

# 基于 MindSpore Quantum 的薛定谔-海森堡变分量子 算法 (SH-VQA) 实现与研究

项目导师: luoml

项目申请人: 顾昀

邮箱: [2530629300tp@gmail.com](mailto:2530629300tp@gmail.com)

## 摘要

**研究背景:** 变分量子算法 (VQA) 作为 NISQ 时代解决量子多体问题的核心工具, 其应用潜力却受到 NISQ 时代量子硬件噪声的根本性制约: 随着算法线路深度的增加, 累积的噪声会严重降低计算结果的可靠性, 从而限制了其求解复杂问题的能力与规模。

**研究目标:** 本项目旨在深入研究并复现一种在特定模型中为解决上述矛盾而提出的新型算法——薛定谔-海森堡变分算法 (SH-VQA)。项目将基于 MindSpore Quantum 框架, 对 SH-VQA 的核心机制进行代码实现与验证, 并将其与其它先进的 VQA 假设 (Ansatz) 进行方法学上的比较进而讨论其适用场景和局限性。

**核心研究内容:** 项目将重点复现原论文 [1] 中的算法能力基准测试 (图 2) 和 XXZ 模型求解 (图 3), 并围绕以下三个核心问题展开: a) 如何将 SH-VQA 的理论流程转化为可执行的代码; b) 如何为给定模型系统性地设计变分 Clifford 线路; c) 探讨该方法的优势, 内在成本, 适用场景和局限性。

## 1 引言与研究动机

### 1.1 量子计算简介

早在 1982 年著名物理学家费曼 (Richard Feynman) 就提出过, 经典计算机在模拟多体量子系统时, 会遭遇一个根本性障碍——指数墙 (Exponential Wall) [2]。由于描述系统所需的资源随粒子数呈指数增长, 精确模拟很快变得不切实际。量子计算通过利用量子比特 (qubit) 及其独特的量子力学特性 (如叠加和纠缠), 提供了一种全新的计算范式。它使我们能够在巨大的希尔伯特状态空间 (Hilbert Space) 中直接进行信息处理, 这不仅为解决量子化学、材料科学和优化等领域的难题提供了颠覆性潜力, 也从根本上绕开了指数墙的限制。而更重要的是我们可以把量子信息中的计算资源 (比如纠缠带来的计算并行性) 利用到其他计算问题上。因此, 理论上, 量子计算机相较于当前使用最强算法的经典计算机, 在一些具体问题上, 有更快的处理速度和更强的处理能力。

自理论提出以来, 量子计算已经从纯粹的理论构想发展为实验科学。研究人员在超导电路 (Superconducting circuits), 俘获离子 (Trapped ions) 等多个物理平台上取得了长足的进步, 成功构建并操控了数十个甚至更多的量子比特。其中, 里程碑式的事件是 Google 在 2019 年首次通过实验展示了量子优越性 (Quantum Supremacy), 其 Sycamore 处理器在极短时间内完

成了一个经典超级计算机需要数千年才能解决的特定计算任务 [3]。尽管这类实验的计算问题本身没有直接的实用价值，但它强有力地证明了量子计算在硬件层面的真实潜力。这些成就标志着我们正处于一个关键的过渡时期——从当前的含噪声中等规模量子（NISQ）时代迈向未来容错量子计算（Fault-tolerant Quantum Computing, FTQC）的前夜 [4]，而充分理解并利用好现有设备是通往未来的必经之路。

## 1.2 NISQ 时代的机遇与挑战

### 1.2.1 挑战

我们目前处于含噪声中等规模量子（Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ）时代 [5]。这个时代的特点是，可用的量子处理器拥有约 50 到几百个量子比特，但它们受到严重的物理限制。量子比特对环境噪声高度敏感，导致计算保真度降低；有限的相干时间限制了可执行的量子操作数量；不完善的比特间连接则约束了量子算法的结构。至关重要的是，这些处理器尚不具备进行量子纠错的能力，因此是容错性低的。这些物理缺陷在强大的理论算法与脆弱的实际应用之间划出了一道鸿沟。

### 1.2.2 机遇

尽管 NISQ 硬件存在诸多限制，但这反而催生了一类专门为其设计的，极具创造性的算法。这类算法的核心思想是规避对长相干时间和完美门操作的苛刻要求，其主流范式是变分量子算法（Variational Quantum Algorithms, VQAs）[6]。VQA 是一种量子-经典混合方法：它利用量子计算机执行一个参数化的，深度较浅的量子线路，得到一些特殊的量子态（Ansatz State），并对结果进行测量；然后将测量值输入经典计算机上的优化器，由优化器根据一定的成本函数来调整量子线路中的参数。这个“制备-测量-优化”的循环不断迭代，直到找到问题的近似解。这种方式将复杂的优化任务交由强大的经典计算机处理，而量子计算机仅负责其最擅长的部分——在希尔伯特空间中制备和演化量子态。这种分工使得 VQA 成为在近期最有希望展示量子优势的应用之一，其成功的例子包括用于量子化学和量子多体问题的变分量子本征求解器（VQE）和用于组合优化的量子近似优化算法（QAOA）。

## 1.3 VQE：当前主流范式及其瓶颈

### 1.3.1 工作原理

变分量子本征求解器（Variational Quantum Eigensolver, VQE）是一种为 NISQ 硬件量身定制的量子-经典混合算法 [7]。其目标是依据瑞利-里兹（Rayleigh-Ritz）变分原理—— $E_0 \leq \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle$ ——找到哈密顿量  $H$  的近似基态能量。这里， $|\psi(\vec{\theta})\rangle$  是由一个含参数  $\vec{\theta}$  的量子电路  $U(\vec{\theta})$  在某个初始态（如  $|0\dots 0\rangle$ ）上演化制备的试验态。VQE 通过一个混合计算循环来迭代地最小化能量期望值  $E(\vec{\theta}) = \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle$ 。

其工作流程如图 [1] 所示，具体算法步骤在算法 [1] 中详细描述。

这种模式将对长相干时间的需求分解为多次短深度的量子电路执行，从而巧妙地适应了 NISQ 硬件的限制。

---

**Algorithm 1** 变分量子本征求解器 (VQE)

---

- 1: **Initialize:** 经典优化器选择一组初始参数  $\vec{\theta}_0$ 。
  - 2: **repeat**
  - 3:   //— 量子模块 —
  - 4:   在量子处理器上, 通过线路  $U(\vec{\theta}_k)$  制备试验态  $|\psi(\vec{\theta}_k)\rangle = U(\vec{\theta}_k)|0\dots 0\rangle$ 。
  - 5:   对于哈密顿量  $H = \sum_i c_i H_i$  中的每一个子项  $H_i$  (泡利串):
  - 6:     多次重复制备与测量, 以估算期望值  $\langle H_i \rangle_k$ 。
  - 7:
  - 8:   //— 经典模块 —
  - 9:   经典计算机收集所有测量结果。
  - 10:   计算总能量期望值:  $E(\vec{\theta}_k) \leftarrow \sum_i c_i \langle H_i \rangle_k$ 。
  - 11:   将  $E(\vec{\theta}_k)$  和  $\vec{\theta}_k$  传入经典优化器, 计算下一组参数:  $\vec{\theta}_{k+1} \leftarrow \text{optimize}(E(\vec{\theta}_k), \vec{\theta}_k)$ 。
  - 12:    $k \leftarrow k + 1$ 。
  - 13: **until** 能量  $E(\vec{\theta})$  收敛
  - 14: **Return:** 最终能量  $E(\vec{\theta}_k)$  和对应的参数  $\vec{\theta}_k$ 。
- 

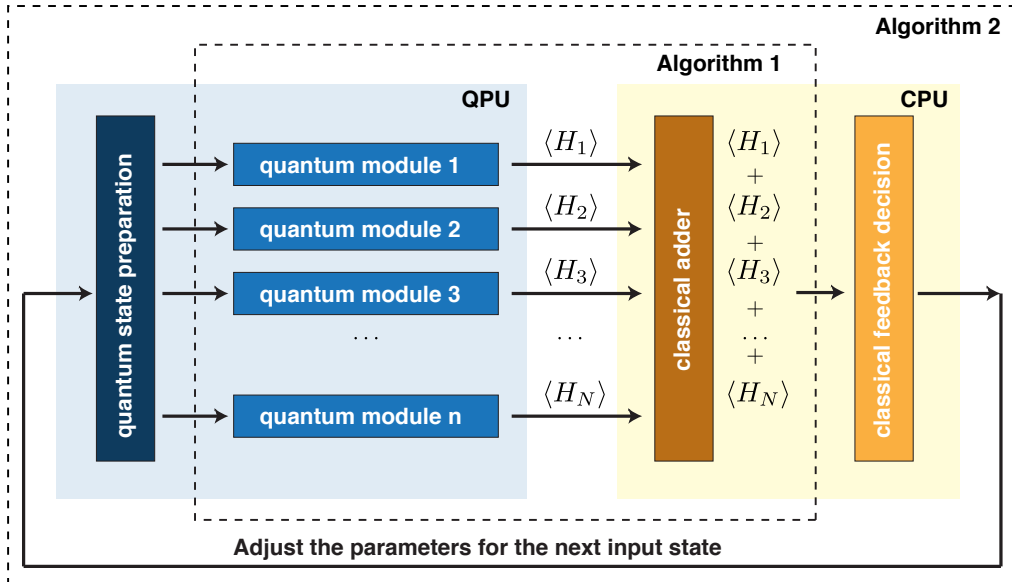


图 1: VQE 算法的混合架构。量子模块负责计算哈密顿量各子项的期望值, 经典 CPU 负责重构总能量并执行优化 [7]。

### 1.3.2 在 NISQ 硬件上的实验进展

自提出以来, VQE 已在超导电路、俘获离子等多种主流 NISQ 硬件平台上得到了广泛的实验验证。早期的里程碑式工作是在超导量子比特上模拟了如氢化锂 (LiH) 和氢化铍 ( $\text{BeH}_2$ ) 等小分子的基态能量, 成功展示了 VQE 的潜力 [8]。近年来, 实验的规模和精度都取得了显著进步。例如, Google 的量子人工智能团队在其 Sycamore 处理器上, 通过一个包含 12 个量子比特的 VQE 实验, 精确模拟了由 12 个轨道构成的氢链 ( $\text{H}_{12}$ ) 的化学键断裂过程, 其结果在与经典精确计算比对时达到了化学精度 [9]。这些前沿实验的成功, 很大程度上依赖于复杂的错误缓解 (error mitigation) 技术的应用, 用以补偿硬件噪声对计算结果的影响。尽管如此, 这些成功的原理性验证也凸显了噪声和系统规模对算法性能的制约, 这正是 VQE 走向实用

化必须解决的核心挑战。

### 1.3.3 瓶颈分析

尽管 VQE 设计巧妙，但其核心拟设 (Ansatz) 面临着一个内在的矛盾：“表达能力” (Expressibility) 与“硬件执行保真度” (Fidelity) 之间的权衡。为了精确求解问题，拟设需要足够强大以表达真实的基态，这通常需要更复杂的电路。然而，在 NISQ 设备上，更深的电路会累积更多噪声，从而降低结果的保真度。无论是旨在精确描述物理系统的问题启发式拟设 (如 Unitary Coupled Cluster, UCC) [10]，还是为最大化硬件性能而设计的硬件效率拟设 (Hardware-Efficient Ansatz, HEA) [8]，都未能完美解决此矛盾。此外，某些高表达能力的拟设还可能导致贫瘠高原 (Barren Plateaus) 问题，即成本函数的梯度在参数空间中消失，使得优化无法进行 [11]。这一根本性瓶颈是阻碍 VQE 走向实用化的关键障碍。

## 1.4 薛定谔-海森堡变分量子算法：一种新思路

面对传统 VQA 在 NISQ 硬件上表达能力 (Expressivity) 与保真度 (Fidelity) 之间的尖锐矛盾，即更深的电路虽能表达更复杂的量子态，但其保真度会因噪声累积而急剧下降，学界亟需一种能够解耦这两个核心要素的新范式。薛定谔-海森堡变分量子算法 (Schrodinger-Heisenberg Variational Quantum Algorithms, SH-VQA) 正是在此背景下被提出的创新框架。

### 1.4.1 核心思想

SH-VQA 的核心思想是将一个深度的、理想的量子线路拆分为两部分。其中，深层且复杂的海森堡线路  $T$  作为“虚拟线路”，不在量子硬件上执行，而是通过高效的经典计算作用于哈密顿量  $H$ ，将其变换为一个等谱但形式更复杂的  $H_T = T^\dagger H T$ 。这一步在经典计算机上无噪声地、极大地增强了算法的整体表达能力。随后，一个参数化的、深度很浅的薛定谔线路  $U(\theta)$  作为“真实线路”，在量子计算机上运行，其任务仅是在高保真度的前提下，寻找变换后哈密顿量  $H_T$  的基态。通过这种方式，SH-VQA 巧妙地将追求高表达能力重任交给了无噪声的经典计算，而将对量子硬件的要求降至执行一个简单的浅层线路，从而打破了“深度 (Depth) - 保真度”取舍的困境。

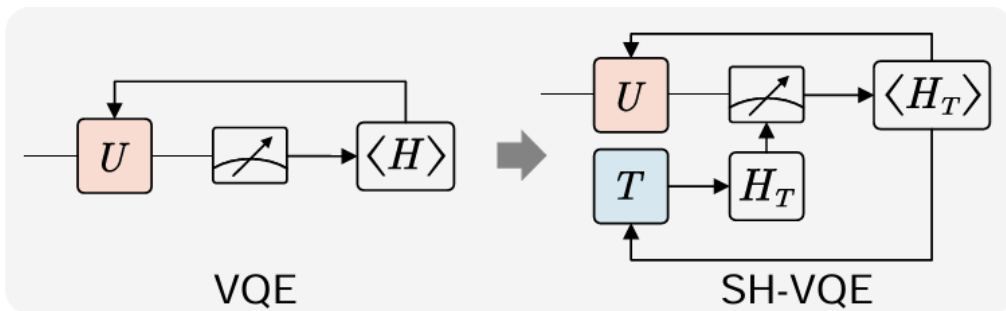


图 2: VQE 与 SH-VQE 的算法结构对比, 在 SH-VQE 中, 变换后的哈密顿量  $H_T$  替代了原有的  $H$ [1]。

### 1.4.2 本项目研究的核心问题

尽管 SH-VQA 在理论上极具吸引力，但其在实践中的有效性和具体性能增益仍需严谨的复现与验证。因此，本项目旨在通过复现原文中的关键实验，系统性地验证 SH-VQA 思路的有效

性，并深入评估其在数值模拟中的性能表现。研究将聚焦于其算法各方面能力的提升和计算资源使用上的妥协（复现原论文 [1] 图 2）和在解决 XXZ 自旋链模型等具体问题时的优势（复现原论文 [1] 图 3）。通过这一过程，我们期望为下一阶段的算法优化、应用探索以及软硬件协同设计，明确关键的技术路径和研究要点。

## 2 薛定谔-海森堡变分算法原理与复现

### 2.1 核心思想与数学框架

SH-VQA 的核心思想是将一个完整的量子演化过程  $TU(\vec{\theta})|0\rangle$  分解为两个部分：

- **薛定谔线路**  $U(\vec{\theta})$ ：这是一个参数化的、结构较浅的量子线路，与传统 VQA 中的线路类似。它在真实的量子计算机上运行，其参数  $\vec{\theta}$  是可优化的。由于线路很浅，它可以在 NISQ 硬件上以较高的保真度执行。
- **海森堡线路**  $T$ ：这是一个理论上可以很深、很复杂的“虚拟”线路。它不在量子计算机上执行，而是作为一个算符作用在待求解问题的哈密顿量  $H$  上。这个变换过程完全在经典计算机上完成，因此是无噪声的。

在标准的 VQE 中 [7]，我们需要最小化能量期望值  $E(\vec{\theta}) = \langle 0|U(\vec{\theta})^\dagger H U(\vec{\theta})|0\rangle$ 。而在 SH-VQA 中，优化的目标函数变为：

$$E(T, U) = \langle 0^{\otimes n}|U^\dagger T^\dagger H T U|0^{\otimes n}\rangle \quad (1)$$

我们可以将  $T^\dagger H T$  定义为一个新的、变换后的哈密顿量  $H_T$ ：

$$H_T = T^\dagger H T \quad (2)$$

于是，目标函数可以写作：

$$E(T, U) = \langle 0^{\otimes n}|U^\dagger H_T U|0^{\otimes n}\rangle \quad (3)$$

从数学上看， $H_T$  与原始的  $H$  具有完全相同的能谱。但是，通过精心设计一个强大的虚拟线路  $T$ ，我们可以将一个难以用浅层线路  $U$  制备的基态所对应的哈密顿量  $H$ ，变换为一个其基态可以用浅层线路  $U$  轻松制备的哈密顿量  $H_T$ 。

这样一来，SH-VQA 就打破了“深度-保真度”的矛盾。系统的总表达能力由  $T$  和  $U$  共同决定，能够探索比单独的  $U$  广阔得多的希尔伯特空间。而量子计算机只需负责执行浅层线路  $U$  并测量  $H_T$  的期望值，从而保证了高保真度。原文的数值实验表明 [1]，SH-VQA 可以用仅 4 个深度的薛定谔线路，达到传统 VQE 需要 40 个深度才能实现的表达能力，同时对硬件的保真度要求降低了近两个数量级。

### 2.2 复现的算法流程详解

复现 SH-VQA 算法，尤其是针对 XXZ 自旋链模型的求解过程，可以分解为一个经典的量子-经典混合（hybrid quantum-classical）优化循环，具体算法步骤在算法 [2] 中详细描述。

### 2.3 Clifford 电路

在 SH-VQA 框架中，对虚拟海森堡线路  $T$  的选择至关重要。它既要足够强大以提供显著的表达能力增益，又要保证  $H_T = T^\dagger H T$  的经典计算和后续测量是可行的。Clifford 电路是实现

---

**Algorithm 2** 薛定谔-海森堡变分量子算法 (SH-VQA)

---

```
1: Initialize: 经典优化器选择一组初始参数  $(\vec{\theta}_0, \vec{\phi}_0, \vec{\alpha}_0)$ 。
2: repeat
3:   //— 经典预处理模块 —
4:   在经典计算机上, 根据当前海森堡线路  $T_k = T(\vec{\alpha}_k, \vec{\phi}_k)$  计算变换后的哈密顿量:
       
$$H_{T_k} \leftarrow T_k^\dagger H T_k = \sum_j c_j P'_j。$$

5:
6:   //— 量子模块 —
7:   在量子处理器上, 通过浅层线路  $U(\vec{\theta}_k)$  制备试验态  $|\psi(\vec{\theta}_k)\rangle = U(\vec{\theta}_k)|0\dots 0\rangle$ 。
8:   对于变换后的哈密顿量  $H_{T_k}$  中的每一个子项  $P'_j$ :
9:     多次重复制备与测量, 以估算期望值  $\langle P'_j \rangle_k$ 。
10:
11:   //— 经典优化模块 —
12:   经典计算机收集所有测量结果。
13:   计算总能量期望值:  $E_k \leftarrow \sum_j c_j \langle P'_j \rangle_k$ 。
14:   将  $E_k$  和  $(\vec{\theta}_k, \vec{\phi}_k, \vec{\alpha}_k)$  传入经典优化器, 计算下一组参数:
       
$$(\vec{\theta}_{k+1}, \vec{\phi}_{k+1}, \vec{\alpha}_{k+1}) \leftarrow \text{optimize}(E_k, \vec{\theta}_k, \vec{\phi}_k, \vec{\alpha}_k)。$$

15:    $k \leftarrow k + 1$ 。
16: until 能量  $E$  收敛
17: Return: 最终能量  $E_k$  和对应的参数  $(\vec{\theta}_k, \vec{\phi}_k, \vec{\alpha}_k)$ 。
```

---

这一平衡的理想选择。

Clifford 电路是由一系列选自特定集合（如 Hadamard 门、S 门和 CNOT 门）的门构成的量子线路。其最关键的性质是，Clifford 电路总是将泡利群的元素映射回泡利群（Pauli Group）自身（最多引入一个相位因子）。这意味着，如果原始哈密顿量的一个泡利项是  $P_i$ ，经过一个 Clifford 线路  $T_c$  变换后， $T_c^\dagger P_i T_c$  仍然是一个单独的泡利项  $P'_i$ 。因此，Clifford 电路不会增加哈密顿量中的项数，从而有效控制了测量开销的增长。

此外，根据 Gottesman-Knill 定理 [12]，一个由 Clifford 门组成的量子线路作用在泡利算符上的效果，可以在经典计算机上被高效地模拟出来。这保证了经典预处理步骤（计算  $H_T$ ）的计算复杂度是多项式级别的，而不是指数级的。

为了在离散的 Clifford 门基础上引入连续可优化的参数，原文提出的  $T$  电路由两部分组成：一个纯 Clifford 电路（负责构建长程、非局域的纠缠结构）和一个单比特门层（负责引入连续参数  $\vec{\phi}$ ）。这种混合结构在增强表达能力和控制计算成本之间取得了绝佳的平衡（trade-off）。

### 3 Heisenberg 电路 $T$ 的 Clifford 电路设计

#### 3.1 优化 Clifford 电路

在 SH-VQA 框架中，最终的量子态由  $TU|0^{\otimes n}\rangle$  给出，其中  $U$  是在真实量子硬件上运行的浅层薛定谔线路，而  $T$  是一个在经典计算机上模拟、作用于哈密顿量上的虚拟海森堡线路。 $T$  线路的设计至关重要，它直接决定了算法能否在不增加真实线路深度的情况下，有效拓展可

探索的希尔伯特空间范围，从而找到比传统 VQE 更优的解。

一个精心设计的  $T$  线路是性能提升的关键。论文 [1] 中图 3 (c) 的数值实验中明确展示了这一点：当为 8 量子比特 XXZ 模型选择了最优的“全连接图”作为  $T$  的 Clifford 部分时（其求解精度远超没有  $T$  线路的传统 VQE（图 [3c]）；然而，若选择不合适的  $T$  线路，其性能甚至可能劣于传统 VQE。这说明， $T$  的引入是一把双刃剑，其结构必须与具体问题相匹配。

然而，设计最优的  $T$  线路面临着巨大挑战。 $T$  线路主要由 Clifford 电路构成。对于  $n$  个量子比特，Clifford 群的大小是超指数增长的，这意味着可能的 Clifford 电路结构空间极其庞大，进行暴力搜索或随机选取是完全不可行的。因此，必须发展出一套高效的策略来约束搜索空间，并系统地找到近似最优的  $T$  线路结构。

### 3.2 基于问题对称性的搜索空间约减：以 XXZ 模型为例

为了解决上述挑战，论文针对具体问题提出了一种“因题制宜”的搜索空间约减策略。在求解 XXZ 自旋链模型（哈密顿量  $H$  参见(4)）时，该策略的核心思想是**利用哈密顿量自身的对称性来指导和约束  $T$  线路中 Clifford 部分的结构**。该哈密顿量具有周期性边界条件下的平移不变性 (Translational Invariant, TI)。据此，作者推断最优的  $T$  线路很可能也具备相似的对称性，从而将搜索范围从整个 Clifford 群大幅缩减至一个具备平移不变性的子集。

$$H_{XXZ} = \sum_{i=1}^n \left( \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right) \quad (4)$$

这种方法的具体实现细节如下：

#### 3.2.1 步骤一：将 Clifford 电路约束为图电路 (Graph Circuits)

第一步简化是将任意的 Clifford 线路约束为一种更具体的结构——图电路。图电路仅由一系列可以相互对易的 CZ (Controlled-Z) 门构成。这不仅简化了线路的表示和经典模拟，也为利用图论工具进行结构设计提供了便利。

#### 3.2.2 步骤二：定义具备平移不变性的“基本图” (Elementary Graphs)

这是最关键的一步。为了在图电路中系统地构建平移不变性，作者定义了一组“基本图”。对于一个  $n$  量子比特的系统，可以定义  $\lfloor n/2 \rfloor$  个基本图。

**第  $j$  个基本图 ( $j = 1, 2, \dots, \lfloor n/2 \rfloor$ ) 的定义是：**在代表  $n$  个量子比特的  $n$  个节点中，将每个节点  $i$  与节点  $(i + j) \pmod{n}$  相连接。这里的连接代表一个 CZ 门作用于对应的两个量子比特上。

以论文中图 [3a] 所示的  $n = 8$  的情况为例，共有  $\lfloor 8/2 \rfloor = 4$  个基本图：

- **j=1 (最近邻)**: 连接  $(i, i + 1)$ ，构成一个环。
- **j=2 (次近邻)**: 连接  $(i, i + 2)$ ，构成两个独立的 4 比特环。
- **j=3 (次次近邻)**: 连接  $(i, i + 3)$ 。
- **j=4 (对角)**: 连接  $(i, i + 4)$ ，构成 4 对对角连接。

每个基本图本身都是一个具有平移不变性的图电路。

### 3.2.3 步骤三：组合基本图生成候选线路池

通过“开启”或“关闭”这些基本图的任意组合，就可以生成一个庞大的、但所有成员都具有平移不变性的图电路候选池。对于  $n$  比特系统，由于有  $\lfloor n/2 \rfloor$  个基本图，每个都可以独立地选择开启或关闭，因此候选池的大小为  $2^{\lfloor n/2 \rfloor}$ 。

作者使用一个长度为  $\lfloor n/2 \rfloor$  的二进制字符串来标记每一种可能的组合模式。例如，对于  $n = 8$  的情况，一个 4 位的二进制串如 ‘1010’ 就代表了一个具体的 Clifford 线路结构：开启  $j = 1$  和  $j = 3$  的基本图，关闭  $j = 2$  和  $j = 4$  的基本图。根据论文的实验结果（如图 3(b) 和 3(c) 所示），‘1111’ 代表所有基本图全部开启，构成了“全连接图”，而 ‘0000’ 则代表所有基本图全部关闭，即  $T$  的 Clifford 部分为单位矩阵，算法退化为传统 VQE。

通过这种方式，针对 8 比特 XXZ 模型的  $T$  线路搜索问题，其结构搜索空间被成功地从天文数字般的 Clifford 群大小，缩减到了仅仅  $2^4 = 16$  种具备特定对称性的候选结构。这是一个巨大的、决定性的简化。

### 3.3 概率化架构搜索

尽管搜索空间已被大幅缩减，但对于更大规模的问题（例如  $n = 30$  时有  $2^{15}$  种候选），逐一测试仍然不可行。为此，论文借鉴了可微分神经架构搜索 (Differentiable Neural Architecture Search, NAS) [13] 的思想，采用了一种概率化的方法来自动且高效地搜索出最优的线路结构。具体算法步骤在算法 [3] 中详细描述，显示不同的连接方式在用于 SH-VQE 的概率化架构搜索 (Probabilistic Architecture Search for SH-VQE) 下的结果图 [3b]。

### 3.4 SH-VQA 算法 Clifford 电路构造的整体思路

简言之，我们的方法可概括为两步：首先，利用 XXZ 哈密顿量的平移对称性，将原本含  $n(n-1)/2$  条 CZ 连边的巨大 Clifford 结构空间，压缩为仅由  $\lfloor n/2 \rfloor$  条“距离- $j$ ”基本图组合而成的对称子空间，使搜索规模从  $2^{n(n-1)/2}$  降至  $2^{\lfloor n/2 \rfloor}$ （例如  $n = 16$  时仅剩 256 种候选图）；随后，在这一大幅精简的空间内应用概率化 / 可微架构搜索 (PAS)：为每个基本图分配可训练 logits 向量  $\vec{\alpha}$ ，经  $\text{softmax}(\vec{\alpha})$  转化为开/关概率，在训练循环中按该分布采样 Clifford 图电路，与连续门参数  $\vec{\theta}, \vec{\phi}$  共同评估能量，并用 Adam-SPSA 同步更新  $\vec{\alpha}, \vec{\theta}, \vec{\phi}$ 。随着迭代推进，概率自然塌缩到 0/1，最终自动选出确定性的最优 Clifford 结构（8 比特示例收敛为“1111”全连接图），SH-VQA 算法的巨大能力在图 [3d] 的比较中充分展现了出来。

---

**Algorithm 3** 用于 SH-VQE 的概率化架构搜索 (Probabilistic Architecture Search for SH-VQE)

---

1: **Initialize:**

选择经典优化器 (如 Adam-SPSA), 以及三组初始参数:

薛定谔线路  $U$  的参数  $\vec{\theta}_0$

海森堡线路  $T$  单比特门参数  $\vec{\phi}_0$

Clifford 架构选择概率参数  $\vec{\alpha}_0$  (如均匀分布)

设置每次迭代的采样数  $N_{samples}$

2:  $k \leftarrow 0$

3: **repeat**

4: //— 采样与量子评估模块 —

5: 初始化累计能量  $C_k \leftarrow 0$

6: **for**  $i \leftarrow 1$  **to**  $N_{samples}$  **do**

7: 根据  $\vec{\alpha}_k$  采样 Clifford 图形  $T_i$

8: 计算变换后哈密顿量  $H_{T_i} \leftarrow T_i^\dagger H T_i$

9: 在量子处理器上估算

$$E_i \leftarrow \langle 0|U^\dagger(\vec{\theta}_k)H_{T_i}U(\vec{\theta}_k)|0\rangle$$

10:  $C_k \leftarrow C_k + E_i$

11: **end for**

12: 计算平均能量  $C_k \leftarrow C_k/N_{samples}$

13: //— 经典更新模块 —

14:  $(\vec{\theta}_{k+1}, \vec{\phi}_{k+1}, \vec{\alpha}_{k+1}) \leftarrow \text{optimize}(C_k, \vec{\theta}_k, \vec{\phi}_k, \vec{\alpha}_k)$

15:  $k \leftarrow k + 1$

16: **until** 平均能量  $C_k$  收敛

17: **Return** 最优能量  $C_k$  及参数  $(\vec{\theta}_k, \vec{\phi}_k, \vec{\alpha}_k)$

---

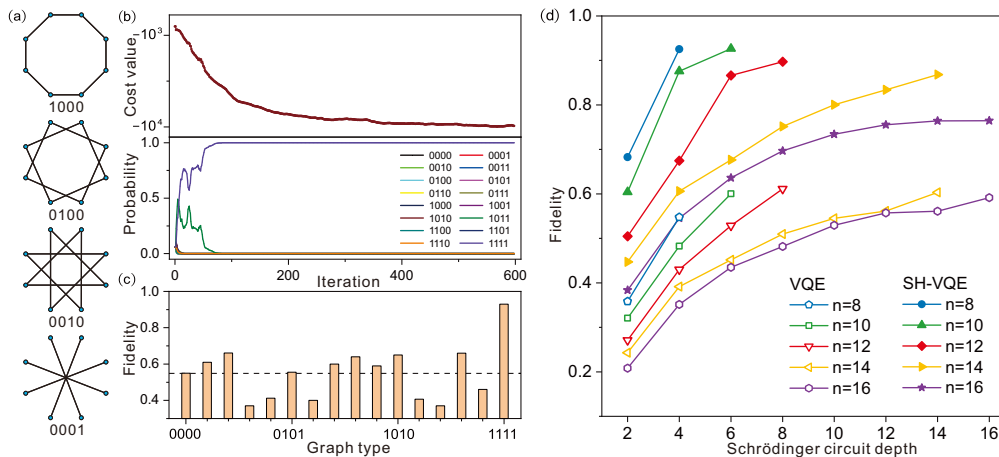


图 3: 论文 [1] 中的图三, 也是我们复现的目标。

## 4 算法能力比较

在评估变分量子算法时, 仅报告最终能量或保真度往往不足以揭示算法的根本优势。本章从五个互补维度出发, 对 SH-VQE 与传统 VQE 的能力进行系统刻画, 并说明为何必须引入这些度量。

## 4.1 表达能力 (Expressivity)

量子线路的表达能力决定了其可生成状态集在希尔伯特空间中的“覆盖率” (图 [4a])。若表达能力不足，再精细的优化也难以逼近目标态。文中采用  $t$ -design 框架来量化表达能力，并定义

$$\Delta_t = \log\left(E_{\text{Haar}}[\text{Tr}(\rho_{n/2}^t)]\right) - \log\left(E_{\text{SH}}[\text{Tr}(\rho_{n/2}^t)]\right), \quad (5)$$

其中  $E_{\text{Haar}}$  和  $E_{\text{SH}}$  分别表示对 Haar 随机态与 SH-VQE 输出态的平均。 $\Delta_t \rightarrow 0$  意味着电路族已形成  $t$ -design——即在前  $t$  阶矩上与 Haar 分布等价。选择该指标的原因在于：(i) 它与线路深度存在已知下界，可直接反映硬件资源需求；(ii)  $t$ -design 还与纠缠熵、随机化 Benchmarking 等多种性能度量相联系，因而具有统一性。图 [4b] 对比了两种算法在不同深度下  $\Delta_t$  的收敛行为。

## 4.2 深度与门保真度需求

在 NISQ 时代，量子线路深度与门保真度是实验可行性的硬约束。衡量“用多浅的量子线路就能实现给定表达能力”有助于明确硬件门数与误差阈值的减负效益。通过将“达到同阶  $t$ -design”所需的 VQE 等效深度与 SH-VQE 实际深度做映射，并据此换算出对两比特门保真度的要求差异，可以展示该度量在实验规划中的直接价值。

## 4.3 总体资源成本 (Shots & Classical Overhead)

算法的优越性若建立在指数级测量或经典后处理之上，就失去了 NISQ 场景的意义。因此需要评估引入虚拟 Heisenberg 层后样本数与经典计算的可控性。文中推导了公式

$$N_2 \approx m_h N_1, \quad (6)$$

其中  $N_1$  为原 Hamiltonian 的测量次数， $m_h$  为单 Pauli 项经 Clifford 变换后得到的子项数。由于  $m_h$  在  $k$ -weight Hamiltonian 场景下仅呈多项式增长，该指标说明 SH-VQE 在测量与经典侧仍然保持可扩展性。

## 4.4 可训练性 (Trainability)

高表达能力可能导致梯度消失现象 (barren plateau)。评估可训练性能够保证算法不仅“能表示”，且“能被找到”。通过分析表达能力与梯度方差之间的反比关系，引入受限 Clifford 池、交替优化等策略来维持梯度规模，并在 XXZ 链与分子基态复现中验证了这一点。可训练性度量的必要性在于：若无此检验，提升表达力的收益可能被优化难度完全抵消。

## 4.5 测量成本

测量成本单独列出，是因为在变分算法中它往往是实验耗时最长的环节。公式 (6) 给出了 Clifford 变换对测量次数的放大因子，揭示了在保证总体可测性的前提下设计 Heisenberg 层结构的重要性。结合门深-保真度换算可以进一步说明：即便测次增加，整体实验壁垒依旧显著下降。

综上，通过引入以上五个维度的能力指标，并在图 [4] 中给出对应对比，我们不仅展示了 SH-VQE 的性能，也为后续实验设计和算法改进提供了可量化，可追踪的评估框架。

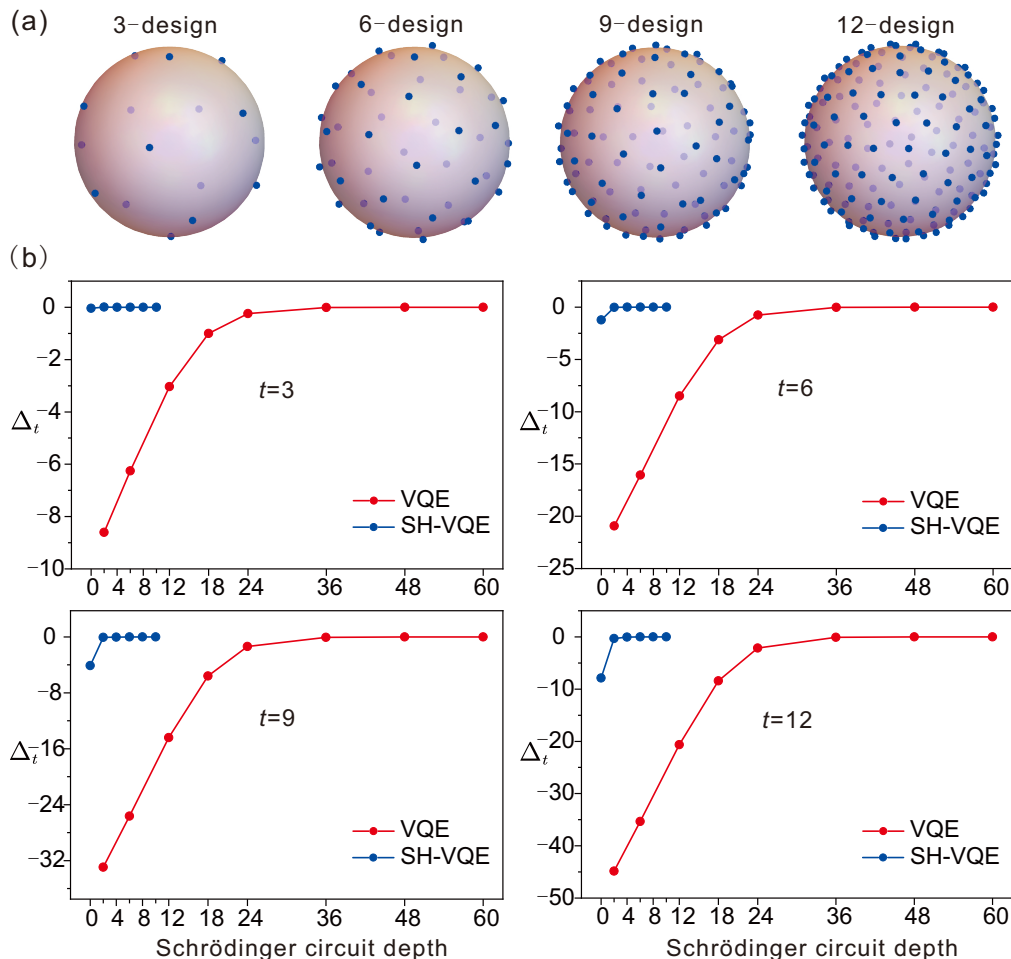


图 4: 论文 [1] 中的图二, 也是我们复现的目标。

## 5 复现计划与关键技术验证

### 5.1 实验环境与框架

**软件环境:** 核心框架为 MindSpore Quantum 0.10.0, 编程语言为 Python 3.10。

**核心模块应用:** 本项目将重点利用 MindSpore Quantum 的以下关键模块来实现 SH-VQA 算法流程:

- **核心层与模拟器 (mindquantum/core, mindquantum/simulator):** 用于灵活构建、操控及模拟参数化量子电路  $U(\theta)$  与变换算符  $T$ 。
- **NISQ 算法层 (mindquantum/algorithm/nisq, mindquantum/algorithm/nisq/chem/):** 调用此模块中预置的 VQE 等算法组件, 并将其与自定义的 SH-VQA 逻辑相结合, 搭建完整的算法工作流。

### 5.2 图 2 复现: 线路表达能力分析

#### 5.2.1 核心验证目标

验证 SH-VQA 是否能够利用较浅的量子线路, 达到与标准深层 VQE 相媲美的线路表达能力。

## 5.2.2 技术实现路径

关键步骤在于构建所需的随机酉算符。具体实现包括：

- 采用 MindSpore Quantum 构建代表参数化拟设 (Ansatz) 的随机量子线路  $U$ 。
- 构建用于增强哈密顿量的变换线路  $T$ 。
- 实现用于衡量线路表达能力的 t-design 度量  $\Delta_t$  的计算。

## 5.2.3 预期复现结果与分析

绘制  $\Delta_t$  指标随线路深度变化的曲线，并将其与原论文图 2 进行精确比对。通过对比分析，定量验证 SH-VQA 在以更少量子门资源实现高表达能力方面的优势。

## 5.3 图 3 复现：求解 XXZ 物理模型

### 5.3.1 核心验证目标

1. 定量评估 SH-VQA 在求解具体物理模型 (XXZ 海森堡链) 时，相较于传统 VQE 的性能优势。
2. 考察 SH-VQA 优化过程的收敛性与稳定性。

### 5.3.2 技术实现路径

算法核心在于哈密顿量的构建与协同优化策略的实现：

- 在 MindSpore Quantum 框架内，根据物理定义精确构建 XXZ 模型的哈密顿量。
- 实现对变换算符  $T$  的概率化搜索机制。
- 建立  $T$  的搜索与参数化线路  $U(\theta)$  的梯度优化之间的协同迭代流程。

### 5.3.3 预期复现结果与分析

1. **收敛性分析：**复现并展示能量期望值与变换算符  $T$  的概率分布随优化迭代次数演化的收敛曲线 (对应原图 3b)，以评估优化稳定性。
2. **性能对比：**复现并展示算法最终求解的基态保真度随系统比特数增加的变化趋势 (对应原图 3d)，并与传统 VQE 的结果进行直接比较，从而量化分析 SH-VQA 的性能提升幅度。

## 6 局限性探讨与方法学比较

### 6.1 SH-VQA 的内在成本与局限性

#### 6.1.1 关键资源开销评估

对 SH-VQA 在实际应用中可能面临的资源瓶颈进行前瞻性评估：

- **测量开销：**重点分析变换后的哈密顿量  $H_T$  中泡利算符项数的增长趋势，及其对量子测量总次数带来的影响。

- **经典计算开销:** 评估搜索最优变换  $T$  以及执行哈密顿量变换  $H \rightarrow H_T$  这两个经典计算步骤的复杂度。
- **算法可训练性:** 探讨对  $T$  的选择与设计是否可能引入新的优化难题, 例如贫瘠高原 (barren plateaus) 或局部极小值陷阱。

### 6.1.2 模型适用性的探讨

超越 XXZ 这一具有高度对称性的特定模型, 探讨 SH-VQA 的普适性。核心问题是: 当应用于对称性较弱或结构不明显的物理模型时, SH-VQA 的有效性如何? 旨在探索其适用边界, 并尝试归纳出更具一般性的结论。

## 6.2 横向比较: 与其他先进拟设的关联与区别

### 6.2.1 核心比较框架

SH-VQA 并非孤立的技术, 而是“VQE 增强”这一研究范式下的代表性方法。通过方法学的比较, 明晰其在现有量子算法谱系中的定位、创新点与相对优劣。

### 6.2.2 与自适应拟设 (例如 ADAPT-VQE [14]) 的深度对比

将 SH-VQA 与另一主流的 VQE 改进策略——自适应拟设 (如 ADAPT-VQE) 进行深入比较:

- **构建方法论对比:** 分析两者根本性的设计差异。ADAPT-VQE 采用“由底向上”的策略, 逐步增长线路深度; 而 SH-VQA 则是“由顶向下”的思路, 通过变换哈密顿量来增强固定深度的线路。
- **成本与性能权衡:** 系统性地比较这两种方法在关键资源 (如经典计算时间、量子门数量、测量次数) 上的开销, 并探讨不同策略在何种场景下可能更具优势。

## 7 项目开发时间计划及预期结果

### 7.1 项目开发时间计划

整个项目的周期为 3 个月, 折合约 13 周, 我的研究计划参见下表

表 1: 项目时间规划表

阶段 (时间)	主要任务与目标
第一周	文献精读与技术调研: 深入理解 SH-VQA 原文及相关工作; 搭建 MindSpore Quantum 开发环境。利用 Deepwiki 辅助学习 MindSpore Quantum 代码库
第二周 – 第四周	核心算法模块实现: 完成 $H_T$ 变换、概率化 Clifford 线路构建等核心函数。
第五周 – 第七周	复现图 2 (算法能力): 搭建基准测试流程, 生成 $\Delta_t$ 曲线, 与原文结果进行对比分析。
第八周 – 第九周	复现图 3 (XXZ 模型的 Clifford 电路设计): 实现完整的 SH-VQA 优化循环, 求解 XXZ 模型, 复现收敛与保真度曲线。
第十一周 – 第十二周	方法学比较与分析: 开展与 ADAPT-VQE 等方法的对比实验与理论分析, 评估 SH-VQA 的优缺点, 讨论其局限性, 思考能否开发新的算法。
第十三周	总结与文档撰写: 整理所有代码与实验结果, 撰写详细的研究报告和开源代码文档。

## 7.2 预期产出

- 使用 MindSpore Quantum 0.10.0 复现论文中 [1] 的图 2 和图 3。将复现的成果合并到代码库。
- 一份包含所有复现结果和方法学分析的详细规范的技术报告。
- 基于 [1] 进一步探索 SH-VQA 算法, 提出进一步的研究计划。

## 参考文献

- [1] Zhong-Xia Shang et al. “Schrödinger-Heisenberg Variational Quantum Algorithms”. In: *Physical Review Letters* 131.6 (Aug. 2023), p. 060406. DOI: [10.1103/PhysRevLett.131.060406](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.131.060406).
- [2] R. P. Feynman. “Simulating physics with computers”. In: *International Journal of Theoretical Physics* 21.6-7 (1982), pp. 467–488.
- [3] Frank Arute et al. “Quantum supremacy using a programmable superconducting processor”. In: *Nature* 574.7779 (2019), pp. 505–510.
- [4] John Preskill. *Beyond NISQ: The Megaquop Machine*. Presentation at the Q2B 2024 Conference. Accessed on June 15, 2025. Feb. 2024. URL: <https://www.preskill.caltech.edu/talks/Preskill-Q2B-2024.pdf>.
- [5] John Preskill. “Quantum Computing in the NISQ era and beyond”. In: *Quantum* 2 (2018), p. 79. DOI: [10.22331/q-2018-08-06-79](https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79). arXiv: [1801.00862](https://arxiv.org/abs/1801.00862).
- [6] M. Cerezo et al. “Variational Quantum Algorithms”. In: *Nature Reviews Physics* 3.9 (2021), pp. 625–644.

- [7] Alberto Peruzzo et al. “A variational eigenvalue solver on a quantum processor”. In: *Nature Communications* 5.1 (2014), p. 4213. DOI: [10.1038/ncomms5213](https://doi.org/10.1038/ncomms5213).
- [8] Abhinav Kandala et al. “Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets”. In: *Nature* 549.7671 (2017), pp. 242–246. DOI: [10.1038/nature23879](https://doi.org/10.1038/nature23879).
- [9] Google AI Quantum and Collaborators. “Hartree-Fock on a superconducting qubit quantum computer”. In: *Science* 369.6507 (2020), pp. 1084–1089. DOI: [10.1126/science.abb9811](https://doi.org/10.1126/science.abb9811).
- [10] Abhishek Anand et al. *A review of the unitary coupled cluster ansatz*. 2022. arXiv: [2109.15176](https://arxiv.org/abs/2109.15176) [quant-ph].
- [11] Jarrod R. McClean et al. “Barren plateaus in quantum neural network training landscapes”. In: *Nature Communications* 9.1 (2018), p. 4812. DOI: [10.1038/s41467-018-07090-4](https://doi.org/10.1038/s41467-018-07090-4).
- [12] Daniel Gottesman. *The Heisenberg Representation of Quantum Computers*. 1998. arXiv: [quant-ph/9807006](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9807006) [quant-ph].
- [13] Shuize Zhang et al. “Differentiable quantum architecture search”. In: *2020 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)*. IEEE. 2020, pp. 257–265.
- [14] Harper R. Grimsley et al. “An adaptive variational algorithm for exact molecular simulations on a quantum computer”. In: *Nature Communications* 10.1 (July 2019), p. 3007. DOI: [10.1038/s41467-019-10988-2](https://doi.org/10.1038/s41467-019-10988-2). arXiv: [1812.11173](https://arxiv.org/abs/1812.11173) [quant-ph].