

量子错误缓解研究进展

张宇鹏^{1,2} 袁 骁³

¹(北京师范大学物理系 北京 100875)
²(北京师范大学高等量子研究中心 北京 100875)
³(北京大学前沿计算研究中心 北京 100080)
(201821140038@mail.bnu.edu.cn)

Quantum Error Mitigation: A Review

Zhang Yukun^{1,2} and Yuan Xiao³

¹(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875*)
²(*Center of Advanced Quantum Studies, Beijing Normal University, Beijing 100875*)
³(*Center on Frontiers of Computer Studies, Peking University, Beijing 100080*)

Abstract Due to the interaction with the environment and imperfections of controls, quantum devices are accompanied with errors, whose accumulation could lead to a meaningless computing result. The realization of a full-fledged quantum computer relies on quantum error correction, which however, introduces a huge overhead that makes it challenging for near-term quantum devices. In the noisy intermediate-scale quantum era, quantum error mitigation methods instead of quantum error correction are introduced for suppressing errors. Using a mild cost under reasonable assumptions, quantum error mitigation could enhance the result to achieve a desired computational accuracy, and its feasibility has been demonstrated extensively in theories and experiments. This article aims to introduce and summarize the latest developments in quantum error mitigation, and to comment on potential future directions.

Key words quantum computing; near-term quantum devices; quantum error mitigation; quantum algorithms; noisy intermediate-scale quantum era

摘 要 由于与环境的相互作用及对量子设备的控制中存在的偏差,量子设备总是在不断产生错误.若不对这些错误加以处理,错误的积累会使得量子算法的实施变得毫无意义.成熟量子计算机的实现依赖于量子纠错技术以纠正量子设备中的错误.然而,由于量子纠错开销巨大,其难以在近期量子设备中实现.故在有噪声中等尺寸量子时代,以变分量子求解器为代表的量子算法选择量子错误缓解技术来压制错误,而非纠正它们.量子错误缓解允许仅通过中等大小的额外资源获得可以接受的计算精读,并已在理论及实验上展示出其可行性.旨在介绍与总结量子错误缓解领域的最新进展,并展望该技术未来发展的前景与方向.

关键词 量子计算;近期量子设备;量子错误缓解;量子算法;有噪声的中等尺寸量子时代

中图法分类号 O59

近期量子设备的特征限制了能够操控的量子比特(qubit)数目,一般为几个到几十个量子比特,且存在一定的噪声,因此称之为有噪声的中等尺寸量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)设备^[1].由于能够控制的量子比特数目有限,故一般无法使用量子纠错码将物理量子比特编码为逻辑量子

比特后进行计算.据估计,以合理的成功概率实现超越经典计算机算力的 Shor 算法需要将几千个物理量子比特编码为 1 个逻辑量子比特^[2].故而,对于 NISQ 设备我们需要考虑设计对其友好的算法,并在此基础上设计算法能够成功实施的相应技术.一系列面向 NISQ 设备设计的算法已经提出,其中最受瞩目的为变分量子求解器 (variational quantum eigensolver, VQE)^[3-5] 和量子近似优化算法 (quantum approximate optimization algorithm, QAOA)^[6],前者多用于量子模拟 (quantum simulation) 领域^[7],而后者主要面向计算机领域的组合优化 (combinatorial optimization) 问题^[8].与此同时,量子错误缓解 (quantum error mitigation, QEM) 技术^[9] 成为 NISQ 时代在量子设备上可靠地实施算法的必不可少的元素.

2019 年和 2020 年,Google 公司在量子计算领域取得了里程碑式的进展,分别在其 Sycamore 量子芯片上实现了量子霸权 (quantum supremacy) 实验^[10]和目前在量子计算机上实现的最大的量子模拟 (quantum simulation) 算法^[11].对于后者,依赖于后处理 (post-selection) 和 McWeen 纯化 (McWeen purification) 的量子错误缓解技术,研究人员们成功将保真度 (fidelity) 最低 2% 的计算结果还原到 99%,足以体现量子错误缓解对于 NISQ 时代量子计算的重要性.

本文主要以面向 VQE 算法实施的量子模拟算法为背景,介绍相关的量子错误缓解技术.

1 量子模拟和变分量子特征求解器简介

量子力学是描述微观世界的基础理论.通过经典计算机研究量子系统问题是物理、化学、材料等领域的重要研究方向之一.然而,随着系统自由度的增加,经典计算机所需要的计算资源在最一般的情况下呈指数级上升,称之为“指数墙”(exponential wall)困难^[12].

意识到这一困难,Feynman 最早于 1982 年提出了量子模拟的概念:通过可控的、易获得的量子系统来模拟难以获得的目标量子系统^[7].直觉上,利用量子系统本身自由度指数级增大的希尔伯特空间 (Hilbert space),我们可以在一定程度上解决指数墙困难.

在量子多体物理和量子化学领域中,系统在低能态表现出的特性是研究人员关心的问题之一.其中,最具代表性的即为原子或分子系统的电子结构

问题.电子结构问题的研究目的为对特定哈密顿量 (Hamiltonian) H 描述的原子或分子系统,理解其在低能态下相互作用的电子在原子核产生的势能下是怎样分布的.系统的性质由波函数 (wave function) 描述,电子结构问题要求我们求解系统的基态 (ground state) 和低能激发态,并计算各个观测量的大小,其中最为重要的观测量为系统能量 E .

Rayleigh-Ritz 变分法给出了对量子基态求解的可行策略,其主要通过设定参数化的试探波函数 (trial wave function) $|\psi(\theta)\rangle$,又称拟设 (ansatz), θ 为其参数.以能量 E 作为观测量为例,系统基态能量 E_0 满足:

$$E_0 \leq \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle. \tag{1}$$

可以看到,系统的基态能量给出了该观测量的下界,我们可以不断调整、优化拟设的参数使其逐渐逼近系统基态,从而获得基态能量.

借助这一思想,VQE 算法通过在量子计算机上制备试探波函数,通过测量获得观测量当前值,并使用经典计算机优化试探波函数参数实现对基态能量的求解.其优势在于利用量子计算机指数级增长的希尔伯特空间来表示波函数,经典计算机的参与减少了对量子线路 (quantum circuit) 深度的要求.随着量子线路深度的增加,随机错误的数量和退相干 (decoherence) 效应的影响会越来越明显,故 VQE 算法保持较为浅层的量子线路深度的特性使其适合于在近期量子设备上实施.另外,VQE 算法本身具有一定的对连续错误的缓解效果^[4-5].当然,浅层量子线路的错误仍然会带来计算的偏差,本文将接下来总结针对浅层量子线路的量子错误缓解方法.

2 量子错误缓解基本框架

本节主要讨论针对 NISQ 设备噪声的量子错误缓解方法.由于噪声的影响,我们考虑量子混态 (quantum mixed state),而非纯态 (pure state).考虑量子门 $\mathcal{U}(\cdot) = U(\cdot)U^\dagger$. 设 \mathcal{E} 为噪声信道 (noise channel),则有噪声的量子门为 $\mathcal{E} \circ \mathcal{U}$. 这里,我们假设量子门实施中产生的错误为马尔可夫的 (Markovian),即噪声信道与量子门的类型及施加位置等特征无关.

考虑任意输入态 ρ_{in} ,理想的输出态 $\rho_{\text{out}}^{\text{ideal}}$ 和有噪声的输出态 $\rho_{\text{out}}^{\text{noisy}}$ 可以写为

$$\begin{aligned} \rho_{\text{out}}^{\text{ideal}} &= \mathcal{U}_M \circ \mathcal{U}_{M-1} \circ \cdots \circ \mathcal{U}_1(\rho_{\text{in}}), \\ \rho_{\text{out}}^{\text{noisy}} &= \mathcal{E} \circ \mathcal{U}_M \circ \mathcal{E} \circ \mathcal{U}_{M-1} \circ \cdots \circ \mathcal{E} \circ \mathcal{U}_1(\rho_{\text{in}}), \end{aligned} \tag{2}$$

其中, M 为量子门的数量.当单个量子门的出错概率小于一定的阈值(threshold)时,我们可以通过量子纠错以及提升量子纠错码矩(distance)实现对错误的任意精度的缓解.

量子错误缓解则面向近期量子设备,提出了一种开销小、鲁棒性高的策略.与量子纠错不同,错误缓解不考虑实时地减少量子线路中的错误,而是仅考虑通过有噪声的测量结果 $\langle O \rangle_{\text{noisy}} = \text{tr}(\rho_{\text{out}}^{\text{noisy}} O)$ 恢复理想线路的理想测量结果 $\langle O \rangle_{\text{ideal}} = \text{tr}(\rho_{\text{out}}^{\text{ideal}} O)$, 如图 1 所示.对于近期量子设备实施的算法而言,例如第 1 节讨论的 VQE 算法等,其量子线路较浅,即便错误在算法实施过程中不断积累,我们依然可以以高概率恢复得到观测量的概率分布,代价是错误缓解算法会导致恢复得到的概率分布的方差增大,从而增加需要的测量样本数量.由于量子错误缓解技术不纠正错误,错误仍然会在线路中积累,故而,该技术仅在物理错误概率较低时起作用,且无法规模化到较深层的量子线路.

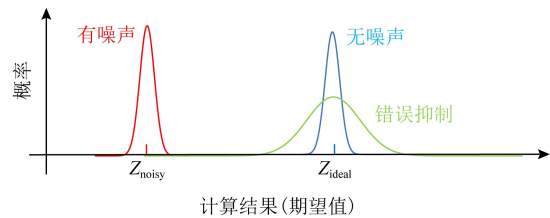


Fig. 1 Schematic of quantum error mitigation^[5]

图 1 量子错误缓解示意图^[5]

3 量子错误缓解的主要方法

本节将具体介绍 10 类量子错误缓解方法以及各类方法相互结合的方法.根据对噪声模型的依赖程度和错误缓解的不同方法,我们将这些方法归为如表 1 所示的 4 种类型:弱噪声模型、精确噪声模型、机器学习噪声模型、未假设噪声形式模型.最后,我们将讨论各个方法间的组合方法.

Table 1 Classification of Different Quantum Error Mitigation Methods

表 1 不同量子错误缓解方法分类

弱噪声模型	精确噪声模型	机器学习噪声模型	未假设噪声形式模型
外推法	测量错误缓解	基于机器学习的错误缓解	量子子空间展开
最小二乘拟合法	准概率模型	Clifford 数据回归	对称性验证
个体错误减少	随机错误缓解	基于学习的准概率方法	

3.1 外推法

外推法(extrapolation)利用不同的物理错误率下运行相同的量子线路,从而通过不同错误率对应的测量结果外推得到无错误情况下的观测结果,如图 2 所示:

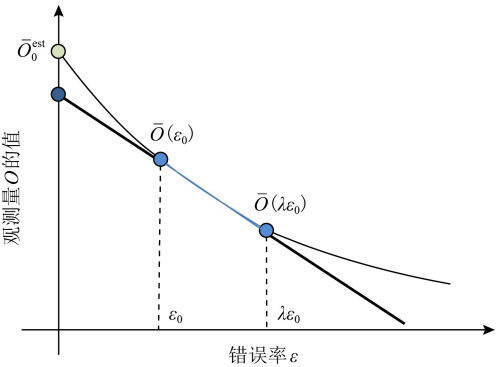


Fig. 2 Schematic of quantum error extrapolation^[4]

图 2 量子错误外推法示意图^[4]

1) Richardson 外推法

Richardson 外推法(Richardson extrapolation)

率先由 Li 等人^[13]和 Temme 等人^[14]分别提出.关注随机噪声过程 \mathcal{E}_k , 其形式为

$$\mathcal{E}_k = (1 - \epsilon_k) \mathcal{I} + \epsilon_k \mathcal{N}_k, \tag{3}$$

其中, \mathcal{I} 为单位映射, 而 \mathcal{N}_k 为噪声映射, ϵ_k 为一个较小的错误率.为方便起见,这里假设所有的噪声信道具有相同的错误率 $\epsilon_k = \epsilon$.根据式(2),对于任意观测量 Z ,我们可以对其期望值做泰勒展开,得到:

$$\langle Z \rangle(\epsilon) = \langle Z \rangle(0) + \sum_{m=1}^n Z_m \epsilon^m + O(\epsilon^{n+1}), \tag{4}$$

其中, Z_m 为展开系数, $\langle Z \rangle(\epsilon)$ 为观测量在错误率为 ϵ 情况下的期望值.

为了得到理想的测量数据 $\langle Z \rangle(0)$, 我们通过实验调节不同的 ϵ 大小获得相应的观测结果 $\langle Z \rangle(\epsilon)$.通过实验手段,我们可以增加物理错误率 ϵ .我们选择不同的噪声放大比例 λ_i , 并要求 $1 = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_n$, 得到不同噪声大小下的观测期望值 $\langle Z \rangle(\lambda_i \epsilon)$.然后,我们可以通过 n 阶泰勒展开和 Richardson 外推法获得对无噪声情况的估计:

$$\langle Z \rangle_{\text{est}} = \sum_{k=0}^n \zeta_k \langle Z \rangle(\lambda_k \epsilon) = \langle Z \rangle(0) + O(\epsilon^{n+1}), \quad (5)$$

其中,系数 λ_k 满足归一化条件 $\sum_{k=0}^n \zeta_k = 1, \sum_{m=0}^n \zeta_m \lambda_m^k = 0$. 注意到,我们将错误压制到了 $n+1$ 阶,对于较小错误率 ϵ ,该方法可以非常有效地缓解错误.然而,由于该方案的资源消耗随指数 n 增加,我们不能通过提高式(5)中 n 的大小任意地压制错误.

外推法的优势在于任何连续函数都可以被泰勒展开,故而,在保证能够准确提升系统的物理错误率的情况下,该方法在理论上可以应用于任何错误模型中.这是由于外推法没有使用噪声的具体形式做出特定的假设,故而,错误缓解后的测量结果的方差会急剧上升.特别地,可以得到 $\langle Z \rangle_{\text{est}}$ 的方差为

$$\text{Var}[\langle Z \rangle_{\text{est}}] = \sum_{k=0}^n \zeta_k^2 \text{Var}[\langle Z \rangle(\lambda_k \epsilon)], \quad (6)$$

可以看到,当假设 $\text{Var}[\langle Z \rangle(\lambda_k \epsilon)]$ 为常数时,方差被放大了 $\chi = \sum_{k=0}^n \zeta_k^2$ 倍,意味着我们的采样次数也需要增加同样的倍数以达到与无错误情况下相同的测量精度.可以估计出 χ 随着 n 呈指数增长,从而,我们仅可以对较小 n 进行展开.

值得注意的是,IBM演示了通过VQE求解LiH和H₂分子基态能量的实验^[15].

2) 指数外推法

上面1)讨论的Richardson外推法通过假设存在一个有效的泰勒展开式,可以将测量结果展开为错误率的多项式函数,且可以忽略高阶项的影响.实践中,量子设备具有的特点是物理错误率 ϵ 小,但量子门数目 M 较大,这种情况下多项式展开会变得不精确.Endo等人^[16]提出指数外推法(exponential extrapolation),使用指数衰减函数来替代原来的多项式展开.

考虑Markov随机错误,形式为

$$\mathcal{E} = (1-\epsilon)\mathcal{I} + \epsilon\mathcal{N}, \quad (7)$$

则 M 个有噪声的量子门 $\mathcal{EU} = \mathcal{E}_M \mathcal{U}_M \circ \mathcal{E}_{M-1} \mathcal{U}_{M-1} \circ \dots \circ \mathcal{E}_1 \mathcal{U}_1$ 可以展开为

$$\begin{aligned} \mathcal{EU} &= \prod_{k=1}^M ((1-\epsilon)\mathcal{I} + \epsilon\mathcal{N}_k) \circ \mathcal{U}_k = \\ &= \sum_{j=0}^M (1-\epsilon)^{M-j} \epsilon^j \sum_{i=1}^j \mathcal{F}_j^i = \\ &= \sum_{j=0}^M \alpha_j \mathcal{F}_j, \end{aligned} \quad (8)$$

式(8)第2行将展开的按照错误的数量重新分

组, \mathcal{F}_j^i 对应含有 j 个错误的展开.从而,我们可以将其写为第3行中二项式分布 $\alpha_j = \binom{M}{j} (1-\epsilon)^j \epsilon^j$,并且,定义 \mathcal{F}_j^i 的平均值为

$$\mathcal{F}_j = \frac{\sum_{i=1}^j \mathcal{F}_j^i}{\binom{M}{j}}. \quad (9)$$

对于量子线路中错误率 ϵ 较小、量子门 M 数量较多的情况,若二者满足 $M\epsilon = O(1)$ 的关系,则二项式分布 α_j 可以通过Poisson分布近似获得:

$$\alpha_j \approx e^{-M\epsilon} \frac{(M\epsilon)^j}{j!}, \quad (10)$$

噪声信道可以展开为

$$\mathcal{EU} = e^{-M\epsilon} \sum_{j=0}^M \frac{(M\epsilon)^j}{j!} \mathcal{F}_j, \quad (11)$$

其中,展开系数 $e^{-M\epsilon}$ 使得其随着 $M\epsilon$ 指数衰减.进一步,通过对该展开实施一阶近似,我们考虑在 ϵ 和 $\lambda\epsilon$ ($\lambda > 1$)两个噪声率下的测量结果 $\langle M \rangle(\epsilon)$ 和 $\langle M \rangle(\lambda\epsilon)$,可以得到对于无噪声情况的近似:

$$\langle M \rangle_{\text{est}}(0) = \frac{\lambda e^{M\epsilon} \langle M \rangle(\epsilon) - e^{M\lambda\epsilon} \langle M \rangle(\lambda\epsilon)}{\lambda - 1}. \quad (12)$$

错误缓解的额外开销为

$$\mathcal{C}_{\text{exp}} = \frac{\lambda^2 e^{2M\epsilon} + e^{2M\lambda\epsilon}}{(\lambda - 1)^2}. \quad (13)$$

指数外推法仅在观测量对错误率的展开式上进行了改变,故依然可以使用3.2节中提出的最小二乘法进行近似.Endo等人^[16]和Giurgica-Tiron等人^[17]分别通过数值模拟证明了指数展开相较于Richardson展开的优势.并通过IBM超导量子计算机就哈密顿量模拟进行了演示^[18].

3.2 最小二乘拟合

当被给定在不同错误率情况下的测量值时,我们可以使用最小二乘法(least square fitting)^[19]估计无错误情况下的测量结果.与第3.1节所讨论外推法类似,考虑不同错误率大小 $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_m$,外推法中使用的 n 阶泰勒展开可以近似为一个线性方程:

$$\mathbf{D}\mathbf{z} \approx \mathbf{k}, \quad (14)$$

其中,

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & \epsilon_1 & \dots & \epsilon_1^n \\ 1 & \epsilon_2 & \dots & \epsilon_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \epsilon_m & \dots & \epsilon_m^n \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\mathbf{z} = (\langle Z \rangle(0), Z_1, \dots, Z_n)^T,$$

$$\mathbf{k} = (\langle Z \rangle(\epsilon_1), \langle Z \rangle(\epsilon_2), \dots, \langle Z \rangle(\epsilon_m))^T.$$

错误率的数量 m 可以随着展开的阶数变化.式(14)的解可以通过最小化获得:

$$\|D\langle Z\rangle(\epsilon_1)-\mathbf{k}\|^2, \quad (16)$$

当 $m=n$ 时,式(16)给出的结果与 Richardson 展开一致.

实践中,最小二乘法可以对不同的噪声影响分配不同的系数.假设存在另一个噪声系数 κ ,我们可以获得观测量期望值的展开 $\langle Z\rangle(\epsilon,\kappa)$,将其展开为

$$\langle Z\rangle(\epsilon,\kappa)=\langle Z\rangle(0)+Z_{10}\epsilon+Z_{01}\kappa+Z_{11}\epsilon\kappa+Z_{20}\epsilon^2+Z_{02}\kappa^2+\cdots. \quad (17)$$

假设我们将式(17)展开截断到二阶,可以得到线性方程的各项为

$$\mathbf{D}=\begin{pmatrix} 1 & \epsilon_1 & \kappa_1 & \epsilon_1\kappa_1 & \epsilon_1^2 & \kappa_1^2 \\ 1 & \epsilon_2 & \kappa_2 & \epsilon_2\kappa_2 & \epsilon_2^2 & \kappa_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \epsilon_m & \kappa_m & \epsilon_m\kappa_m & \epsilon_m^2 & \kappa_m^2 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

及

$$\mathbf{z}=\begin{pmatrix} \langle Z\rangle(0) \\ Z_{10} \\ Z_{01} \\ Z_{11} \\ Z_{20} \\ Z_{02} \end{pmatrix}, \mathbf{k}=\begin{pmatrix} \langle Z\rangle(\epsilon_1,\kappa_1) \\ \langle Z\rangle(\epsilon_2,\kappa_2) \\ \vdots \\ \langle Z\rangle(\epsilon_m,\kappa_m) \end{pmatrix}. \quad (19)$$

则我们可以通过式(14)获得对 $\langle Z\rangle(0)$ 的估计.该方法通过 Rigetti 的八量子比特设备演示^[19].

3.3 量子子空间展开

量子子空间展开(quantum subspace expansion, QSE)法由 McClean 等人^[20]最先提出.假设已经获得关于某系统哈密顿量 H 基态的近似 $|\psi_{\text{ref}}\rangle$,将该量子态作为参考,我们用一组算符可以构造一个线性子空间展开这一参考态.具体而言,我们可以定义泡利算符集合 $\{G\subset I,X,Y,Z^{\otimes M}\}$ 及以该集合展开的子空间:

$$\{\rho_{\text{sub}}=\sum_{i,j}c_ic_j^*P_i\rho P_j|P_i\in G, c_i\in\mathbb{C},\text{tr}(\rho_{\text{sub}})=1\}, \quad (20)$$

其中, c_i, c_j 为展开系数,我们在展开后的子空间中求解能量的最小值以获得对噪声缓解的结果:

$$\min_c \text{tr}(\rho_{\text{sub}}H), \quad (21)$$

其中 $\mathbf{c}=(c_i)$.

如图 3 所示,给定有噪声的基态,我们可以通过子空间的扩展面来找到真实的基态.子空间展开的最优解可以通过以下泛化特征值问题求解得到:

$$\hat{H}\mathbf{C}=\hat{\mathbf{S}}\mathbf{C}\mathbf{E}, \quad (22)$$

其中, \hat{H} 为展开子空间中的哈密度量,形式为 $\hat{H}_{ij}=\text{tr}(\rho P_j H P_i)$, $\hat{\mathbf{S}}$ 为重叠矩阵,形式为 $\hat{S}_{ij}=\text{tr}(\rho P_j P_i)$, \mathbf{E} 为由特征值组成的对角矩阵, \mathbf{C} 为特征向量构成的矩阵.注意到, \hat{H} 和 $\hat{\mathbf{S}}$ 可以在量子计算机上高效测量得到,而泛化特征值问题可以通过经典计算机高效求解,当得到基态对应的特征值 c 后,我们可以计算获得能量或其他算符的平均值 $\sum_{ij}c_ic_j^*\rho P_j H P_i$,注意到通过该方法我们可以额外获得其他能级的激发态.

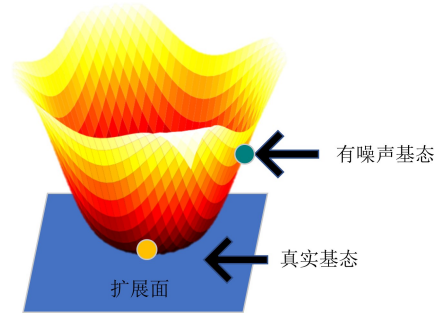


Fig. 3 Schematic of quantum subspace expansion

图 3 量子子空间展开法示意图

具体分析量子子空间展开的错误缓解效果.令 $\mathcal{P}=\sum_i c_i P_i$,子空间展开方法等价于在子空间 $\{\rho_{\text{sub}}=\mathcal{P}\rho\mathcal{P}^\dagger/\text{tr}(\mathcal{P}\rho\mathcal{P}^\dagger)\}$ 下进行优化,我们可以通过奇异值分解将 \mathcal{P} 分解为 $\mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^\dagger$ 形式,其中 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 为幺正矩阵,而 \mathbf{D} 为对角矩阵.展开算符的效果可以理解为对量子态的转动和投影.故而,QSE 方法可以用于缓解相干错误和随机错误.如由于对量子系统的不完美调控,我们在实施量子门过程中可能会对特定量子态的转角产生过度或不足的转动,QSE 可以在一定程度上缓解该问题.然而,一般量子态展开泡利算符形式会产生指数多项数,故使用线性空间或低阶空间展开不足以纠正这些错误,QSE 方法对相干错误的缓解能力有限.对于随机错误,考虑得到的有噪声基态与真实基态非常接近的情况.QSE 方法在这种情况下无法保证在子空间求解得到的解中,噪声基态(对应展开算符为 I)的展开系数 c_0 接近于 1.然而,我们可以通过 3.4 节讨论的对称性验证(symmetry verification)方法相结合可以极大提升 QSE 对随机错误的纠正能力.

3.4 对称性验证

当系统遵循一定的物理对称性时,我们可以通过设计满足这种对称性的波函数拟设来缩小参数搜索

的范围.例如,对于遵循粒子数和自旋守恒的系统,考虑设计由使得系统的总粒子数和自旋守恒的么正变换构成的波函数拟设,则可以选择么正偶合簇(unitary coupled-cluster)^[21]方法,或者特定的硬件高效拟设(hardware-efficient ansatz)^[22].相应地,我们可以通过对称性检验(symmetry verification)^[23-24]的方式来检验输出波函数是否仍然具备这种对称性.理想的量子算法实施会保持量子态的对称性,但是由有噪声的量子线路制备得到的量子态可能会破坏这种对称性.因为对称性仅在错误出现的情况下才会被破坏,故对称性验证方法的工作原理为丢掉对称性被破坏的测量结果.

具体而言,对称性检验量子线路输出态是否遵循特定对称性的方式为对该对称性实施奇偶校验,注意到该校验方式在量子纠错码中常常使用,但这里我们不纠正错误,而是去掉有瑕疵的结果.我们可以通过泡利群(Pauli group) \mathbb{P}_N 来理解奇偶验证.泡利群 \mathbb{P}_N 中所有元素由所有长度为 N 的泡利矩阵 \mathbf{X} , \mathbf{Y} 和 \mathbf{Z} ,及单位矩阵 \mathbf{I} 构成的直积态组成,群元的第 i 个元素代表作用到第 i 个量子比特的操作.注意到, \mathbb{P}_N 中任意群元都有 ± 1 两个特征值,并分别表示该群元检测量的奇偶性,若为偶数则为1,若为奇数则为-1.特定群元可以用于对系统相应对称性进行奇偶校验,而理想波函数应为相应对称性算符的本征态.例如,考虑对于理想波函数 $|\psi\rangle$ 的粒子数奇偶性算符 \hat{P}_N ,其应满足:

$$\hat{P}_N|\psi\rangle=e|\psi\rangle,$$

(23)

其中, $e=\pm 1$.对应的校验线路如图4所示,可以看到当有偶数个粒子时,校验结果为1,反之则为-1.为了保证测量的高效性,我们一般关注可以表达为泡利算符的对称性表示.例如,粒子数和自旋的奇偶算符 \hat{P}_N 和 $\hat{P}_{\uparrow,\downarrow}$ 都有 ± 1 的特征值,故可以在合适的编码方式下映射为泡利算符.与奇偶校验不同的是,由于一般的观测量可以分解为局域泡利算符的

直积态,系统的对称性可以通过由局域泡利测量及经典后处理获得,从而不需要额外的辅助量子比特.然而,由于该方法通过经典后处理(post-processing)缓解错误,故需要更多的测量次数.

更一般地,对于同时包含 \hat{P}_N 正负2部分本征态的有噪声量子态 ρ ,我们可以将其投影到子空间:

$$\rho_e=\frac{M_e\rho M_e}{\text{tr}(M_e\rho)},$$

(24)

其中, $M_e=\frac{I+eP_N}{2}$.这样,对称性算符测量值与目标值不符的部分会被丢掉.假设观测量为系统哈密顿量 H ,且其与校验算符 \hat{P}_N 对易,我们有:

$$\text{tr}(H\rho_e)=\frac{\text{tr}(H\rho)+e\text{tr}(H\hat{P}_N\rho)}{1+e\text{tr}(\hat{P}_N\rho)}.$$

(25)

故而,我们可以通过测量 $\text{tr}(H\rho)$, $\text{tr}(H\hat{P}_N\rho)$ 和 $\text{tr}(\hat{P}_N\rho)$ 来高效获取后选择态(post-selected state) ρ_e 的观测值.注意到,式(24)中的形式与QSE方法的子空间态一致.当我们将 e 作为参数优化时,我们得到的算法与QSE等价.已经验证当给定系统基态的对称性时,上述方法的结果与QSE^[20]相同.注意到,经典后处理方法已经在两量子比特超导量子比特计算机上演示证明^[25].

参考量子纠错中应用最为广泛的稳定子编码(stabilizer code),McClean等人^[26]设计了对应的经典后处理版本,相较于稳定子编码需要对稳定子群(stabilizer)中各生成元(generator)实施对应的奇偶校验线路,该方法可以在完全忽略这些线路实施的情况下检测错误.另外,我们可以以概率的形式实施量子纠错码中具备的各个对称性投影,使得量子态回归到码字(codeword)空间.相应的后处理解码器(decoder)通过数值实现了对5个量子比特量子化学模拟的纠错并获得了50%的有效纠错阈值(threshold).

3.5 测量错误缓解

测量错误缓解(measurement error mitigation)^[27-29]用于减少测量过程中的错误.假设理想测量过程由一组正算符值测量(positive-operator valued measure, POVM)构成 $\{F_i\}$.对于系统状态 ρ ,获得第 i 个测量结果的概率为 $P_i=\text{tr}(F_i\rho)$.将理想概率分布表示为 $\mathbf{P}_{\text{ideal}}=(P_1,P_2,\cdots,P_{M-1},P_M)^T$,其中, M 为正算符值测量的数量.当测量中存在错误时,测量错误将理想概率分布转换为

$$\mathbf{P}_{\text{noisy}}=\mathbf{F}\cdot\mathbf{P}_{\text{ideal}},$$

(26)

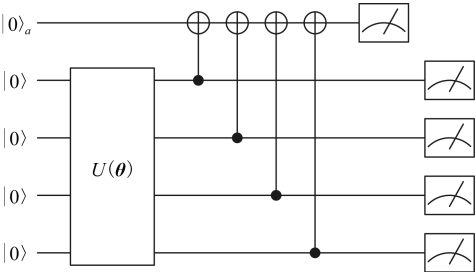


Fig. 4 Schematic of verify circuit^[5]

图4 检测线路示意图^[5]

其中, \mathbf{F} 为转换矩阵. 例如, 我们可以考虑对单量子比特的投影测量结果 $\mathbf{P} = (P_0, P_0)$, 错位测量错误可以描述为

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1-\epsilon & \eta \\ \epsilon & 1-\eta \end{pmatrix}, \quad (27)$$

其中, ϵ 和 η 分别为量子比特状态 0 和 1 的发生翻转的错误概率.

实践中, 对变换矩阵的估计可以通过量子探测器态层析 (quantum detector tomography) 实现. 当我们不考虑探测器对不同量子比特存在串扰错误 (crosstalk error) 时, 对整体变换矩阵的估计可以表示为各个部分变换矩阵估计的直积态. 我们可以通式 (28) 获得对无错误情况的估计:

$$\mathbf{P}_{\text{est}} = \mathbf{F}_{\text{est}}^{-1} \mathbf{P}_{\text{noisy}}. \quad (28)$$

然而, 由于量子错误的存在, 如相干错误, 我们获得的转换矩阵中可能会出现非物理概率. 为了避免这一问题, 我们可以采用优化方法:

$$\mathbf{P}_{\text{est}}^* = \arg \min_{\mathbf{P}_{\text{est}}} \|\mathbf{F} \cdot \mathbf{P}_{\text{est}} - \mathbf{P}_{\text{noisy}}\|, \quad (29)$$

要求 \mathbf{P}_{est} 满足归一化条件且其元素全部为正, $\|\cdot\|$ 表示欧几里得范数.

该方法用于 IBM 5 量子比特设备上^[27-28]. 近期, 测量错误缓解技术被延伸到测量阶段存在量子比特间的关联错误的情况, 并在 IBM 20 量子比特计算机上演示^[30].

3.6 N 阶可表示性

N 阶可表示性 (N -representability) 由 Rubin 等人^[31]引入量子错误缓解领域. 考虑 N 电子系统, 其哈密顿量 H 为

$$H = h_{ij} a_i^\dagger a_j + V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l, \quad (30)$$

其中, a_i^\dagger 和 a_j 分别为费米子生成、湮灭算符, h_{ij} 和 V_{ijkl} 分别为单电子和两电子相互作用系数. 对于当前系统量子态 $|\psi\rangle$, 系统能量表达为

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = h_{ij} \langle \psi | a_i^\dagger a_j | \psi \rangle +$$

$$V_{ijkl} \langle \psi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | \psi \rangle = h_{ij} \mathbf{D}^1 + V_{ijkl} \mathbf{D}^2, \quad (31)$$

其中, \mathbf{D}^1 和 \mathbf{D}^2 分别为系统的单电子和两电子约化密度矩阵 (reduced density matrix, RDM), 分别记作 1-RDM 和 2-RDM. 实验上, 我们可以高效测量得到体系的 2-RDM, 并约化得到 1-RDM. 由于具有实际的物理意义, 要求 2-RDM 不但满足约化密度矩阵自身的性质, 如厄米性、交换反对称性、迹为 $N \times (N-1)$ 等, 还需加入额外限制条件保证其为 N 电子密度矩阵约化而来, 这些条件称为 N 阶可表示性 (N -representability) 条件. 由于得到全部条件被证明是 QMA-complete 问题, 理论上无法获得, 故一

般考虑近似、必要非充分条件, 如 2 阶正定条件 (2-positive conditions), 其形式为

$$\mathbf{D}^2 = \langle \psi | a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l | \psi \rangle \geq 0, \quad (32)$$

$$\mathbf{Q}^2 = \langle \psi | a_i a_j a_i^\dagger a_k^\dagger | \psi \rangle \geq 0, \quad (33)$$

$$\mathbf{G}^2 = \langle \psi | a_i^\dagger a_j a_i^\dagger a_k | \psi \rangle \geq 0, \quad (34)$$

式 (32)~(34) 要求两电子、两空穴、单电子和单空穴 RDM 都是半正定的, 对应的物理意义为在任意两电子轨道找到两电子、两空穴、一个电子和一个空穴的概率大等于 0. N 阶可表示性规定了测量得到的 2-RDM 具备怎样的性质才为物理或化学上可以出现的, 实验测量得到的 2-RDM 往往由于噪声的存在不满足这些条件, 通过将测量得到的 2-RDM $\mathbf{D}_{\text{mea}}^2$ 投影到满足 N 阶可表示性空间最近的点上, 我们可以得到错误缓解后的结果.

Rubin 等人^[31]使用半正定规划 (semi-definite programming) 算法将 $\mathbf{D}_{\text{mea}}^2$ 投影到满足限定条件空间距离最近的 $\tilde{\mathbf{D}}^2$. Google 公司通过类似的思想, 使用 McWeen 纯化及 3.4 节讨论的对称性验证方法实现了 12 电子量子体系模拟^[11], 成功将 2% 保真度的结果还原为 99%.

3.7 准概率模型

当可以获得噪声模型的形式时, 我们可以随机施加噪声的逆过程, 从而抵消掉噪声的影响. 利用这一思想的错误缓解方法首先被 Temme 等人^[32]提出用于特殊量子信道, 而后被 Endo 等人^[16]泛化到 Markov 噪声模型中. 考虑一个有噪声量子门 $\mathcal{E} \circ \mathcal{U}$, 其中, \mathcal{U} 为量子门的理想表达, 而 \mathcal{E} 为噪声. 若可以实施该噪声的逆过程 $\mathcal{E}_R = \mathcal{E}^{-1}$ 使得 $\mathcal{E}^{-1} \circ \mathcal{E} = \mathcal{I}$, 称为恢复操作, 可以抵消掉噪声的影响, 如图 5 所示. 实践中, 可以通过量子态层析来获取噪声信道的表达.

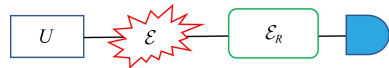


Fig. 5 Schematic of probabilistic error cancel

图 5 概率错误抵消示意图

注意到对量子信道求逆得到的概率表达形式中可能存在负概率, 故我们无法直接实施该方法. Temme 等人^[32]利用准概率方法解决了这一问题. 具体而言, 对于任何一组量子过程 \mathcal{B}_j , 我们可以利用其将上述过程分解为

$$\mathcal{E}^{-1} = \sum_j q_j \mathcal{B}_j = \tau \sum_j p_j \text{sgn}(q_j) \mathcal{B}_j,$$

其中 $\tau = \sum_j |q_j|$, $p_j = \frac{|q_j|}{\tau}$. 这样, 我们可以将各个

信道 \mathcal{B}_j 以一定概率 p_j 随机加入到量子线路中,并通过线性组合获得错误缓解结果.特别地,对观测量 Z ,其理想测量期望值 $\langle Z \rangle_{\mathcal{U}(\rho)}$ 可以表达为

$$\begin{aligned} \langle Z \rangle_{\mathcal{U}(\rho)} &= \text{tr}(\mathcal{E}^{-1} \circ \mathcal{E} \circ \mathcal{U}(\rho) Z) = \\ &\tau \sum_j p_j \text{sgn}(q_j) \langle Z \rangle_{Q_j(\rho)}, \end{aligned} \tag{35}$$

其中, $\langle Z \rangle_{Q_j(\rho)} = \text{tr}(\mathcal{B}_j \circ \mathcal{E} \circ \mathcal{U}(\rho) Z)$. 从而,我们通过蒙特卡洛方法以概率 p_j 将操作 \mathcal{B}_j 加入到量子线路中.进一步,每一次的测量值乘以对应的 $\text{sgn}(q_j)$, 加和足够次数的结果后乘以 τ 即可获得错误缓解的结果.在实施过程中,我们对期望值乘以 τ ,使得结果的方差变为原来的 τ^2 倍.这是准概率方法的实施代价.

下面以一个例子分析概率错误抵消方法.考虑去极化信道 (depolarizing channel), 系统量子态 $\mathcal{U}(\rho)$ 受到该信道作用后得到的形式为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_D(\mathcal{U}(\rho)) &= \left(1 - \frac{3}{4}p\right)\mathcal{U}(\rho) + \\ &\frac{p}{4}(X\mathcal{U}(\rho)X + Y\mathcal{U}(\rho)Y + Z\mathcal{U}(\rho)Z), \end{aligned} \tag{36}$$

得到其逆过程形式为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_R(\rho) &= \tau(p_1\rho + (-1) \times \\ &p_2(X\rho X + Y\rho Y + Z\rho Z)), \end{aligned} \tag{37}$$

其中, $p_1 = \frac{4-p}{2p+4}$, $p_2 = \frac{p}{2p+4}$, $p_1 + 3p_2 = 1$, $\tau = 1 + \frac{3p}{1-2p}$. 观测量 M 的理性期望值表达为

$$\begin{aligned} \langle M \rangle_{\mathcal{U}(\rho)} &= \tau(p_1 \text{tr}(\rho M) + (-1) \times \\ &p_2(\text{tr}(X\mathcal{U}(\rho)XM) + \text{tr}(Y\mathcal{U}(\rho)YM) + \\ &\text{tr}(Z\mathcal{U}(\rho)ZM))). \end{aligned} \tag{38}$$

当测量量子态时,相应符号及常数 τ 作用于测量结果.重复多次后,我们可以获得理论上理想的测量结果.

上面的讨论主要针对单个量子门的错误缓解,准概率方法也可以用于对任意量子线路的错误缓解^[16],如图 6 所示.假设量子线路过程的形式为

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^m \mathcal{U}_k, \mathcal{U}_k \text{ 代表各个量子门.假设 } \mathcal{U}_k \text{ 可以分解为} \\ \mathcal{U}_k = \tau_k \sum_{i_k} p_{i_k} \text{sgn}(q_{i_k}) Q_{i_k}, \end{aligned} \tag{39}$$

其中, $Q_{i_k} = \mathcal{B}_{i_k} \circ \mathcal{E} \circ \mathcal{U}_k$. 从而,理想过程可以表示为

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^m \mathcal{U}_k &= \prod_{k=1}^m \tau_k \sum_{i_k \in s} p_{i_k} \prod_{k=1}^m \text{sgn}(q_{i_k}) \prod_{k=1}^m Q_{i_k} = \\ &\tau_{\text{sum}} \sum_{k=1}^m p_{i_k} \cdot \text{sgn}(q_{i_k}) \cdot Q_{i_k}, \end{aligned} \tag{40}$$

其中, $s = \{i_1, i_2, \dots, i_m\}$, $\tau_{\text{sum}} = \prod_{k=1}^m \tau_k$, $p_i = \prod_{k=1}^m p_{i_k}$,

$\text{sgn}(q_i) = \prod_{k=1}^m \text{sgn}(q_{i_k})$, 及 $Q_i = \prod_{k=1}^m Q_{i_k}$. 故而,对于每一种不同的噪声过程,我们可以同时以概率 p_i 实施 Q_i 到量子线路中,对测量结果乘以 $\text{sgn}(q_i)$ 后,对于足够次数的结果加和乘以 τ_{sum} 获得对观测期望值的错误缓解结果.类似于上面对于单量子比特门的讨论,准概率方法对于量子线路的错误缓解带来的额外开销增大比例为 τ_{sum}^2 .

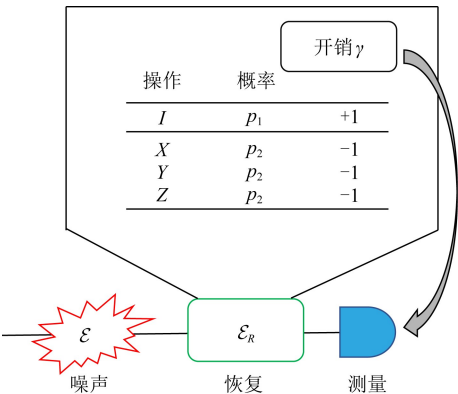


Fig. 6 Schematic of the quasi-probability method^[4]

图 6 准概率方法示意图^[4]

3.8 个体错误减少

个体错误减少 (individual error reduction)^[33] 将量子纠错用于单个量子比特错误检测,并使用经典后处理来缓解错误.假设每一个量子门受到物理噪声的作用形式由 Lindblad 主方程给出:

$$\frac{d}{dt}\rho = \sum_j \mathcal{L}_j(\rho), \tag{41}$$

$$\mathcal{L}_j(\rho) = 2L_j^\dagger \rho L_j - L_j^\dagger L_j \rho - \rho L_j^\dagger L_j. \tag{42}$$

$\mathcal{L}_j(\rho)$ 为作用于第 j 个量子比特的 Lindblad 算符,噪声的持续时间为 T .假设第 k 个量子比特被编码为逻辑量子比特,其噪声通过量子纠错被压制为原来的 η_k 倍.从而,量子态的演化过程变为

$$\frac{d}{dt}\rho_k = \sum_{j \neq k} \mathcal{L}_j(\rho) + (1 - \eta_k) \mathcal{L}_j(\rho_k), \tag{43}$$

从而,个体错误减少的定义为

$$\tilde{\rho}^{\text{est}} = \rho_{\text{ideal}} + O(T^2), \tag{44}$$

其中, ρ_{ideal} 为量子线路的无错误输出态.接下来,对于观测量 Z ,我们可以通过量子计算高效测量得到其期望值 $\langle Z \rangle = \text{tr}(M\rho^{\text{noisy}})$ 和量子纠错后的期望值 $\langle Z \rangle_k = \text{tr}(M\rho_k^{\text{noisy}})$,利用二者我们可以通过经典后处理得到对理想期望值 $\langle Z \rangle_{\text{ideal}} = \text{tr}(\rho_{\text{ideal}} Z)$ 的估计:

$$\langle \tilde{Z} \rangle_{\text{est}} = \langle Z \rangle - \sum_k \frac{1}{\eta_k} (\langle Z \rangle - \langle Z \rangle_k). \tag{45}$$

注意到,个体错误减少将错误压制到一阶,我们可以在此基础上与其他量子错误缓解方法结合获得更好的效果.由于使用量子纠错,该方法相较于其他量子错误缓解算法会带来额外的硬件和算力开销.

3.9 基于机器学习的量子错误缓解算法

1) Clifford 数据回归(Clifford data regression)

机器学习算法由于其强大的函数拟合能力,在一系列数值计算问题中展现出优势.以监督学习(supervised learning)为例,我们假设可以获得大小为 n 的训练集 $\{x_i^{\text{noisy}}, x_i^{\text{ideal}}, i \in \{1, 2, \dots, n\}\}$ 和大小为 m 的测试集 $\{x_j^{\text{noisy}}, x_j^{\text{ideal}}, j \in \{1, 2, \dots, m\}\}$. 则可以利用机器学习算法实现对从 $\{x_i^{\text{noisy}}\}$ 到 $\{x_i^{\text{ideal}}\}$ 的映射学习: $x_i^{\text{ideal}} = f(x_i^{\text{noisy}}, \mathbf{w})$. 其中, f 为选定的机器学习算法,如回归(regression)算法或者神经网络(neural networks)算法; \mathbf{w} 为算法的优化参数.

注意到使用经典计算机模拟一般量子线路的困难性, Czarnik 等人^[34]提出使用 Clifford 线路作为训练数据的来源.理由是 Clifford 量子线路可以被经典计算机高效模拟,从而保证了训练过程的高效性.一旦学习完成,我们可以使用训练好的模型预测任意给定的噪声结果对应的理想观测结果.理想情况下,不论我们给定的量子线路的形式如何,机器学习算法在训练过程中能够学习到有噪声观测量到理想观测量的映射模式,这一映射模式隐含了对系统噪声模式的学习.故而,我们可以在测试阶段将训练得到的模型用于任意具备相同噪声模式的数据,由于机器学习算法的泛化性质,可以保证在预测阶段模型获得合理的表现.

具体而言, Czarnik 等人^[34]通过从真实 Clifford 量子线路采样得到 $\{x_i^{\text{noisy}}\}$, 并通过经典计算机模拟生成 $\{x_i^{\text{ideal}}\}$. 并使用线性回归算法表征二者间的映射: $f(x_i^{\text{noisy}}, \mathbf{w}) = ax_i^{\text{noisy}} + b$. 这里选择损失函数为

$$L(\mathbf{w}) = \sum_i (f(x_i^{\text{noisy}}, \mathbf{w}) - x_i^{\text{ideal}})^2. \quad (46)$$

Clifford 数据回归模型已经在 IBMQ16 量子比特计算机和 64 量子比特经典计算机上进行演示^[34]. 由于机器学习算法具有强大的模式学习能力,这类算法具备高度的灵活性和通用性,可以应用于各类噪声模型和实验数据中,且可以同时用于 Markov 和关联错误.这使得面相特定量子设备的错误缓解成为可能.

2) 基于学习的准概率方法(learning-based quasi-probability method)

Strikis 等人^[35]提出使用机器学习算法用于准

概率方法,从而可以避免使用量子态层析.该方法关注的量子线路由单量子比特门和 Clifford 两量子比特门构成.注意到,这足以组成通用量子门集合(universal gate set),故实践中,我们可以将任意的量子线路编译为由上述量子门组成的线路.假定主要的错误来源为两量子比特门.使用 $\mathcal{U} = \{U_1, U_2, \dots\}$ 代表单量子比特门, $\mathcal{V}^{\text{ideal}}(\mathcal{U})$ 和 $\mathcal{V}^{\text{noisy}}(\mathcal{U})$ 分别代表理想和有噪声的量子线路.准概率方法通过在各个量子门前加入单量子比特泡利算符 $\mathcal{K} = \{K^1, K^2, \dots\}$ 来恢复理想过程.将带有额外错误缓解操作的量子线路表示为 $\mathcal{V}^{\text{noisy}}(\mathcal{U}, \mathcal{K})$. 准概率方法通过搜索参数 $\kappa(\mathcal{K})$ 使得:

$$\mathcal{V}^{\text{est}}(\mathcal{U}) = \sum_K \kappa(K) \mathcal{V}^{\text{noisy}}(\mathcal{U}, K) \quad (47)$$

近似于 $\mathcal{V}^{\text{ideal}}(\mathcal{U})$. 一般非学习准概率方法以对量子信道的态层析来获得参数.由于过高开销,这种方式可能在用于得到时间和空间上的存在关联错误的描述时失效.

准概率学习方法提供了避免使用态层析的替代方案. $\pi^{\text{ideal(est)}}(\mathcal{U})$ 为对理想观测值的估计.选定机器学习模型参数 $\kappa(K)$ 及训练集 \mathcal{S} , 损失函数为

$$\mathcal{L}(\mathcal{U}) = \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{\mathcal{U} \in \mathcal{S}} |\pi^{\text{ideal}}(\mathcal{U}) - \pi^{\text{est}}(\mathcal{U})|^2. \quad (48)$$

这里,为了保证训练过程的效率,我们的训练集选择使用 Clifford 群生成量子线路.可以看到与 1) Clifford 数据回归的学习方法类似,由于机器学习算法的泛化性,算法可以学习到噪声的模式.故在测试环节中,我们可以将训练好的模型用于任意存在非关联错误的非 Clifford 单量子比特门中.

注意到随着线路中量子门个数的增加,恢复操作构成的空间大小可能会呈现指数级上升.这种情况下,一种方法是采用截断方法,另一种为变分优化方法.前者通过泡利旋转(Pauli twirling)^[13]将错误转化为有错误的泡利量子门,并截断该空间的大小到与量子线路大小呈多项式关系.后者则通过蒙特卡洛采样得到损失函数并通过变分法优化该损失函数.实践中,我们可以使用不完美的量子门组态层析作为优化的初始点.

3.10 随机错误缓解

相较于离散的数字量子模拟,当前量子计算领域没有系统的方法对模拟量子模拟(analog quantum simulation)实施量子纠错^[36]. 而随机错误缓解为连续的模拟量子模拟提供了压制错误的方法,可以实现有效应用.

考虑,假设系统的动力学演化过程由 Lindblad 主方程给出:

$$\frac{d}{dt}\rho = -i[H, \rho] + \mathcal{L}(\rho), \quad (49)$$

$$\mathcal{L}(\rho) = \sum_j 2L_j \rho L_j^\dagger - L_j^\dagger L_j \rho - \rho L_j^\dagger L_j, \quad (50)$$

其中, H 为系统哈密顿量, $\mathcal{L}(\rho)$ 为有噪声的 Lindblad 算符. 假设 Lindblad 算符的作用为局域的且其作用较弱. 由于随着系统动力学演化, Lindblad 算符的作用会传播到整个系统, 导致一般而言对于这种具有全局效应的物理噪声的缓解是困难的. 简单起见, 这里假设系统哈密顿量是不含时的, 注意到这里的结果同样对含时情况有效. 将量子态从时刻 t 到 $t + \delta t$ 的演化表示为

$$\rho_k(t + \delta t) = \mathcal{E}_k(\rho_k(t)), \quad (51)$$

其中, $k = \mathcal{I}, \mathcal{N}$ 分别对应理想和有噪声情况. 为了通过有噪声演化过程 $\mathcal{E}_{\mathcal{I}}$ 模拟理想的演化过程 $\mathcal{E}_{\mathcal{N}}$, 可以通过式(52)实施准概率方法:

$$\mathcal{E}_{\mathcal{I}} = \mathcal{E}_{\mathcal{R}} \mathcal{E}_{\mathcal{N}}, \quad (52)$$

其中, $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$ 为恢复算符, 其可以分解为

$$\mathcal{E}_{\mathcal{R}} = \sum_i q_i \mathcal{B}_i = \tau_{\mathcal{R}} \sum_i \text{sgn}(q_i) p_i \mathcal{B}_i, \quad (53)$$

其中, $\tau_{\mathcal{R}} = \sum_i |q_i|$, $p_i = |q_i| / \tau_{\mathcal{R}}$, \mathcal{B}_i 为单量子比特算符直积. 为了模拟在时间 T 内的整个演化过程, 我们可以通过在每一个时间间隔 ν 实施一次恢复操作 $\mathcal{E}_{\mathcal{R}}$. 故而, 共需要实施 T/ν 次操作, 代价为 $C_{\text{tot}} = \mathcal{E}_{\mathcal{R}}^{T/\nu}$.

注意到, 对于模拟量子模拟, 持续地实施式(53)恢复操作会带来过高的开销. 每一个小时间段 δt 内所实施的恢复操作接近全等算符. 这里, 我们可以使用蒙特卡洛方法在整个过程中随机地加入强恢复操作, 类似于随机薛定谔方程.

3.11 量子错误缓解方法的组合

在 3.8 节的讨论中, 我们已经提及不同量子错误缓解方法间的结合可以弥补特定方法的缺陷. 这里, 我们就 3 种不同的方法结合^[37]进行讨论.

1) 对称性验证与外推法结合

对称性验证方法无法识别能够保持系统对称性的错误, 这些错误与对称性检测算符相互对易, 称之为对易错误(commuting error), 而其他错误称之为反对易错误(anti-commuting error). 而与对称性检测算法反对易的错误经过偶数次的出现与积累, 其也会与检测算符相互对易. 为了增加算法的错误缓解能力, 一种方法是将其与外推法结合. 假设对观测

量 Z 在错误率为 ϵ 下对称性检测后得到的观测期望值为 $\langle Z \rangle_{\text{sym}}(\epsilon)$, 使用外推法可以进一步缓解对称性检测后仍然存在的与检测算符对易的错误:

$$\langle Z \rangle_{\text{est}} = \frac{\lambda \langle Z \rangle_{\text{sym}}(\epsilon) - \langle Z \rangle_{\text{sym}}(\lambda \epsilon)}{\lambda - 1}. \quad (54)$$

这里采用线性外推法. 数值上, 该方法被 McArdle 等人^[23]验证. 并且, Cai^[38]讨论了该方法在 Hubbard VQE 算法中的应用.

2) 准概率方法与外推法结合

我们也可以使用准概率方法与外推法结合^[38]. 这种情况下, 我们不使用准概率方法来缓解所有类型的错误, 而是不改变噪声信道形式的情况下实现对噪声率的压制. 从而, 我们可以获得在不同噪声大小的测量期望值, 并使用外推法获得理想测量期望值. 相较于一般的外推法, 我们不需要在量子设备上通过实验手段获得不同噪声率情况下的测量值, 且由于可以降低而非增加噪声率, 我们可以获得更低的估计误差. 代价是引入准概率方法会产生更高的采样需要. 发现这 2 种方法的结合可以用于缓解连续过程的物理和模型估计误差^[37].

3) 准概率与对称性验证方法结合

本节 1) 讨论到对称性验证方法无法检测到与对称性检测算符对易的错误. 通过引入准概率方法, 我们可以通过改变噪声信道的形式, 从而改变错误与对称性检测算符的对易性, 实现更好的效果. 在实施准概率方法的过程中, 额外加入的量子门可能会与对称性检测算符反对易, 故而, 我们需要相应改变结果的对称性. 准概率方法用于缓解线路中的反对易错误. 在此之后, 若线路中剩下的反对易错误为奇数个, 则会被对称性验证方法检验并纠正; 若存在偶数个, 则无法检测.

使用 ν 代表系统经过准概率方法作用后剩余的错误数量, 而后通过式(11)可以获得这种情况下系统观测量的期望值为

$$\langle Z \rangle(\nu) = e^{-\nu} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\nu^k}{k!} \langle Z \rangle_k, \quad (55)$$

其中, $\langle Z \rangle_k$ 为观测量在量子线路中存在 k 个错误情况下的期望值.

通过 3.1 节 2) 中对指数外推法的讨论, 可知观测量遵从指数衰减曲线:

$$\langle Z \rangle(\nu) = \langle Z \rangle(0) e^{-\Gamma_d \nu}, \quad (56)$$

假定 $\langle Z \rangle(\nu)$ 与理想情况测量值 $\langle Z \rangle(0)$ 满足:

$$\langle Z \rangle_k = \langle Z \rangle(0) (1 - \Gamma_d)^k, \quad (57)$$

其中, $0 \leq \Gamma_d \leq 1$. 可知在实施对称性验证方法后, 量子线路中仅可能存在偶数个非对易错误, 给定下列观测结果:

$$\langle Z \rangle_e = \frac{1}{\cosh(\nu)} \sum_{\text{偶数 } k} \frac{\nu^k}{k!} \langle Z \rangle_k = \frac{\cosh((1-\Gamma_d)\nu)}{\cosh(\nu)} \langle Z \rangle(0), \quad (58)$$

其中, 对概率分布的归一化常数由 $e^{-\nu}$ 变为 $\frac{1}{\cosh(\nu)}$. 所以, 经过对称性验证后的结果 $\langle Z \rangle_e$ 总是比式(56)中 $\langle Z \rangle(\nu)$ 更接近 $\langle Z \rangle(0)$.

4 量子错误缓解技术未来发展方向

以测量错误减少和准概率方法等为代表的错误缓解技术, 面向特定的量子信道, 通过严格推导可以达到对错误形成有保证的缓解效果. 然而, 实践过程中, 一方面, 这类方法依赖错误的形式, 故需要实施具有高开销的态和信道层析技术; 另一方面, 真实设备中错误的来源多种多样, 很难通过严格的推导实现对所有类型错误的缓解. 而类似于外推法等方法, 没有利用错误本身的信息, 导致达到理想精度的错误缓解效果一般需要高度的计算资源. 机器学习算法为这种两难的困境提出了一大出路. 理由是机器学习算法具有强大的模式识别的能力^[39], 能够从训练数据中学习到系统噪声对理想测量期望值的改变模式, 故使得机器学习算法在这一方面具有更高的灵活性: 既可以用于各类特定形式的量子信道中, 也可以对实验数据进行处理. 故而, 未来在量子错误缓解领域更多机器学习算法的进入值得期待. 并且, 机器学习算法的开销主要集中于训练阶段, 当完成训练后可以使用训练好的模型低成本地推断各类情况下的错误缓解结果.

除此以外, 利用计算任务本身特性的错误缓解算法展现出具有优势的表现, 如 3.6 节的 N 阶可表示性^[31]. 在近期量子计算任务中, 量子模拟求解化学、物理体系的基态及动力学过程等成为最受瞩目的分支之一, 值得期待的是未来更多面向特定物理、化学体系的错误缓解算法的提出. 这有赖于在传统凝聚态物理、量子多体物理和量子化学领域对体系的知识积累, 利用相应的认识和见解, 可以获得理想结果所存在的子空间, 从而对量子态施加除了对称性验证以外更为具体的限制以约束结果到相应子空

间. 可以预见, 对物理、化学体系信息的更充分利用可以带来更加稳定的结果表现以及在算法开销上的优势.

5 结束语

我们通过量子模拟, 引入和介绍了量子错误缓解技术的重要性: 在 NISQ 时代, 通过插入特定量子门到量子线路中和经典后处理, 量子错误缓解保证了即便存在噪声, 较浅量子线路也可以有效实施. 并且, 量子错误缓解方法可以延伸到连续的量子过程中, 为实施定量的模拟量子计算提出了一定的可能性. 故而, 错误缓解方法成为发挥近期量子计算机能力的必不可少的元素.

本文还对量子错误缓解的未来可能发展方向进行了讨论. 我们认为量子错误缓解的发展具有巨大的潜力. 由于实验上可以控制的量子比特数目, 量子错误缓解将作为量子纠错的过度技术而存在, 且为各类量子算法的实施提供保障. 特别地, IBM 等行业巨头在提供量子计算机云服务的同时, 都考虑使用相应量子错误缓解技术作为实施算法的必要选项. 注意到, 机器学习算法在与量子纠错方法的结合中经历了相对较长时间、多种形式的发展, 包括受限玻尔兹曼机、卷积神经网络和强化学习等^[40-42]. 而目前, 量子错误缓解技术在此领域仍存在大量未探索方向.

参 考 文 献

- [1] Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond [J]. Quantum, 2018, 2: 79
- [2] Fowler A G, Mariantoni M, Martinis J M, et al. Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation [J]. Physical Review A, 2012, 86(3): 032324
- [3] Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor [J]. Nature Communications, 2014, 5(1): 1-7
- [4] McArdle S, Endo S, Aspuru-Guzik A, et al. Quantum computational chemistry [J]. Reviews of Modern Physics, 2020, 92(1): 015003
- [5] Endo S, Cai Zhenyu, Benjamin S C, et al. Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2021, 90(3): 032001

- [6] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S. A quantum approximate optimization algorithm [J]. arXiv preprint arXiv:1411.4028, 2014
- [7] Feynman R P. Simulating physics with computers [J]. International Journal of Theoretical Physics, 1982, 21(6): 467-488
- [8] Korte B H, Vygen J, Korte B, et al. Combinatorial Optimization [M]. Berlin: Springer, 2011
- [9] Endo S, Cai Zhenyu, Benjamin S C, et al. Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2021, 90(3): 032001
- [10] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor [J]. Nature, 2019, 574(7779): 505-510
- [11] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. Hartree-Fock on a superconducting qubit quantum computer [J]. arXiv preprint arXiv:2004.04174, 2020
- [12] Kohn W. Nobel lecture: Electronic structure of matter—Wave functions and density functionals [J]. Reviews of Modern Physics, 1999, 71(5): 1253-1266
- [13] Li Ying, Benjamin S C. Efficient variational quantum simulator incorporating active error minimization [J]. Physical Review X, 2017, 7(2): 021050
- [14] Temme K, Bravyi S, Gambetta J M. Error mitigation for short-depth quantum circuits [J]. Physical Review Letters, 2017, 119(18): 180509
- [15] Kandala A, Temme K, Córcoles A D, et al. Error mitigation extends the computational reach of a noisy quantum processor [J]. Nature, 2019, 567(7749): 491-495
- [16] Endo S, Benjamin S C, Li Ying. Practical quantum error mitigation for near-future applications [J]. Physical Review X, 2018, 8(3): 031027
- [17] Giurgica-Tiron T, Hindy Y, LaRose R, et al. Digital zero noise extrapolation for quantum error mitigation [C] //Proc of 2020 IEEE Int Conf on Quantum Computing and Engineering (QCE). Piscataway, NJ: IEEE, 2020: 306-316
- [18] Keen T, Maier T, Johnston S, et al. Quantum-classical simulation of two-site dynamical mean-field theory on noisy quantum hardware [J]. Quantum Science and Technology, 2020, 5(3): 035001
- [19] Otten M, Gray S K. Recovering noise-free quantum observables [J]. Physical Review A, 2019, 99(1): 012338
- [20] McClean J R, Kimchi-Schwartz M E, Carter J, et al. Hybrid quantum-classical hierarchy for mitigation of decoherence and determination of excited states [J]. Physical Review A, 2017, 95(4): 042308
- [21] Shen Yangchao, Zhang Xiang, Zhang Shuaining, et al. Quantum implementation of the unitary coupled cluster for simulating molecular electronic structure [J]. Physical Review A, 2017, 95(2): 020501
- [22] Barkoutsos P K, Gonthier J F, Sokolov I, et al. Quantum algorithms for electronic structure calculations: Particle-hole Hamiltonian and optimized wave-function expansions [J]. Physical Review A, 2018, 98(2): 022322
- [23] McArdle S, Yuan Xiao, Benjamin S. Error-mitigated digital quantum simulation [J]. Physical Review Letters, 2019, 122(18): 180501
- [24] Bonet-Monroig X, Sagastizabal R, Singh M, et al. Low-cost error mitigation by symmetry verification [J]. Physical Review A, 2018, 98(6): 062339
- [25] Sagastizabal R, Bonet-Monroig X, Singh M, et al. Experimental error mitigation via symmetry verification in a variational quantum eigensolver [J]. Physical Review A, 2019, 100(1): 010302
- [26] McClean J R, Jiang Zhang, Rubin N C, et al. Decoding quantum errors with subspace expansions [J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 1-9
- [27] Maciejewski F B, Zimborás Z, Oszmaniec M. Mitigation of readout noise in near-term quantum devices by classical post-processing based on detector tomography [J]. Quantum, 2020, 4: 257
- [28] Chen Yanzhu, Farahzad M, Yoo S, et al. Detector tomography on IBM quantum computers and mitigation of an imperfect measurement [J]. Physical Review A, 2019, 100(5): 052315
- [29] Kwon H, Bae J. A hybrid quantum-classical approach to mitigating measurement errors [J]. arXiv preprint arXiv:2003.12314, 2020
- [30] Bravyi S, Sheldon S, Kandala A, et al. Mitigating measurement errors in multi-qubit experiments [J]. arXiv preprint arXiv:2006.14044, 2020
- [31] Rubin N C, Babbush R, McClean J. Application of fermionic marginal constraints to hybrid quantum algorithms [J]. New Journal of Physics, 2018, 20(5): 053020
- [32] Temme K, Bravyi S, Gambetta J M. Error mitigation for short-depth quantum circuits [J]. Physical Review Letters, 2017, 119(18): 180509
- [33] Otten M, Gray S K. Accounting for errors in quantum algorithms via individual error reduction [J]. npj Quantum Information, 2019, 5(1): 1-6
- [34] Czarnik P, Arrasmith A, Coles P J, et al. Error mitigation with Clifford quantum-circuit data [J]. arXiv preprint arXiv:2005.10189, 2020
- [35] Strikis A, Qin Dayue, Chen Yanzhu, et al. Learning-based quantum error mitigation [J]. arXiv preprint arXiv:2005.07601, 2020
- [36] Sun Jinzhao, Yuan Xiao, Tsunoda T, et al. Mitigating realistic noise in practical noisy intermediate-scale quantum devices [J]. Physical Review Applied, 2021, 15(3): 034026
- [37] Cai Zhenyu. Multi-exponential error extrapolation and combining error mitigation techniques for nisq applications [J]. arXiv preprint arXiv:2007.01265, 2020

[38] Cai Zhenyu. Resource estimation for quantum variational simulations of the hubbard model [J]. Physical Review Applied, 2020, 14(1): 014059

[39] Bishop C M. Pattern Recognition and Machine Learning [M]. Berlin: Springer, 2006

[40] Torlai G, Melko R G. Neural decoder for topological codes [J]. Physical Review Letters, 2017, 119(3): 030501

[41] Chamberland C, Ronagh P. Deep neural decoders for near term fault-tolerant experiments [J]. Quantum Science and Technology, 2018, 3(4): 044002

[42] Sweke R, Kesselring M S, van Nieuwenburg E P, et al. Reinforcement learning decoders for fault-tolerant quantum computation [J]. Machine Learning: Science and Technology, 2020, 2(2): 025005



Zhang Yukun, born in 1996. Master. His main research interests include theories, algorithms and techniques for near-term quantum device.

张宇鹏,1996 年生.硕士.主要研究方向为面向近期量子设备的理论、算法和技术.



Yuan Xiao, born in 1990. PhD, assistant professor. His main research interests include quantum information theory and quantum computing.

袁 晓,1990 年生.博士,助理教授.主要研究方向为量子信息理论、量子计算.