

# 云量子计算求解原子核问题

(中国原子能科学研究院 周书华 编译自 Stefano Gandolfi, *Physics*, May 23, 2018)

虽然几十年前就提出了量子计算的概念,但量子计算机技术在过去几年才实现。已有几个公司如 IBM, Google 和 Rigetti 可提供云量子计算。这些公司的量子芯片与互联网相连。用户只需将程序代码发送到其中一个提供量子计算的设备,计算结果便会返回给用户。橡树岭国家实验室的 Eugene Dumitrescu 及其合作者通过云服务器,使用量子计算机进行了氙核结合能的计算。这是首次用量子计算机进行关于原子核的计算。

量子计算机对量子比特(量子位)进行操控,量子位可以是比特态 0 和 1 的任意叠加。量子位可同时处于两种态中,因此比经典比特携带有更多的信息。如果有  $N$  个经典比特,那么这  $N$  个比特将处于  $2^N$  个可能状态之一,而  $N$  个量子位可以同时代表所有可能的状态。量子计算机的能力来自它们产生大量叠加态、纠缠和相干的能力,所有这些特性是传统计算机所不具备的。两

者在计算速度上有非常大的差别。对某一问题所需计算时间,在传统计算机上随计算数量的增加按指数函数增加,预计在量子计算机上按多项式函数增加。

目前已有将经典比特与几十个量子位组合的量子计算机。有些量子位由原子的自旋向上或向下来代表,有些由超导电路的两个激发态来代表。

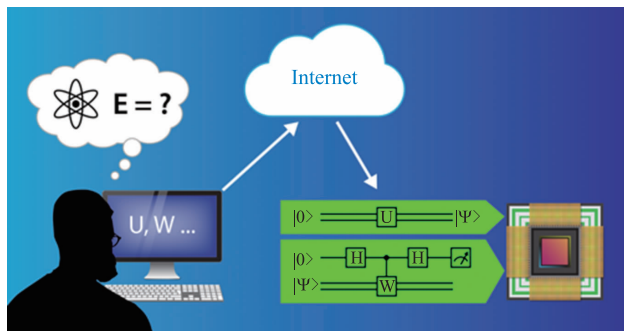
为使用这些设备,研究人员必须熟悉量子计算机“语言”。通常使用量子计算机解题要经过几个步骤:(1)将要求解的问题用酉矩阵来表示;(2)按照量子计算机上的门(gate)来重写那些矩阵;(3)提高步骤(2)的效率,尽量减少门的数量。

在量子计算机中的门指的是对量子位的一种操作,并且总是由酉矩阵来表示的。如果我们考虑的量子位态是自旋,那么酉算符就是该自旋的转动。例如,假定要求出某特定态  $|\Psi\rangle$  的能量,为构建这个态,建立一个酉矩阵  $U$ ,作用在其

辅助量子位进行测量。这种测量只是在各种可能性中取样其中一种结果。因此必须多次重复测量,取平均值。在本情况下,最终结果与预期值  $\langle W \rangle$  相关。 $\langle W \rangle$  可以转换成平均能量。

Dumitrescu 等使用了两台云量子计算系统: IBM QX5 量子芯和 Rigetti 19Q 量子芯,计算氙核的结合能。他们首先建立一个基态波函数。其中有 1 或 2 个参数,用各组参数计算能量并选择给出最低能量的那组参数。研究人员先进行了 2-量子位的计算。他们发现从 IBM 芯片和 Rigetti 芯片得到的结果是一致的。他们还单用 IBM 芯片进行了 3-量子位的计算。当把结果外推到无限多基的极限时,计算出的氙核的结合能与用解析法精确计算的结果符合得非常好。

目前,量子计算机的量子位数量和可供使用的门是很有限的。此外,对量子位操作不是件容易的事。例如,代表量子位态的原子自旋会受环境的影响,因此量子位的操作会受噪声干扰,这种噪声随着用于量子位的门的数量的增加而增加。然而,尽管有这样的限制,研究人员对量子计算的兴致仍然非常高,可用的量子硬件的数量也增加得很快。这为探索解决量子多体问题的新方法,提供了更多的机会。研究人员已经开始考虑如何用量子计算解决如散射动力学和确定核基态等问题。



在云量子计算中,用户选定一个问题,如按照酉矩阵  $U$ ,  $W$  等求出原子核的结合能,需将这些矩阵转换成门的操作,再将这些指令通过互联网传送到由量子芯片组成的计算设备上