. (6), astfel încât

$$\pi^L{}^{-1} C_n^\dagger = \sum_{q \in \pi^L{}^{-1}Q} (c_q^\dagger)^{n_q}, \quad (B4)$$

pentru toate  $n \in N$ . Din relația de anticomutație fermionică  $\{c_q, c_q\} = 0$ , pentru toate  $q \in Q$ , rezultă că

$$H^L = \sum_{q \in \pi^L{}^{-1}Q} h_l \sum_{q \in \pi^L{}^{-1}Q} (c_q^\dagger)^{n_q} (c_q)^{n_{lq}}, \quad (B5)$$

pentru toate  $l \in L$ , unde semnul  $\pi^L \in \{\pm 1\}$  depinde de familiile  $n \pm$  care, împreună cu coeficientul  $h_l$ , se precizează interacțiunea descrisă în textul principal. Ordinea lui operatori de creare și anihilare dați de permutare

$\pi^L$  permite operatorilor numerici  $\hat{n}_q = c_q^\dagger c_q$ , pentru toți  $q \in Q$ , să formeze la interfață dintre cele două produse din Ec. (B5). La fel de  $[\hat{n}_q, c_q^\dagger] = [\hat{n}_q, c_q] = 0$ , pentru toate  $q \in Q: q = q$ , găsim că

$$H^L = \sum_l h_l C^{\pi^L} N^L, \quad (B6)$$

Unde

$$C^{\pi^L} = \sum_{q \in Q^i} (c_q^\dagger)^{n_q} (c_q)^{n_{lq}}, \quad (B7a)$$

$$N^L = \sum_{q \in Q^i} (c_q^\dagger)^{n_q} (c_q)^{n_{lq}}. \quad (B7b)$$

Înainte de a continua, să ne întoarcem la celălalt operator  $e^{i\lambda}(\theta)$  din ecuația (B2). Definirea operatorului de proiecție  $P_n = |n\rangle\langle n|$  și folosind proprietatea  $P_n P_m = \delta_{nm}$  pentru toți  $n, m \in \mathbb{N}$ , se găsește  $\delta_{nn} P_n$ , din expansiunile Taylor ale lui  $e^{i\lambda}(\theta)$  și  $e^{i\lambda n(\theta)}$

$$\text{care } e^{i\lambda}(\theta) = \sum_{n \in \mathbb{N}} e^{i\lambda n(\theta)} P_n. \quad (\text{B8})$$

Deoarece  $P_n$  este diagonală în baza  $\{|n\rangle\}$ , poate fi reprezentată printr-un produs al operatorilor numerici. Mai mult, deoarece acești operatori numerici fac naveta, îi putem pune în orice ordine, inclusiv în ordinea dată de permutarea  $\pi$ . Folosind harta din Eq. (12) care este asociată cu harta perturbată  $\pi$  din Ec. (B3), acest ordin dă

$$e^{i\lambda}(\theta) = \sum_{n \in \mathbb{N}} e^{i\lambda \pi(n)} P_{\pi(n)}, \quad (\text{B9})$$

unde cei doi factori operatori de proiecție pot fi exprimați ca

$$P_n^+ = \sum_{q \in Q^+} \binom{n}{q} (1 - n^+ q) (1 - n^- q), \quad (\text{B10a})$$

$$P_n^- = \sum_{q \in Q^-} \binom{n}{q} (1 - n^+ q) (1 - n^- q). \quad (\text{B10b})$$

Din nou după aplicarea Eq. (12) și proprietatea de comutație a operatorilor numerici, putem scrie produsele operatorului în Ec. (B2) ca

$$e^{i\lambda}(\theta) H^+ e^{i\lambda}(\theta) = \sum_{n \in \mathbb{N}} e^{i\lambda \pi(n)} e^{i\lambda n(\theta)} P_{\pi(n)} C^+ |P_n^+| P_n^- |P_n^-| \quad (\text{B11})$$

pentru toate  $l \in \mathbb{L}$ . Din relația de anticomutație fermionică

$$\{c_q, c^\dagger q\} = \delta_{qq},$$

pentru toate  $q \in Q$ , urmează

$$P_n^+ C^+ |P_n^+| = C^+ | \delta_{n^+ n^+} + \delta_{n^- n^-} |, \quad (\text{B12a})$$

$$P_n^- |P_n^-| = N |n P_n^-| \delta_{nn}, \quad (\text{B12b})$$

Unde

$$N |n = \sum_{q \in Q^+} \delta_{nq}^{\pi(q)} \quad (\text{B13})$$

este valoarea proprie a operatorului  $N^+$  pentru starea  $|n\rangle$ , care este una în cazul  $n_q = 1$  pentru fiecare  $q \in Q^+$  care are un operator numeric în  $N^+$ , iar în caz contrar zero. Introducerea Eq. (B12), operatorul din Eq. (B11) devine

$$e^{i\lambda}(\theta) H^+ e^{i\lambda}(\theta) = \sum_{n \in \mathbb{N}} N |n e^{i\lambda \pi(n)} e^{i\lambda n(\theta)} C^+ |P_n^+| P_n^- |P_n^-|. \quad (\text{B14})$$

Pentru a realiza circuite de măsurare cât mai puțin în adânci pe QPU, dorim să reprezentăm operatorii  $C^+$  și  $P_n^+$  spațiul Hilbert  $H_{Q^+}$  pe pentru registrul qubit. Deoarece starea de ghidare  $|0\rangle$  implementată pe acest spațiu este aceeași și pentru toate interacțiunile, folosim setul global de indici  $Q$  pentru a fixa ordinea spațiilor individuale de qubit  $H$  în spațiul de registru  $H_Q$ . Dezavantajul cu această comandă fixă  $Q$ , totuși, este că nu separă spațiile care conțin stări care sunt afectate și neafectate de fiecare interacțiune. Pentru a evita acest neajuns, lucrăm cu operatori pe  $H_Q$  care sunt ordonați după  $\pi|Q$

și se aplică operatorul de permutare  $\pi$  definit în Ec. (B3) pentru a rearanja operatorii individuali de qubit și pentru a restabili ordinea fixă  $Q$ .

Isomorfismul  $F: H_Q \rightarrow H_Q$  dat de Ec. (16) este în concordanță cu transformarea Jordan-Wigner [70], care este reprezentată pe  $H_Q$  prin

$$C^+ = \prod_{q \in Q^+} \left( \prod_{q' < q} \sigma_z^{q'} \right) \frac{\sigma_x^q - i\sigma_y^q}{2} \sigma_z^q, \quad (\text{B15})$$

pentru toți  $q \in Q$ , unde operatorii Pauli  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  sunt reprezentați de matricele Pauli asociate, iar operatorul de identitate  $\sigma_0$  de matricea de identitate, când stările de bază  $|0\rangle$  și  $|1\rangle$  pentru  $H$  sunt mapate la coloană vectorii  $(1, 0)$  și respectiv  $(0, 1)$  pentru spațiul vectorial  $\mathbb{C}^2$ . Deoarece relația binară  $<$  a fost definită în raport cu elementele din  $\pi|Q$  mai degrabă decât  $Q$ , operatorul și ir depinde de interacțiunile. În timp ce această abordare ar putea părea că complică inutil lucrurile, avantajul este că permutarea în Ec. (B3) a fost ales în mod specific astfel încât reprezentarea operatorilor din partea dreaptă a ecuației (B14) pe  $H_Q$ ,

$$C^+ = \prod_{q \in Q^+} \left( \prod_{q' < q} \frac{\sigma_x^{q'} - i\sigma_y^{q'}}{2} \right) \prod_{q' < q} \sigma_z^{q'} \frac{\sigma_x^q - i\sigma_y^q}{2} \sigma_z^q, \quad (\text{B16a})$$

$$P_n^+ = \prod_{q \in Q^+} \left( \prod_{q' < q} \sigma_z^{q'} \right) \frac{\sigma_x^q - i\sigma_y^q}{2} \sigma_z^q, \quad (\text{B16b})$$

nu este afectată de operatorul și ir. În consecință, nu trebuie să urmărim semnul dependent de stare care rezultă în mod normal din operatorii  $\sigma_z$  din operatorul și ir.

În loc să diagonalizăm Ec. (B16a) direct, ceea ce ar duce la circuite de măsurare inutile de mari, extindem fiecare operator pe  $H$  pe baza  $\{\sigma^0, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$ . Această expansiune dă

$$C^+ = \prod_{m \in M} \frac{1}{2^{Q^+}} \prod_{l \in L} V_{lm} V^+ |m\rangle, \quad (\text{B17})$$

unde  $m = (mq) \in Q^+$  sunt familii indexate obținute din

Puterea carteziană  $M = \{x, y\}^{Q^+}$ ,

$$V_{lm} = \prod_{q \in Q^+} [(-1)^{n_q} |l_q\rangle] \delta_{mq}, \quad (\text{B18})$$

sunt coeficienți de expansiune și

$$V_{lm}^+ = \prod_{q \in Q^+} \sigma_z^q \sigma^q, \quad (\text{B19})$$

sunt operatori hermitieni. Scopul lui  $\delta_{mq}$  este de a prelua factorul de fază  $i$ , dacă și numai dacă  $m_q = y$ , unde semnul este minus (plus) pentru  $n_q = 1$  ( $n_q = 0$ ), adică operatorul asociat  $|l_q\rangle \sigma^q$  provine dintr-un operator de creare (anihilare).

Fiecare operator hermitian  $V_{lm}^+$  poate fi întotdeauna transformat astfel încât

$$V_{lm}^+ = R^+ \dagger |m\rangle \langle m|, \quad (\text{B20})$$



unde  $R^{\dagger}$  este un operator unitar iar  $D^{\dagger}$  este un operator diagonal real. Deoarece  $V^{\dagger}$  este un produs tensor pe  $H \otimes Q$ , putem diagonaliza operatorul pe fiecare spațiu  $H$  separat. Utilizarea operatorilor de rotație

$$R^{\dagger} x = \frac{\sigma^{\dagger} 0 - i\sigma^{\dagger} x}{2}, \quad R^{\dagger} y = \frac{\sigma^{\dagger} 0 + i\sigma^{\dagger} y}{2}, \quad (B21)$$

care descriu rotații de un qubit în jurul axelor  $x$  și  $y$  prin  $\pi/2$  și respectiv  $\pi/2$ , găsim  $\sigma^{\dagger} x = R^{\dagger} \dagger y \sigma^{\dagger} z R^{\dagger} y$ ,  $\sigma^{\dagger} y =$

$$R^{\dagger} \dagger x \sigma^{\dagger} z R^{\dagger} x. \quad (B22)$$

Astfel, soluția la Ec. (B20) este  $R^{\dagger}$

$$R^{\dagger} |m\rangle = \pi^{\dagger} | \delta_{mq} x R^{\dagger} \delta_{mq} y \sigma^{\dagger} 0, \quad (B23a)$$

$$D^{\dagger} |m\rangle = \pi^{\dagger} | \sigma^{\dagger} z q \quad | \sigma^{\dagger} 0, \quad (B23b)$$

pentru toate  $m \in M$ .

Introducerea Eq. (B20) în Ec. (B17) și înmulțind cu Ec. (B16b), găsim în cele din urmă harta

$$C^{\dagger} |Ph\rangle = \frac{1}{2Q^{\dagger}} \sum_{m \in M} \sum_{n \in N} V |mR^{\dagger} |n\rangle \sum_{n \in N} Z_n P^{\dagger} |nR^{\dagger} |m\rangle, \quad (B24)$$

pe  $H \otimes Q$ , unde valoarea proprie

$$Z |n\rangle = \sum_{q \in Q} (1) n q, \quad (B25)$$

rezultă din valoarea proprie  $(1) n q$  a lui  $\sigma^{\dagger} z$  pentru starea  $|nq\rangle$  pe  $H$ . Introducând Ec. (B24) în Ec. (B14) dă în cele din urmă harta

$$e^{-i\lambda^{\dagger} \dagger (\theta) H^{\dagger} |e^{i\lambda^{\dagger} (\theta)} = \frac{\pi |h|}{2Q^{\dagger}} \sum_{n \in N} e^{i\lambda^{\dagger} n^{\dagger} n (\theta)} e^{-i\lambda^{\dagger} |n\rangle} N |n\rangle Z |n\rangle$$

$$\times \sum_{m \in M} V |mR^{\dagger} |n\rangle |n\rangle |R^{\dagger} |m\rangle, \quad (B26)$$

pe  $H \otimes Q$ .

Deoarece orice stare cuantică  $|0\rangle$  se mapează la  $|0\rangle$  pe  $H \otimes Q$ , putem exprima acum valoarea așteptată în ecuația (5a), folosind ecuațiile (B2) și (B26), după cum Ec. (14a) cu coeficienții din Ec. (15) dat de Ecs. (B13), (B18) și (B25) pentru  $N |n\rangle$ ,  $V |m\rangle$  și  $|i\rangle$ , respectiv  $Z |n\rangle$ . Ca operatorul din Eq. (B8) este deja diagonală, se găsește, de asemenea, direct Eq. (14b) din această ecuație.

- [1] P. Benioff, The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by turing machines, *J. Stat. Fiz.* **22**, 563 (1980).
- [2] RP Feynman, Simularea fizicii cu computere, *Int. J. Theor. Fiz.* **21**, 467 (1982).
- [3] D. Deutsch, Teoria cuantică, principiul de transformare a bisericii și computerul cuantic universal, *Proc. R. Soc. Lond. A* **400**, 97 (1985).
- [4] PW Shor, Algorithms for quantum calculation: Discrete logarithms and factoring, în Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (IEEE, Los Alamitos, CA, 1994), pp. 124–134 [5] PW Shor, algoritmi în timp polinomial pentru factorizarea prime și logaritmi discreti pe un computer cuantic, *SIAM J. Calculator.* **26**, 1484 (1997).
- [6] LK Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, în Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (ACM Press, New York, NY, 1996), pp. 212–219.
- [7] S. Lloyd, Simulatoare cuantice universale, *Science* **273**, 1073 (1996).
- [8] AW Harrow, A. Hassidim și S. Lloyd, Algoritm cuantic pentru sisteme liniare de ecuații, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 150502 (2009).
- [9] DS Abrams și S. Lloyd, Simularea sistemelor Fermi cu mai multe corpuri pe un computer cuantic universal, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2586 (1997).
- [10] G. Ortiz, JE Gubernatis, E. Knill, and R. Laflamme, Quantum algorithms for fermionic simulations, *Phys. Rev. A* **64**, 022319 (2001).
- [11] AY Kitaev, Măsurători cuantice și stabilizatorul Abelian problemă, [arXiv:quant-ph/9511026](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9511026).
- [12] A. Peruzzo, JR McClean, P. Shadbolt, M.-HH Yung, X.-QQ Zhou, PJ Love, A. Aspuru-Guzik, JL O'Brien și JL O'Brien, A variational eigenvalue solver pe un procesor cuantic fonic, *Nat. comun.* **5**, 4213 (2014).
- [13] J. Preskill, Quantum computing in the NISQ era and beyond, *Quantum* **2**, 79 (2018).
- [14] JR McClean, J. Romero, R. Babbush și A. Aspuru-Guzik, Theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New J. Phys.* **18**, 023023 (2016).
- [15] PJJ O'Malley, R. Babbush, ID Kivlichan, J. Romero, JR McClean, R. Barends, J. Kelly, P. Roushan, A. Tranter, N. Ding și colab., Simularea cuantică scalabilă a energiilor moleculare, *Phys. Rev. X* **6**, 031007 (2016).
- [16] JR McClean, ME Kimchi-Schwartz, J. Carter și WA de Jong, Hybrid quantum-classical hierarchy for mitigation of decoherence and determination of excited states, *Phys. Rev. A* **95**, 042308 (2017).
- [17] J. Li, X. Yang, X. Peng și C.-P. Sun, Hybrid quantum- abordare clasică a controlului optim cuantic, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 150503 (2017).
- [18] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, JM Chow și JM Gambetta, Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets, *Nature (Londra)* **549**, 242 (2017).
- [19] JI Colless, VV Ramasesh, D. Dahlen, MS Blok, ME Kimchi-Schwartz, JR McClean, J. Carter, WA de Jong și I. Siddiqi, Calcularea spectrelor moleculare pe un procesor cuantic cu un algoritm rezistent la erori, *Phys. Rev. X* **8**, 011021 (2018).
- [20] D. Wang, O. Higgott și S. Brierley, Accelerated variation quantum eigensolver, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 140504 (2019).

- [21] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin și i colab., Quantum supremacy using a programable supraconducting processor, *Nature (Londra)* **574**, 505 (2019).
- [22] R. M. Parrish, E. G. Hohenstein, P. L. McMahon și i T] J. Martınez, Calcularea cuantică a tranzițiilor electronice folosind o soluție proprie cuantică variabilă, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 230401 (2019).
- [23] S. A. Fischer și i D. Gunlycke, Symmetry configuration map-ping for representing quantum systems on quantum computers, *arXiv:1907.01493*.
- [24] S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S. C. Benjamin și i X. Yuan, Chimie computațională cuantică, *Rev. Mod. Fiz.* **92**, 015003 (2020).
- [25] K. Seki, T. Shirakawa și i S. Yunoki, Symmetry-adapted variational quantum eigensolver, *Phys. Rev. A* **101**, 052340 (2020).
- [26] W. J. Huggins, J. Lee, U. Baek, B. O'Gorman și i K. B. Whaley, A non-orthogonal variational quantum eigensolver, *New J. Phys.* **22**, 073009 (2020).
- [27] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin și i colab., Hartree-Fock on a superconducting qubit quantum computer, *Science* **369**, 1084 (2020).
- [28] S. Endo, S. Cai, S. C. Benjamin și i X. Yuan, Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation, *J. Phys. Soc. Jpn.* **90**, 032001 (2021).
- [29] M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cioici și i P. J. Coles, Algoritmi cuantici variabili, *Nat. Rev. Fiz.* **3**, 625 (2021).
- [30] Y. Zhang, L. Cioici, C. F. Negre, P. Czarnik, P. J. Coles, P. M. Anisimov, S. Mniszewski, S. Tretiak, and P. A. Dub, Variational quantum eigensolver with reduced circuit complexity, *npj Quantum Inf.* **8**, 96 (2022).
- [31] J. F. Gonthier, M. D. Radin, C. Buda, E. J. Daskalakis, C. M. Abuan și i J. Romero, Măsurătorile ca obstacol către avantajul cuantic practic pe termen scurt în chimie: analiza resurselor, *Phys. Rev. Res.* **4**, 033154 (2022).
- [32] J. Tilly, H. Chen, S. Cao, D. Picozzi, K. Setia, Y. Li, E. Grant, L. Wossnig, I. Rungger, G. H. Booth și i J. Tennyson, The variational quantum eigensolver: O revizuire a metodelor și a celor mai bune practici, *Phys. Rep.* **986**, 1 (2022).
- [33] L. Zhao, J. Goings, K. Wright, J. Nguyen, J. Kim, S. Johri, K. Shin, W. Kyoung, J. I. Fuks, J.-K. Rhee și i Y. M. Rhee, Simulări de electroni corelați cu perechi optimizate orbital pe computere cuantice cu ioni prinși, *npj Quantum Inf.* **9**, 60 (2023).
- [34] J. Spall, Multivariate stochastic approximation using a simultaneous perturbation gradient approximation, *IEEE Trans. Autom. Contr.* **37**, 332 (1992).
- [35] M. H. Yung, J. Casanova, A. Mezzacapo, J. R. McClean, L. Lamata, A. Aspuru-Guzik și i E. Solano, De la tranzistor la computere cu ioni captivați pentru chimia cuantică, *Sci. Rep.* **4**, 3589 (2014).
- [36] Y. Shen, X. Zhang, S. Zhang, J.-N. Zhang, M.-H. Yung și i K. Kim, Implementarea cuantică a clusterului unitar cuplat pentru simularea structurii electronice moleculare, *Phys. Rev. A* **95**, 020501(R) (2017).
- [37] G. Harsha, T. Shiozaki și i G. E. Scuseria, On the difference between variational and unitary coupled cluster theories, *J. Chem. Fiz.* **148**, 044107 (2018).
- [38] I. D. Kivlichan, J. R. McClean, N. Wiebe, C. Gidney, A. Aspuru-Guzik, G. K.-L. Chan și i R. Babbush, Simularea cuantică a structurii electronice cu adâncime liniară și conectivitate, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 110501 (2018).
- [39] C. Hempel, C. Maier, J. Romero, J. R. McClean, T. Monz et al., Quantum chemistry calculations on a trapped-ion quantum simulator, *Phys. Rev. X* **8**, 031022 (2018).
- [40] J. Romero, R. Babbush, J. R. McClean, C. Hempel, P. J. Love și i A. Aspuru-Guzik, Strategii pentru calculul cuantic al energiilor moleculare folosind clusterul unitar cuplat ansatz, *Quantum Sci. Tehnol.* **4**, 014008 (2018).
- [41] J. Lee, W. J. Huggins, M. Head-Gordon și i K. B. Whaley, Generalized unitary coupled cluster wave functions for quantum calculation, *J. Chem. Teoria Calculului.* **15**, 311 (2019).
- [42] P.-L. Dallaire-Demers, J. Romero, L. Veis, S. Sim și i A. Aspuru-Guzik, Ansatz de circuit de adâncime mică pentru pregătirea stărilor fermionice corelate pe un computer cuantic, *Quant. Sci. Tehnol.* **4**, 045005 (2019).
- [43] K. Setia, S. Bravyi, A. Mezzacapo și i J. D. Whitfield, Codări super-rapide pentru simularea cuantică fermionică, *Phys. Rev. Res.* **1**, 033033 (2019).
- [44] H. R. Grimsley, D. Claudino, S. E. Economou, E. Barnes și i N. J. Mayhall, Is the trotterized UCCSD ansatz chimic bine definit? *J. Chem. Teoria Calculului.* **16**, 1 (2020).
- [45] Y. Matsuzawa și i Y. Kurashige, Jastrow-type decomposition in quantum chemistry for low-depth quantum circuits, *J. Chem. Teoria Calculului.* **16**, 944 (2020).
- [46] I. O. Sokolov, P. K. Barkoutsos, P. J. Ollitrault, D. Greenberg, J. Rice, M. Pistoia și i I. Tavernelli, Metode de cluster cuplate unitare optimizate cu orbital cuantic în regimul puternic corelat: Algoritmii cuantici pot depăși echivalentele lor clasice? *J. Chem. Fiz.* **152**, 124107 (2020).
- [47] Y. Nam, J.-S. Chen, N. C. Panti, K. Wright, C. Delaney și i colab., Ground-state energy estimation of the water molecule on a trapped-ion quantum computer, *npj Quantum Inf.* **6**, 33 (2020).
- [48] M. Motta, E. Ye, J. R. McClean, Z. Li, A. J. Minnich și i colab., Reprezentări de rang scăzut pentru simularea cuantică a structurii electronice, *npj Quantum Inf.* **7**, 83 (2021).
- [49] N. P. Bauman, J. Chlálek, L. Veis, J. Pittner și i K. Karol, Variational quantum eigensolver pentru diagonalizarea aproximativă a hamiltonienilor pliați în jos folosind ansatz cluster cuplat unitar generalizat, *Quantum Sci. Tehnol.* **6**, 034008 (2021).
- [50] P. K. Barkoutsos, J. F. Gonthier, I. Sokolov, N. Moll, G. Salis, A. Fuhrer, M. Ganzhorn, D. J. Egger, M. Troyer, A. Mezzacapo, S. Filipp și i I. Tavernelli, Quantum algoritmi pentru calculele structurii electronice: Hamiltonianul de găuri de particule și expansiuni optimizate ale funcțiilor de undă, *Phys. Rev. A* **98**, 022322 (2018).
- [51] A. Kandala, K. Temme, A. D. Córcoles, A. Mezzacapo, J. M. Chow și i J. M. Gambetta, Error mitigation extinde raza de calcul a unui procesor cuantic zgomotos, *Nature (Londra)* **567**, 491 (2019).
- [52] M. Ganzhorn, D. J. Egger, P. Barkoutsos, P. Ollitrault, G. Salis, N. Moll, M. Roth, A. Fuhrer, P. Mueller, S. Woerner, I. Tavernelli și i S. Filipp, Simularea eficientă de poartă a stărilor proprii moleculare pe un computer cuantic, *Phys. Rev. Appl.* **11**, 044092 (2019).
- [53] C. Kokail, C. Maier, R. van Bijnen, T. Brydges, M. K. Joshi, P. Jurcevic, C. A. Muschik, P. Silvi, R. Blatt, C. F. Roos și i P. Zoller, Self-verifying variational quantum simulation of lattice models, *Nature (Londra)* **569**, 355 (2019).

- [54] KM Nakanishi, K. Mitarai și K. Fujii, Soluții pentru probleme cuantice variaționale de căutare subspațiale pentru stări excitate, *Phys. Rev. Res.* **1**, 033062 (2019).
- [55] BT Gard, L. Zhu, GS Barron, NJ Mayhall, SE Economou și E. Barnes, Circuite eficiente de pregătire a stării de conservare a simetriei pentru algoritmul cuantic variațional, *npj Quantum Inf.* **6**, 10 (2020).
- [56] C. Bravo-Prieto, J. Lumbrecas-Zarapico, L. Tagliacozzo și JI Latorre, Scaling of variational quantum circuit depth for condensed matter systems, *Quantum* **4**, 272 (2020).
- [57] NV Tkachenko, J. Sud, Y. Zhang, S. Tretiak, PM Anisimov, AT Arrasmith, PJ Coles, L. Cicio și PA Dub, Corelation-informed permutation of qubits for reducing ansatz depth in the variational quantum eigensolver, *PRX Quantum* **2**, 020337 (2021).
- [58] HR Grimsley, SE Economou, E. Barnes și NJ Mayhall, Un algoritm variațional adaptiv pentru simulări moleculare exacte pe un computer cuantic, *Nat. comun.* **10**, 3007 (2019).
- [59] AG Rattew, S. Hu, M. Pistoia, R. Chen și S. Wood, A agnostic de domeniu, rezistent la zgomot, hardware-eficient evolutiv-ary variațional cuantic eigensolver, [arXiv:1910.09694](https://arxiv.org/abs/1910.09694).
- [60] D. Chivilikhin, A. Samarin, V. Ulyantsev, I. Iorsh, AR Oganov și O. Kyriienko, MoG-VQE: Multiobjective genetic variational quantum eigensolver, [arXiv:2007.04424](https://arxiv.org/abs/2007.04424).
- [61] M. Bilkis, M. Cerezo, G. Verdon, PJ Coles și L. Cicio, A semi-agnostic ansatz with variable structure for quantum machine learning, *Quantum Mach. Intelege.* **5**, 43 (2023).
- [62] L. Cicio, K. Rudinger, M. Sarovar și PJ Coles, Machine learning of noise-resilient quantum circuits, *PRX Quantum* **2**, 010324 (2021).
- [63] HL Tang, VO Shkolnikov, GS Barron, HR Grimsley, NJ Mayhall, E. Barnes și SE Economou, Qubit-ADAPT-VQE: An Adaptive algorithm for constructing hardware-efficient ansätze on a quantum processor, *PRX Quant.* **2**, 020310 (2021).
- [64] YS Yordanov, V. Armaos, CHW Barnes și DRM Arvidsson-Shukur, soluții pentru probleme cuantice variaționale adaptativă bazată pe excitații Qubit, *Commun. Fiz.* **4**, 228 (2021).
- [65] S.-X. Zhang, Z.-Q. Wan, C.-K. Lee, C.-Y. Hsieh, S. Zhang și H. Yao, Variational quantum-neural hybrid eigensolver, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 120502 (2022).
- [66] Y. Du, T. Huang, S. You, M.-H. Hsieh și D. Tao, Arhitectura circuitului cuantic caută algoritmi cuantici variaționali, *npj Quantum Inf.* **8**, 62 (2022).
- [67] JPT Stenger, CS Hellberg și D. Gunlycke, Implementarea operatorilor Jastrow-Gutzwiller pe un computer cuantic utilizând algoritmul cuantic eigensolver variațional în cascadă, *Phys. Rev. A* **107**, 062606 (2023).
- [68] R. Jastrow, Many-body problem with strong forces, *Phys. Rev.* **98**, 1479 (1955).
- [69] MC Gutzwiller, Efectul corelației asupra feromagnetismului metalelor de tranziție, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
- [70] P. Jordan și E. Wigner, Über das paulische Äquivalenzverbot, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).