arXiv:2303.03268v1 [quant-ph] 6 Mar 2023

通过模拟非马尔可夫动力学实现单量子比特误差缓解

Mirko Rossini、Dominik Maile、Joachim Ankerhold 和 Brecht I. C Donvil*

Institute for Complex Quantum Systems and IQST,Ulm University - Albert-Einstein-Allee 11, D-89069 Ulm, Germany

量子模拟是研究量子系统性质的有力工具。开放量子系统的动力学通常由完全正映射描述，已有多种量子模拟方案可用于此类映射。我们提出了一种模拟开放量子比特动力学的方案，该动力学由一类更广泛的映射描述：一般动力学映射。这类映射是线性的、保持厄米性且迹保持，但不一定保持正性。后者表明其背后存在一种系统-储库模型，其中系统与储库彼此纠缠，因此会产生非马尔可夫量子比特动力学。这类映射也可以作为完全正映射的逆映射出现。我们在 IBM 量子处理器上演示了该模拟方案，展示了如何恢复 Lindblad 演化的初始态。这为一种新型量子误差缓解方法铺平了道路。我们的方案只需额外使用一个辅助量子比特，并使用少量单量子比特门和双量子比特门。

PACS 分类号：03.65.Yz, 42.50.Lc

引言.-量子计算开创了一种计算范式，有望推动开发出用于解决计算任务的新型强大方案。数字量子计算机的一项重要应用，是能够模拟其他量子系统；这一能力在含噪中等规模（NISQ）量子平台上已初露端倪 [1]。

尽管目前已有多种用于封闭量子系统的量子模拟方法（例如参见[2–5], ），但模拟开放量子系统要困难得多。由于通常无法模拟系统与环境的完整动力学，模拟方法主要致力于实现开放量子系统的约化有效动力学。

为了寻找开放量子系统演化的约化描述，通常假设系统与环境初始时处于乘积态。在这种情况下，演化必然可由作用于初始系统态的完全正（CP）映射描述 [6]；该映射可通过数值方法（例如 [7–11]）或微扰方案 [12] 获得。如果一个 CP 映射可以分解为任意多个小部分，且这些部分本身都是 CP 映射，则称其为 CP可分。

在这种情况下，系统的演化可由 Lindblad-Gorini-Kossakowski-Sudarshan 方程 [13, 14]描述。当系统与环境之间积累了大量纠缠时，使用完全正映射便不再有意义 [15]。

Lindblad 类动力学的量子模拟方法已得到广泛研究 [16–21]，并已通过实验实现 [22]。最近，[23] 的作者利用误差缓解，在 IBM 量子处理器上模拟了 Lindblad 动力学。 [24], 基于 [25, 26]的结果，开发了一种适用于任意完全正量子比特映射的高效模拟方案。[24] 提出的方案使用一个辅助量子比特、单量子比特旋转和 CNOT 门，并已在超导电路上通过实验实现 [27]。

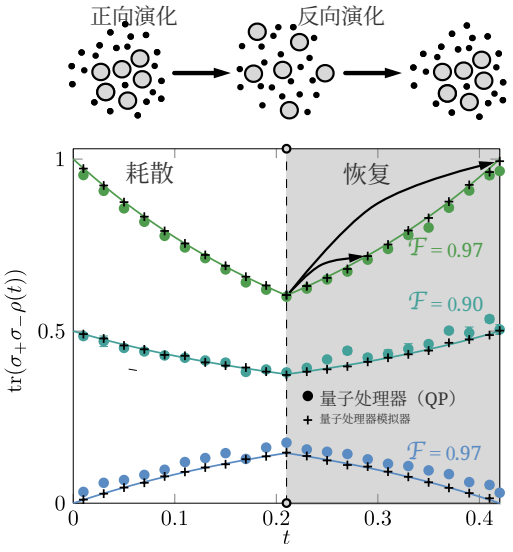

图1。（上）反转耗散系统的时间方向，可使其回到初始态。（下）通过模拟 Lindblad 演化的时间反演演化 $\frac{d}{dt}\rho_t = -\mathcal{L}_t(\rho_t)$，我们恢复了 Lindblad 演化（6）的初始态，适用于不同的初始态。对于 $t \le t^*$，数据点表示在 IBM 量子计算机上模拟的正向演化；对于 $t > t^*$，则表示反向演化。曲线为主方程（6）及其时间反演形式的数值积分。 $\mathcal{F}$ 表示最终恢复的量子态与初始态之间的保真度。主方程的参数为 $\beta = \omega = \gamma = 1$。

在这封信中，我们提出了一种新颖的模拟方案，可模拟超越 CP 可分映射的一般量子比特动力学映射 [24–26]。一般动力学映射保持迹和厄米性，但不一定保持正性。它们自然地作为 CP 映射的逆映射出现，因此，模拟这类映射的能力可以抵消系统上的噪声效应。在图1中，我们在 IBM 量子处理器上，恢复了受热 Lindblad 方程扰动的若干量子比特初始态。一般动力学映射也出现在以下情境中：

一般时间局域主方程，其中初始态并非假定为乘积态，而是已经形成了一定的系统-浴纠缠。它们的推导基于对高斯玻色子 [28, 29]，费米子 [30, 31]或其他可精确求解模型 [32]，中的环境自由度取迹，或采用时间卷积无关微扰理论方法 [12, 33]。

对于我们提出的方案，我们利用了这样一个事实：作用于有限维系统的任意动力学映射总能分解为两个CP映射之差 [34, 35]。我们证明，这种分解可以转化为适用于量子模拟的形式，即两个完全正且保迹（CPTP）映射的加权差。

在量子计算机上模拟开放量子系统的另一种更通用的方法是碰撞法 [36, 37]。在这种方法中，开放量子系统会反复与辅助系统相互作用或发生“碰撞”。通过让辅助量子比特在系统与辅助量子比特碰撞之间彼此相互作用，可以实现非马尔可夫动力学 [38–40]。这类模型已成功应用于 IBM 量子处理器 [41]。此外，也有人在非平衡系统 [42]和量子热力学 [43]的研究背景下提出了其他开放量子系统量子模拟方法。

与基于碰撞的方法（例如 [38–40],）相比，我们在此提出的算法的主要优势在于其适用范围不受具体问题限制。对于要模拟的每种动力学过程，都无需进行专门设计。事实上，我们能够模拟给定系统从任意时刻到之后任意时刻的动力学；而基于碰撞的方法则要求协议始终从演化的初始时刻开始，并依赖于对动力学进行特罗特化。此外，我们提出的方案还具有资源高效这一优点，因为计算开销不会随着模拟时间的延长而增加。

我们通过在 IBM量子处理器 上实现两个典型示例来展示这些特性。这些示例展现了在任意中间时刻模拟时间演化的能力，即使演化映射不是完全正映射（CP），以及恢复林德布拉德演化初始态的能力 [44]，见图1。

最后一个示例表明，新方案的一项很有前景的应用是：通过恢复通常未知的未受扰动初始态，在含噪中等规模量子平台上进行误差缓解。

理论框架。- 有限维线性映射 Λ 是完全正映射，当且仅当其作用于量子态 ρ 时可表示为一组矩阵 $\{K_j\}_j$的形式，这组矩阵通常称为 Kraus算子： $\Lambda(\rho) = \sum_j K_j \rho K_j^\dagger$。该映射是迹保持的，当且仅当 $\sum_j K_j^\dagger K_j = \mathbb{I}$，其中 $\mathbb{I}$ 是相应希尔伯特空间上的恒等算符，参见例如 [6, 12]。 [25, 26]的结果证明，任意CPTP量子比特映射 Λ 都等于两个极端CP映射 Λ_1和 Λ_2 的凸和，这两个映射均可由一对Kraus算子实现。具体而言，他们证明，对于每个CPTP量子比特映射 Λ，都存在两对酉算子 U_j、V_j 和两对Kraus算子 $F_{i,\,j}$（其中 $i,\ j \in \{1,2\}$），它们定义了极端映射

$$\Lambda_j(\rho) = U_j \left(\sum_{i=1}^{2} F_{i,j} (V_j \rho V_j^\dagger) F_{i,j}^\dagger \right) U_j^\dagger \tag{1}$$

使得

$$\Lambda(\rho) = \frac{1}{2}\Lambda_1(\rho) + \frac{1}{2}\Lambda_2(\rho). \tag{2}$$

作者 [24] 设计了一个如图 2 （b）所示的简单电路，以实现 Λ_j 的作用，仅使用一个辅助量子比特和 CNOT 门。

一般动力学映射是线性的、迹保持的且自伴的，但不一定保持正性。对于有限维系统，此类映射总可以写成两个 CP映射之差 [35]

$$\Sigma(\rho) = \Lambda_+(\rho) - \Lambda_-(\rho) = \sum_j K_j \rho K_j^\dagger - \sum_j M_j \rho M_j^\dagger. \tag{3}$$

映射 Σ在条件$\sum_j K_j^\dagger K_j - \sum_j M_j^\dagger M_j = \mathbb{I}$下是迹保持的。由于 $\Lambda_\pm$有界，存在一个正数 p，使得 $\sum_j M_j^\dagger M_j \leq p\mathbb{I}$。我们定义半正定算子 $D = \sqrt{p\mathbb{I} - \sum_j M_j^\dagger M_j}$，并写成

$$\Sigma(\rho) = (1+p)\Lambda_+^* - p\Lambda_-^*, \tag{4}$$

其中 $\Lambda_+^* = \frac{\sum_j K_j \rho K_j^\dagger + D\rho D^\dagger}{1+p}$和 $\Lambda_-^* = \frac{\sum_j M_j \rho M_j^\dagger + D\rho D^\dagger}{p}$。不难验证，两个映射 $\Lambda_\pm^*$都是迹保持的 CP映射。上述方程是我们的第一个主要结果。它表明，任何一般动力学映射Σ都可以分解为两个 CPTP映射的加权差。上述分解不同于通过[45] 对 CPTP映射进行的分解；后者涉及对量子态施加正的非酉变换。这使得我们的分解更适合在实验平台上模拟Σ 的作用。

算法与电路方案。- 我们为一般动力学映射提出的模拟方案如图 2(a) 所示。首先，使用经典随机数生成器选择对应于方程（ Λ_+^* 或 Λ_-^* 4）的分支，其概率分别为 $\frac{1+p}{1+2p}$ 和$\frac{p}{1+2p}$。随后，以 1/2 的概率选取两个极端映射（2）之一，并通过图 [24]2(b) 所示的 极端映射电路表示来实现。接下来，对一个可观测量进行测量，并将正、负

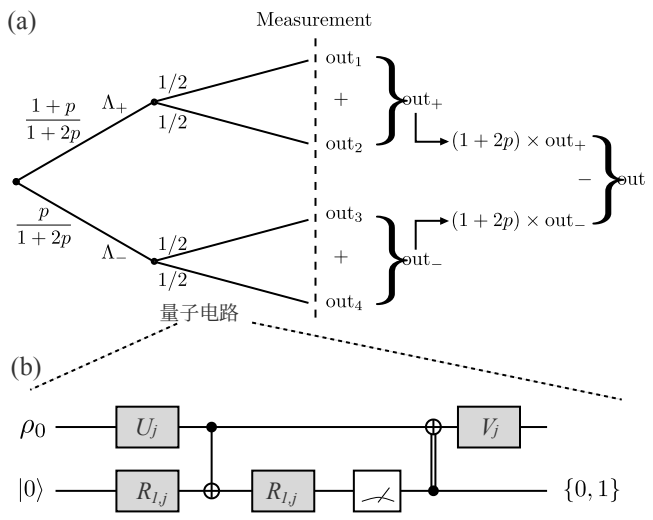

图 2。（a）模拟一般动力学映射的算法表示，该算法将其分解为两个 CPTP映射的加权差4。在每个分支点，经典随机数生成器会根据所示概率作出选择。在虚线处，对某个可观测量进行测量。最后，对测量结果进行重新缩放，并将其相互相减。（b）用于 [24] 实现极端映射的电路（2）。

分支中的结果相加。最后，将测量结果按 $1+2p$ 重新缩放以恢复归一化，然后将两个分支的结果相减。

图2 所示方案可以直接在量子计算平台上实现。具体而言，我们使用埃宁根 IBM 量子设备。利用上述算法生成系统的动力学，需要使用如图2（b）所示的八个不同量子电路。每个电路都需要单量子比特酉门 U_j、V_j、$R_{1,j}$ 和 $R_{2,j}$，我们在 [35]，中对其进行显式构造，并通过单量子比特门的通用集合加以实现。除单量子比特酉门外，还要执行 CNOT 门以及对辅助量子比特的测量操作。借助这种电路表示，任何单量子比特映射 Λ 都可以以误差 $\leq\varepsilon$ 进行模拟，所需计算机时间为 O（polylog$(1/\varepsilon)$) [24]。

为了尽量降低量子设备的噪声效应，我们采用了标准的量子误差缓解方法 [35]。对于每次电路实现，我们选择平台上错误率最低的量子比特和连接，并优化具体的门操作方案，以尽量减少最容易产生错误的 CX 门数量。我们通过在设备上进行探索性运行来发现其系统性读出误差，并采用读出误差缓解方法校正测量结果。

图中的数据点 1 和 4 分别是对每次 10000 次采样、共运行十次的结果取平均值，即根据图中所示的概率分布执行 10000 个电路

图 2(a)。误差条的范围小于数据点的大小。因此，最终的不保真度主要是由特定电路校准中的量子门和测量方案的系统误差造成的 [46]。

模拟一般时间局域主方程。一般保迹时间局域主方程的形式为

$$\frac{d}{dt}\rho_t = \mathcal{L}_t(\rho_t)$$
$$= -i[H_t,\rho_t] + \sum_k \Gamma_{k,t}(L_k\rho_t L_k^\dagger - \frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k,\rho_t\}), \quad (5)$$

其中，L_k 为算子，$\Gamma_k(t)$为标量权重函数。上述方程看起来与林德布拉德方程相似，区别在于权重函数 $\Gamma_k(t)$ 不必是正定的。一般时间局域主方程描述了广泛一类开放量子系统的演化，因为当纳卡吉马-祖万齐克方程 [47] 的解在有限时间区间 [48–52]内存在逆时，可以推导出这类方程。对于初始条件 ρ_0，式（5）的形式解为 $\rho_t = \Lambda_{t,0}(\rho_0) = T\exp\left(\int_0^t ds\,\mathcal{L}_s\right)\rho_0$，其中，若底层系统-环境模型处于乘积态，则映射 $\Lambda_{t,0}$ 必定是完全正的。

主方程（5）生成满足半群性质的映射：对于$\Lambda_{t,s}$ 表示将量子态从时刻 s 演化 t到时刻Λ_{t}的映射，则$s = \Lambda_{t,u}\Lambda_{u,s}$对于 $t \geq u \geq s$成立。该性质非常方便，因为我们可以将演化拆分为更小的时间段，使密度矩阵从一个时刻演化到下一个时刻。然而，Λ_{t}的完全正性0 并不一定能保证所有中间映射$\Lambda_{s,u}$ 都是 CP 的。事实上，在这种情况下，所有权重$\Gamma_{k,t}$ 都是正定的，并且（5）可化为传统的林德布拉德形式。

如果中间映射$\Lambda_{u,s}$ 不保持正性，这意味着并非所有量子态都会被映射为量子态，即某些量子态会被映射为具有负特征值的算子。事实上，取负值的权重因子 $\Gamma_{k,t}$ 反映了一个潜在的系统-环境模型，其中系统与环境之间形成了具有物理意义的纠缠。在这种情况下，某一时刻的约化系统态算子已不足以描述后续的时间演化，因为还需要了解系统-环境相互作用的历史。

为说明这一点，我们考虑一个含有四个算子及其相应权重函数的量子比特主方程，即 $L_1=\sigma_-$、$L_2=\sigma_+$、$L_3=\tau_-$ 和 $L_4=\tau_+$，其中 $\sigma_\pm$分别是 σ_z 和 $\tau_\pm$的升降算符。作为权重因子，我们选取一个典型的非马尔可夫模型，其权重振荡至负值并呈指数衰减，从而模拟与环境模态 [53]共振的情形。图 3 展示了这些权重函数，灰色区域表示它们均为负值的时段

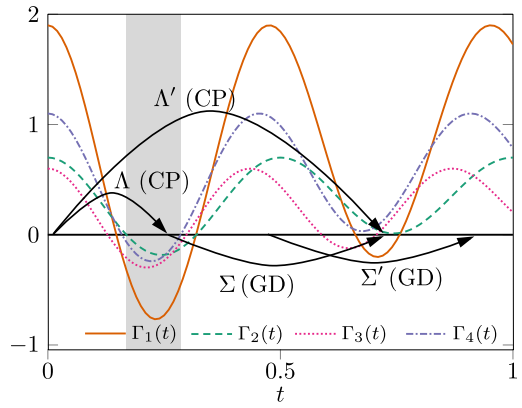

图3。时间局域主方程（5）的权重函数。速率的形式为 $\Gamma_j(t) = a_j \exp(-t)(b_j - \sin^2(c_j \pi t)) - d_j$，其中 $a_2 = a_3 = 1$，$a_1 = 3$ 以及 $a_4 = 1.5$；$b_1 = 4.5$，$b_2 = 3.5$，$b_3 = 1$ 以及 $b_4 = 1.5$；$c_1 = 2$，$c_2 = 2$，$c_3 = 2.3$ $c_4 = 2.2$ $d_1 = d_2 = 2.6$ $d_3 = d_4 = 0.4$ 以及，且

。若密度矩阵根据（5）的演化始于这一时段，则在短时间内它将不保持正性。因此，这些时刻起始的主方程解必须在上述一般动力学映射框架内描述。

根据（5）得到的激发态布居如图 4所示。使用 CP 映射$\Lambda_{t,\ 0}[\rho_0]$

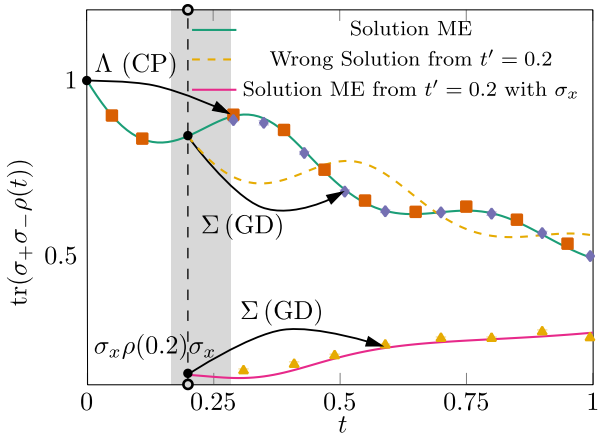

图4。根据（5）的解（线）和IBM模拟（符号）得到的激发态布居，初始态为$\rho_0 = (1+\sigma_z)/2$。在阴影区域内，所有权重均为负，因此可以确保从该区域开始的演化不保持正性。动力学映射$\Lambda_{t,\ 0}$ 是CP的；而从稍后的时间 $t' = 0.2$开始，映射$\Sigma \equiv \Lambda_{t,\ t'}$ 只能确保是一般动力学映射。（黄色）线表示从时间 $t' = 0.2$ 开始、忽略此前与环境的相互作用时量子态的演化。紫色线（绿色三角形）表示在对量子态施加酉变换后，从 $t' = 0.20$ σ_x 开始的演化。

使用 $\rho_0 = (1+\sigma_z)/2$ 得到的结果以（绿色）实线表示，该结果通过直接对（5）进行积分获得；同时还展示了按照上述方法在 IBM 设备上进行模拟的结果（方块）。从图 $t' = 0.2$灰色区域中的中间时刻开始，图 3中的菱形表示使用一般动力学映射 $\Sigma \equiv \Lambda_{t,\ t'}[\rho_{t'}]$得到的 IBM 模拟结果。由于在 t' 时所有权重函数均为负定，因此解（至少在短时间内）不是 CP 的。相反，若按照使用 $\Lambda_{t-t',\ 0}[\rho_{t'}]$进行演化（黄色虚线）而忽略与环境的过去相互作用，则无法恢复（5）所描述的正确动力学。

能够获得从 $t' > 0$ 开始的中间演化映射，具有很大优势。例如，我们可以将一个量子态从 0 演化到 t'，对其执行量子操作，然后再通过完全有界演化使其进一步演化。图 4 中的（粉色）实线展示了对 σ_x 在 $t' = 0.2$处的量子态应用酉变换后的情形，而（绿色）三角形则显示了根据新方案对一般动力学映射进行的相应 IBM 模拟。

量子态恢复。- 这种新模拟方法的另一个引人注目的结果是，通过实现其时间反演主方程 [44]，可以恢复在量子设备上获得的 Lindblad 演化的初始态。具体来说，我们考虑一个量子比特与热储库 $\frac{d}{dt}\rho_t = \mathcal{L}_t(\rho_t)$ 弱耦合时的主方程，

$$\mathcal{L}_t(\rho_t) = -i\omega[\sigma_z/2, \rho_t] + \gamma e^{\beta\omega}(\sigma_-\rho\sigma_+ - \frac{1}{2}\{\sigma_+\sigma_-, \rho_t\}) + \gamma(\sigma_+\rho\sigma_- - \frac{1}{2}\{\sigma_-\sigma_+, \rho_t\}) \quad (6)$$

及其时间反演演化 $\frac{d}{dt}\rho_t = -\mathcal{L}_t(\rho_t)$。

因此，先将量子态演化 t，使用（6），再通过其时间反演演化 $s \le t$，所得量子态与仅使用（6）演化 $t - s$所得的量子态相同。我们使用模拟方案（4），在IBM设备上分别实现正向和反向演化。

图1 中的数据点展示了 $t \le t^*$ 及各种初始态下（6）的热化动力学。在$t = t^*$，恢复开始发生，使量子态趋近于耗散时间演化过程中较早时刻的量子态。请注意，恢复的实现方式是将量子态 $\rho(t = t^*)$直接映射到每个恢复后的量子态，每个量子态仅需运行一次算法。

展望。- 我们已证明，只需使用四个极端CP映射（每个映射由两对 Kraus 算子构成），即可直接模拟一般量子比特动力学映射。量子系统所受的环境噪声通常由完全正映射描述。由于完全正映射的逆映射是一般动力学映射，因此我们模拟方案的一项有望应用是

通过恢复通常未知的裸量子比特态（即不存在任何环境耦合时的量子比特态）来缓解误差。我们在 图 1中证明了这一方法在 IBM 量子处理器上的可行性。下一步是确定量子处理器中单个量子比特的噪声完全正映射，并使用我们的模拟方案将其逆转，从而实现真正的量子误差缓解。

致谢感谢 P. Muratore- Ginanneschi、M. Donvil 和 J. Stockburger 提供宝贵的讨论。我们衷心感谢 WM-BW 通过巴登-符腾堡量子计算能力网络（SiQuRe）提供的资助、德国联邦教育与研究部通过 QSens（QComp）提供的资助，以及 QSolid（德国联邦教育与研究部）提供的资助。

* brecht.donvil@uni-ulm.de[1] I. M. Georgescu、S. Ashhab 和 F. Nori，《Reviews of Modern Physics》86, 153 (2014)。[2] S. Lloyd，《科学》273, 1073 (1996)。[3] D. W. Berry、G. Ahokas、R. Cleve 和 B. C. Sanders，《数学物理通讯》270, 359 (2006)。[4] A. M. Childs，《数学物理通讯》294, 581 (2009)。[5] N. Wiebe、D. W. Berry、P. Høyer 和 B. C. Sanders，《物理学杂志A：数学与理论》44, 445308 2011( )。[6] A. Rivas 和 S. F. Huelga，*Open Quantum System: An Introduction* 2012 (施普林格，)。[7] A. Strathearn、P. Kirton、D. Kilda、J. Keeling 和 B. W. Lovett，《自然·通讯》9, 10.1038/s41467-018- 05617-3 (2018)。[8] D. Suess、A. Eisfeld 和 W. T. Strunz，《物理评论快报》113, 150403 (2014)。[9] J. Prior、A. W. Chin、S. F. Huelga 和 M. B. Plenio，《物理评论快报》105, 050404 (2010)。[10] Y. Tanimura 和 R. Kubo，《日本物理学会志》58, 101 (1989)。[11] M. Xu、Y. Yan、Q. Shi、J. Ankerhold 和 J. T. Stockburger，《驯服量子噪声以高效模拟低温开放量子系统》(2022)。[12] H. P. Breuer 和 F. Petruccione，*The theory of open quantum systems* 2002 (牛津克拉伦登出版社，)。[13] G. Lindblad，《数学物理通讯》48, 119 (1976)。[14] V. Gorini、A. Kossakowski 和 E. C. G. Sudarshan，《数学物理学杂志》17, 821 (1976)。[15] ´A. Rivas，《物理评论快报》124, 160601 (2020)。[16] D. Bacon、A. M. Childs、I. L. Chuang、J. Kempe、D. W. Leung 和 X. Zhou，《物理评论A》64, 062302 (2001)。[17] S. Lloyd 和 L. Viola，《物理评论A》65, 010101(R) (2001)。[18] H. Weimer、M. M¨uller、I. Lesanovsky、P. Zoller 和 H. P. B¨uchler，《自然·物理》6, 382 (2010)。[19] H. Wang、S. Ashhab 和 F. Nori，《物理评论A》83, 062317 2011( )。[20] M. Kliesch、T. Barthel、C. Gogolin、M. Kastoryano 和 J. Eisert，《物理评论快报》107, 120501 (2011)。[21] T. Barthel 和 M. Kliesch，《物理评论快报》108, 230504 (2012)。[22] P. Schindler、M. M¨uller、D. Nigg、J. T. Barreiro、E. A. Martinez、M. Hennrich、T. Monz、S. Diehl、P. Zoller 和 R. Blatt，《自然·物理》9, 361 (2013)。[23] J. D. Guimar˜aes、J. Lim、M. I. Vasilevskiy、S. F. Huelga 和 M. B. Plenio，《借助噪声辅助的开放系统数字量子模拟》(2023)。[24] D.-S. Wang、D. W. Berry、M. C. de Oliveira 和 B. C. Sanders，《物理评论快报》111, 130504 (2013)。[25] C. King 和 M. Ruskai，IEEE Transactions on Information Theory 47, 192 (2001)。[26] M. B. Ruskai、S. Szarek 和 E. Werner，《线性代数及其应用》347, 159 (2002)。[27] J. Han、W. Cai、L. Hu、X. Mu、Y. Ma、Y. Xu、W. Wang、H. Wang、Y. P. Song、C.-L. Zou 和 L. Sun，Phys. Rev. Lett. 127, 020504 (2021)。[28] R. Feynman 和 F. Vernon，《物理学年鉴》24, 118 (1963)。[29] R. Karrlein 和 H. Grabert，《物理评论E》55, 153 (1997)。[30] M. W. Y. Tu 和 W.-M. Zhang，《物理评论B》78, 235311 (2008)。[31] B. Donvil、P. Muratore-Ginanneschi 和 D. Golubev，《物理评论B》102, 245401 (2020)。[32] S. John 和 T. Quang，《物理评论A》50, 1764 (1994)。[33] N. Hashitsumae、F. Shibata 和 M. Shing¯u，J ournal of Statistical Physics 17, 155 (1977)。[34] R. Sweke、M. Sanz、I. Sinayskiy、F. Petruccione 和 E. Solano，《物理评论A》94, 022317 (2016)。[35] M. Rossini、D. Maile、J. Ankerhold 和 B. Donvil，补充材料。[36] F. Ciccarello、S. Lorenzo、V. Giovannetti 和 G. M. Palma，《物理学报告》954, 1 (2022)。[37] M. Cattaneo、G. De Chiara、S. Maniscalco、R. Zambrini 和 G. L. Giorgi，《物理评论快报》126, 130403 (2021)。[38] R. McCloskey 和 M. Paternostro，《物理评论A》89, 052120 (2014)。[39] S. Lorenzo、F. Ciccarello 和 G. M. Palma，《物理评论A》93, 052111 (2016)。[40] S. Kretschmer、K. Luoma 和 W. T. Strunz，《物理评论A》94, 012106 (2016)。[41] M. A. C. R. Guillermo Garc´ıa-P´erez 和 S. Maniscalco，npj《量子信息》6, 1 (2020)。[42] H. Lamm 和 S. Lawrence，《物理评论快报》121, 170501 (2018)。[43] Y. L. Jin-Fu Chen 和 H. Dong，《熵》23(3), 353 (2021)。[44] B. Donvil 和 P. Muratore-Ginanneschi，《解缠配对动力学映射可恢复量子信道的输入》(2022)。[45] E. C. G. Sudarshan 和 A. Shaji，《物理学杂志A：数学与一般》36, 5073 (2003)。[46]这些重新校准由 IBM 工作人员每天进行，参见 https://quantum-computing.ibm.com/admin/docs/admin/calibration-jobs，访问日期为2023年3月6日。[47] R. Zwanzig，*Nonequilibrium statistical mechanics* (牛津大学出版社，2001) 第240页。[48] V. P. Vstovsky，《物理学快报A》44, 283 (1973)。[49] H. Grabert、P. Talkner 和 P. H¨anggi，Zeitschrift für Physik B Condensed Matter 26, 389 (1977)。

[50] A. J. van Wonderen 和 K. Lendi，Journal of Statistical Physics **80**，273 (1995)。[51] E. Andersson、J. D. Cresser 和 M. J. W. Hall，Journal of Modern Optics **54**，1695 (2007)，0801.4100。[52] D. Chru´sci´nski 和 A. Kossakowski，《物理评论快报》**104**，070406 (2010)。

[53] H.-P. Breuer、E.-M. Laine、J. Piilo 和 B. Vacchini，《现代物理评论》**88**，021002 (2016)。[54] V. Paulsen，*Completely Bounded Maps and Operator Algebras* 2003（剑桥大学出版社，）。

补充材料

[24] 的作者提出了一种用于完全正保迹量子比特映射，即量子比特信道的简单模拟方案。最近，该协议已由 [27] 通过实验实现。 [24] 的方法依赖于 [25, 26] 较早的数学结果，该结果使得可以将量子比特信道写成极值信道的凸和。具体而言，这些信道由两个幺正变换以及两个相当简单的 Kraus算子之和构成。

我们研究保迹一般量子比特动力学映射。这些映射是保迹的、自伴的，但不一定保持正性。重要的是，这些映射总可以写成两个完全正映射之差。我们证明，任何一般动力学映射都可以写成两个量子信道的加权差。结合 [24–26] 的结果，我们得到了一种适用于一般量子比特动力学的通用模拟方法，该方法只需要一个辅助量子比特。

一般动力学映射

完全有界映射是线性映射 Λ，其对更大希尔伯特空间$\mathcal{H}\otimes\mathbb{C}_N$的平凡扩张 $\Lambda_N=\Lambda\otimes\mathbb{I}_N$满足

$$\|\Lambda\|_{cb}=\sup_N\|\Lambda_N\|<\infty. \tag{7}$$

所有作用于有限维系统的线性映射都是完全有界的 [54]。当这些线性映射是迹保持且自伴时，我们称之为一般动力学映射。一般时间局域主方程的解是一般动力学映射的一个具有物理意义的例子

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t)=-i[H,\rho_S(t)]+\sum_k\gamma_k(t)\left(L_k\rho_S(t)L_k^\dagger-\frac{1}{2}\{L_k^\dagger L_k,\rho_S(t)\}\right) \tag{8}$$

其中权重 $\gamma_k(t)$ 不需要满足正性要求。

Wittstock-Paulsen分解指出，任何完全有界映射都可以表示为两个完全正映射之差。具体而言，对于每个完全有界映射 Λ，都存在两个完全正映射 $\Lambda_\pm$，使得

$$\Lambda=\Lambda_+-\Lambda_-. \tag{9}$$

其中 $\|\Lambda_+\|$, $\|\Lambda_-\|\le\|\Lambda\|_{cb}$。我们可以用Kraus算子表示完全正映射

$$\Lambda_+\rho=\sum_k M_k\rho M_k^\dagger,\quad \Lambda_-\rho=\sum_l K_l\rho K_l^\dagger. \tag{10}$$

如果 Λ 是迹保持的，那么

$$\sum_k M_k^\dagger M_k-\sum_j K_j^\dagger K_j=\mathbb{I}. \tag{11}$$

由于 $\|\Lambda_-\|$ 有界，因此存在 $\alpha\ge\|\Lambda\|_{cb}$，使得

$$\sum_j K_j^\dagger K_j\le p\mathbb{I} \tag{12}$$

因此，差值 $p\mathbb{I}-\sum_j K_j^\dagger K_j=D^\dagger D$ 是一个正定矩阵，并且

$$\sum_j K_j^\dagger K_j+D^\dagger D=p\mathbb{I}. \tag{13}$$

现在我们将（9）改写为

$$\Lambda(\rho) = (1+p)\left(\frac{\Lambda_+(\rho) + D\rho D^\dagger}{1+p}\right) - p\left(\frac{\Lambda_-(\rho) + D\rho D^\dagger}{p}\right) \tag{14}$$

其中，上述方程是完全正映射的加权差。此外，括号内的算子迹均为 1。

完全正映射分解

设 Σ 是作用于有限维空间上的一般动力学映射。我们计算 Choi矩阵 $C(\Sigma)$

$$C(\Sigma) = \sum_{ij} e_{ij} \otimes \Sigma(e_{ij}),$$

其中 e_{ij} 是初等矩阵。映射 Σ 可由 Choi矩阵通过以下方式得到

$$\Sigma(\rho) = \mathrm{tr}_1(C(\Sigma)\,\rho^\top \otimes \mathbb{I})$$

其中 tr_1，且 $\rho^\top$ 是 ρ 的转置。

Choi矩阵具有这样的性质：其正性等价于底层映射的完全正性。由于 Σ 是自伴的，$C(\Sigma)$ 是一个自伴矩阵，因此可以对角化。设其特征向量和特征值分别为 v_i 和 λ_i，则定义

$$C_\pm(\Sigma) = \sum_i \max(0, \pm\lambda_i)\, v_i v_i^\dagger$$

使得

$$C(\Sigma) = C_+(\Sigma) - C_-(\Sigma). \tag{15}$$

然后定义 $\Lambda_\pm$（ρ）在方程（9）中为 $\Lambda_\pm$（ρ）$=\mathrm{tr}_1$（$C_\pm$（Σ）$\rho^\top \otimes \mathbb{I}$）。

极值映射分解

[25, 26]的作者证明了，任意单量子比特通道 Λ都可以写成两个通道的凸和，这两个通道“属于单量子比特通道极值点集合的闭包”。

设 Λ 是一个作用于量子比特态的完全正迹保持映射。我们可以用一个 4×4 矩阵 $\mathbb{T}$来表示 Λ 对量子态 $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + w\cdot\sigma)$的作用

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & T \end{pmatrix}, \quad \mathbb{T}_{ij} = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_i \Lambda(\sigma_j)) \tag{16}$$

使得

$$\Lambda(\rho) = (\mathbb{I} + (t + Tw)\cdot\sigma). \tag{17}$$

于是存在两个酉算子 U、V 以及一个对角线为 T 的完全正映射 Λ'，使得

$$\Lambda(\rho) = U\Lambda'(V\rho V^\dagger)U^\dagger \tag{18}$$

其中

$$T' = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \tag{19}$$

对于极端映射， $\mathbb{T}'$ 可以写为

$$\mathbb{T}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\nu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\mu & 0 \\ \sin\mu\cos\mu & 0 & 0 & \cos\mu\cos\mu \end{pmatrix} \tag{20}$$

由 $\mathbb{T}'$ 定义的映射仅用 2 个 Kraus算子即可得到

$$F_0 = \begin{pmatrix} \cos\frac{\mu-\nu}{2} & 0 \\ 0 & \sin\frac{\mu+\nu}{2} \end{pmatrix}, \qquad F_1 = \begin{pmatrix} 0 & \cos\frac{\mu+\nu}{2} \\ \sin\frac{\mu-\nu}{2} & 0 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

根据 [25, 26] ，任意完全正量子比特信道 Λ 都可以写成两个便于处理的完全正映射的凸和

$$\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2. \tag{22}$$

with

$$\Lambda_j(\rho) = U_j(F_{0,j}\, V_j\rho V_j^\dagger\, F_{0,j}^\dagger + F_{1,j}\, V_j\rho V_j^\dagger\, F_{1,j}^\dagger)U_j^\dagger \tag{23}$$

其中， V_j 和 U_j 是酉算子，而 Kraus算子为$F_{0、\,j}$ 和$F_{1、\,j}$。

完全正映射

完全正映射的对角表示

量子比特信道对量子比特态的作用可以用一个 3 维向量 t 和一个 3×3矩阵 T来表示。令 $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + w\cdot\sigma)$，则

$$\Lambda(\rho) = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + (t + Tw)\cdot\sigma).$$

在本节中，我们遵循 [25]，并说明如何求得对角表示。我们将 T的奇异值分解写为

$$T = V\,D\,W^\dagger \tag{24}$$

其中，由于 T 是实矩阵， V和 W 可选为实矩阵，因而为正交矩阵。若 $\det(V) = 1$，则 V 是旋转矩阵；若 $\det(V) = -1$ ，则 $-V$是旋转矩阵。因此，令$R_{1,\,2}$ 为旋转矩阵，则

$$T = \frac{V}{\det V}\,\frac{D}{(\det V)(\det W^\dagger)}\,\frac{W^\dagger}{\det(W^\dagger)} \tag{25}$$

Rotation on the Bloch Sphere as a Unitary Transformation

布洛赫球上绕轴$\hat{n}$ 旋转角度 θ ，可由希尔伯特空间上的酉变换表示

$$U = \exp\left(-i\theta\,\hat{n}\cdot\frac{1}{2}\vec{\sigma}\right)$$

我们通过求解下式来确定旋转矩阵 R 的旋转轴

$$(R - \mathbb{I})\hat{n} = 0 \tag{26}$$

其中 $\|\hat{n}\| = 1$ ，旋转角度为

$$\mathrm{tr}(R) = 1 + 2\cos\theta \tag{27}$$

因此，我们可以写成

$$\Lambda(\rho) = U_1 \Lambda_D(U_2 \rho U_2^\dagger) U_1^\dagger$$

其中

$$\Lambda_D\left(\frac{1}{2}(\mathbb{I} + w\cdot\sigma)\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \left(\frac{V^\dagger}{\det V^\dagger}\, t + \frac{D}{(\det V)(\det W^\dagger)} w\right)\cdot\sigma\right)$$

凸和

我在此重复 [26] 主要结果，以展示完全正映射如何写成两个极值映射的凸和。

设 Φ为完全正保迹量子比特映射，设 Φ 为其伴随。于是， Φ的 Choi 表示是一个形如 4×4 矩阵

$$C(\hat{\Phi}) = \begin{pmatrix} \hat{\Phi}(E_{11}) & \hat{\Phi}(E_{12}) \\ \hat{\Phi}(E_{21}) & \hat{\Phi}(E_{22}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & C \\ C^\dagger & \mathbb{I} - A \end{pmatrix}.$$

其中 A 和 C 是 2×2 矩阵。由于保迹，$\hat{\Phi}(E_{11}) + \hat{\Phi}(E_{22}) = \hat{\Phi}(\mathbb{I}) = \mathbb{I}$，因此对角元素之和为一。此外，由于 $\Phi(E_{11})$ $\Phi(E_{22}) \geq 0$，我们有 $A \leq \mathbb{I}$。注意， Φ 和 Φ 的 Choi矩阵之间的关系为

$$C(\hat{\Phi}) = \overline{U_{23}^\dagger C(\Phi) U_{23}},$$

其中 U_{23} 为酉矩阵

$$U_{23} = U_{23}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

当且仅当 $C(\Phi)$ 是正定的， $C(\hat{\Phi})$ 才是正定的。

引理1。一个矩阵

$$\begin{pmatrix} A & C \\ C^\dagger & B \end{pmatrix}$$

是半正定的，当且仅当 $A \geq 0$、 $B \geq 0$ 和 $C = \sqrt{A} R \sqrt{B}$，其中 R 是压缩算子（即 $\|R\| \leq 1$）。

以下命题告诉我们关于广义极值点的 R 的一些结论**命题**

1。一个映射是广义极值点，当且仅当 $C(\hat{\Phi})$ 具有以下形式 m

$$C(\hat{\Phi}) = \begin{pmatrix} A & \sqrt{A} U \sqrt{\mathbb{I} - A} \\ \sqrt{\mathbb{I} - A} U^\dagger \sqrt{A} & \mathbb{I} - A \end{pmatrix}$$

其中 U 是一个酉算子，且 $0 \leq A \leq \mathbb{I}$。

Lemma 2. 设 R 是一个 2×2 压缩算子，其奇异值分解的形式为

$$\begin{aligned} R &= V \begin{pmatrix} \cos\theta_1 & 0 \\ 0 & \cos\theta_2 \end{pmatrix} W^\dagger \\ &= \frac{1}{2} V \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2} \end{pmatrix} W^\dagger + \frac{1}{2} V \begin{pmatrix} e^{-i\theta_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta_2} \end{pmatrix} W^\dagger \\ &= \frac{U_1}{2} + \frac{U_2}{2} \end{aligned}$$

其中$U_{1,\ 2}$ 为酉算子。

命题 2。 任意量子比特信道 Φ 的伴随的 *Choi* 表示都可以写成两个广义极值通道的 *Choi* 表示的凸和。

证明。我们有

$$C(\hat{\Phi}) = \begin{pmatrix} A & \sqrt{A}R\sqrt{\mathbb{I}-A} \\ \sqrt{\mathbb{I}-A}R^{\dagger}\sqrt{A} & \mathbb{I}-A \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} A & \sqrt{A}U_1\sqrt{\mathbb{I}-A} \\ \sqrt{\mathbb{I}-A}U_1^{\dagger}\sqrt{A} & \mathbb{I}-A \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} A & \sqrt{A}U_2\sqrt{\mathbb{I}-A} \\ \sqrt{\mathbb{I}-A}U_2^{\dagger}\sqrt{A} & \mathbb{I}-A \end{pmatrix}$$

□

误差缓解

为了从最先进的 NISQ 量子设备中获得有意义的结果，必须采用旨在减轻噪声影响的方法。在量子纠错和误差缓解领域的各种可用方法中，我们选择了三种方法，以减少设备误差对测量结果的影响。

第一种方法是转译，即将任何理论设计的电路转换为量子设备实际能够实现的基础门集，并对我们设计的电路进行转译以减少误差。例如，可以通过减少完成给定任务所需的 CX 门数量来实现。

第二种方法是从量子处理器提供的量子比特中，针对我们要运行的电路，选择在每次模拟时相干性最佳且最能抵御测量误差的量子比特。我们可以使用 Qiskit 软件包中的专用函数来实现这一点；这些函数能够直接从 IBM 的服务器获取处理器中每个量子比特的量子态。

第三种方法，也是稍微更精细一些的方法，是读出误差缓解。理想测量可以用投影算子来描述：每一种可能的测量结果 i 都对应一个投影算子 P_i，其中 $\sum_i P_i = I$。对处于量子态 ρ 的量子系统进行测量，得到结果 i 的概率 p_i 由p_i =Tr($P_i\rho$) 给出。现在假设测量包含以下类型的错误：以概率 $p_{1|0}$，结果“0”会变成“1”，反之亦然 $p_{0|1}$。尽管由此产生的测量不再是投影测量，但基本形式体系（POVM：正算子值测度）保持不变——唯一的区别是算子变为

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1-p_{1|0} & 0 \\ 0 & p_{0|1} \end{pmatrix}, P_1 = \begin{pmatrix} p_{1|0} & 0 \\ 0 & 1-p_{0|1} \end{pmatrix}$$

上述算子不是投影算子，而是正定且自伴的。上述类型的错误（仅涉及测量结果的赋值）可以通过对测量结果进行经典后处理来纠正，这种方法称为 $LocalReadoutError$ ，由 Qiskit 实验库实现。