

Bài báo nghiên cứu

MÔ PHỎNG MÔ HÌNH FERMI-HUBBARD BẰNG THUẬT TOÁN
LƯỢNG TỬ BIẾN PHÂN SỬ DỤNG ANSATZ HYBRID HEA-HVAPhạm Văn Anh¹, Hồ Xuân Nhật¹, Trần Minh Đức¹, Phạm Đăng Quang¹,Dụng Văn Nhật Tân¹, Nguyễn Quang San², Dụng Văn Lữ^{1*}¹Khoa Lý – Hoá, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Đà Nẵng, Việt Nam²Khoa Kỹ thuật và Công nghệ – Đại học Huế, Việt Nam*Tác giả liên hệ: Dụng Văn Lữ – Email: dvlu@ued.udn.vn

Ngày nhận bài: 07-01-2026; Ngày nhận bài sửa: 14-4-2026; Ngày duyệt đăng: 28-4-2026

TÓM TẮT

Mô phỏng mô hình Fermi-Hubbard là bài toán then chốt trong vật lý vật chất ngưng tụ nhưng thường vượt quá khả năng của các phương pháp tính toán cổ điển khi quy mô hệ tăng. Nghiên cứu này đề xuất một quy trình mô phỏng lượng tử biến phân sử dụng VQE và VQD để ước lượng năng lượng trạng thái cơ bản và mức kích thích thứ nhất. Ansatz lai HEA-HVA được thiết kế và kết hợp linh hoạt ưu điểm của chúng nhằm tối ưu cân bằng giữa khả năng biểu diễn trạng thái và chi phí tài nguyên mạch lượng tử. Thông qua mô phỏng số trên các cấu hình chuỗi 4×1 , mạng vuông 2×2 và vòng 6 vị trí với tỉ số tương tác U/t từ 0 đến 10, kết quả cho thấy Hybrid HEA-HVA hội tụ ổn định và tái tạo tốt năng lượng cơ bản cũng như mức kích thích thấp nhất. So với các ansatz thuần túy, cấu trúc lai cho sai lệch năng lượng nhỏ hơn hoặc tương đương, đặc biệt hiệu quả trong vùng tương tác trung bình mạnh, đồng thời vẫn duy trì độ sâu mạch phù hợp trong bối cảnh NISQ. Nghiên cứu khẳng định tiềm năng của ansatz lai trong mô phỏng các hệ fermion tương quan mạnh và tạo tiền đề để mở rộng sang các hệ có phổ năng lượng phức tạp hơn trên quy mô lớn.

Từ khóa: mô hình Fermi-Hubbard; mô phỏng lượng tử; thuật toán lượng tử biến phân (VQA); khử suy biến lượng tử biến phân (VQD); thuật toán giải trị riêng lượng tử biến phân (VQE)

1. Giới thiệu

Sự phát triển vượt bậc của khoa học lượng tử gần đây đã mang lại những bước tiến cách mạng trong xử lý thông tin. Với ưu thế về không gian Hilbert và khả năng xử lý song song vượt trội so với phương pháp cổ điển (Rietsche et al., 2022), điện toán lượng tử cùng các thuật toán như Shor và Grover (Grover, 1996; Shor, 1994) đã mở ra tiềm năng to lớn trong mật mã lượng tử (Jha et al., 2025), phân phối khóa lượng tử (Kumar & Mondal, 2025), học máy lượng tử (Devadas & Sowmya, 2025), tài chính lượng tử (Orús et al., 2019) và hóa học lượng tử (Claudino, 2022; Georges et al., 2025). Đặc biệt, việc mô phỏng các hệ vật chất ngưng tụ như mô hình Fermi-Hubbard (Arovas et al., 2022; Hubbard, 1963) đóng vai trò

Cite this article as: Pham, V. A., Ho, X. N., Tran, M. D., Pham, D. Q., Dung, V. N. T., Nguyen, Q. S., & Dung, V. L. (2026). Quantum simulation of the Fermi-Hubbard model using variational quantum algorithms with a hybrid HEA-HVA ansatz. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 23(6), 1479-1491. [https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.6.5488\(2026\)](https://doi.org/10.54607/hcmue.js.23.6.5488(2026))

then chốt. Mô hình này mô tả các electron tương tác trên mạng lưới, tuân theo nguyên lý loại trừ Pauli (LeBlanc et al., 2015), và chịu sự cạnh tranh giữa động năng (thúc đẩy quá trình nhảy sang vị trí lân cận) và tương tác đẩy Coulomb tại chỗ, sự cạnh tranh này là nguồn gốc của nhiều hiện tượng tương quan mạnh trong vật lý vật chất ngưng tụ (Dagotto, 2005; Fradkin et al., 2015; Sachdev et al., 2002). Trong nghiên cứu này, chúng tôi tập trung vào việc xác định trạng thái cơ bản và phân tích các ý nghĩa vật lý tương ứng của mô hình.

Việc giải quyết mô hình Hubbard phụ thuộc lớn vào số chiều của cấu hình mạng. Trong khi trường hợp một chiều (1D) có nghiệm chính xác qua ansatz Bethe (Bethe, 1931), trường hợp hai chiều (2D) vẫn là thách thức lớn (LeBlanc et al., 2015). Các cách tiếp cận cổ điển đều gặp hạn chế nghiêm trọng: phương pháp chéo hóa chính xác bị giới hạn bởi sự bùng nổ không gian Hilbert (Yamada et al., 2005), nhóm tái chuẩn hóa mật độ ma trận kém hiệu quả ở chiều cao hơn 1D, và mô phỏng Monte Carlo lượng tử gặp vấn đề dấu fermion gây hội tụ chậm (Iskakov et al., 2024).

Để khắc phục các hạn chế trên, thuật toán lượng tử biến phân trên các thiết bị lượng tử quy mô trung bình (NISQ), đặc trưng bởi số lượng qubit hạn chế và tỷ lệ lỗi cao, nổi lên như một hướng đi triển vọng (Peruzzo et al., 2014; McClean et al., 2016). Trong đó, thuật toán giải trị riêng lượng tử biến phân VQE là một thuật toán hybrid giữa lượng tử và cổ điển, kết hợp máy tính lượng tử để chuẩn bị một trạng thái thử được gọi là ansatz và đo năng lượng, trong khi thuật toán tối ưu cổ điển cập nhật các tham số ansatz dựa trên nguyên lý biến phân. Thành công của VQE phụ thuộc chủ yếu vào thiết kế mạch tham số nó phải vừa có khả năng biểu diễn đủ để mô tả trạng thái cơ bản, vừa phải đủ nông để có thể chạy trên phần cứng NISQ. Hiện nay có hai nguyên lý thiết kế ansatz chính đã được nghiên cứu. Một là ansatz hiệu quả phần cứng (HEA), được xây dựng từ các cổng lượng tử cơ bản của thiết bị (Kandala et al., 2017). HEA có ưu điểm mạch nông nhưng dễ gặp hiện tượng "cao nguyên cần cỗi" khó tối ưu (McClean et al., 2018). Ngược lại, Ansatz Biến phân Hamiltonian (HVA) dựa trên cấu trúc vật lý (Montanaro & Stanisic, 2020) hội tụ tốt nhưng tạo ra mạch quá sâu cho thiết bị NISQ. Để giải quyết sự đánh đổi này, chúng tôi đề xuất một phương pháp hybrid mới, kết hợp cấu trúc vật lý của HVA với các khối linh hoạt của HEA. Ý tưởng chính là dùng HVA để nhanh chóng đưa trạng thái thử tiến gần vùng nghiệm đúng, trong khi các khối HEA nông đóng vai trò tăng khả năng biểu diễn và thích ứng với phần cứng mà không làm tăng đáng kể độ sâu của mạch.

2. Đối tượng và phương pháp nghiên cứu

2.1. Mô hình Fermi-Hubbard

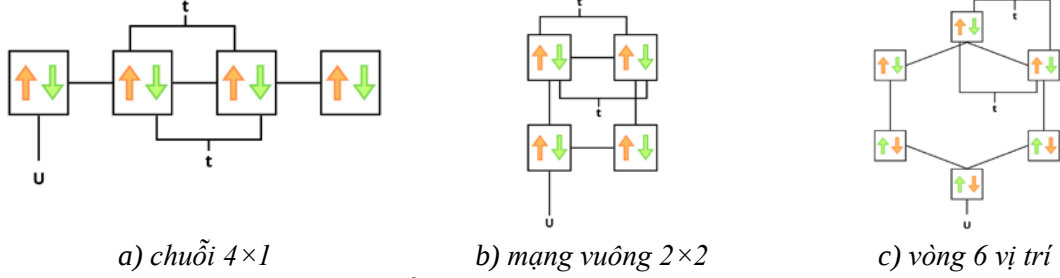
Mô hình Fermi-Hubbard mô tả fermion tương tác mạnh trên mạng tinh thể, giải thích các hiện tượng như chuyển pha Mott (Hubbard, 1963). Hamiltonian này có dạng:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} (c_{i,s}^\dagger c_{j,s} + c_{j,s}^\dagger c_{i,s}) + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} \quad (1)$$

với t là biên độ nhảy giữa các vị trí lân cận (chúng tôi đặt $t = 1$ làm đơn vị đo năng lượng); U là cường độ tương tác tại chỗ, và $c_{j,s}^\dagger$, $c_{j,s}$ lần lượt là toán tử tạo và hủy electron với spin s trên vị trí j . Kí hiệu $\langle i, j \rangle$ chỉ các cặp vị trí lân cận, tập liên kết này được xác định dựa trên

hình học từng cụm.

Chúng tôi khảo sát mô hình Fermi-Hubbard chuẩn trên các cấu hình: chuỗi 4×1 , mạng vuông 2×2 và mạng 1D 6 vị trí với điều kiện biên tuần hoàn (Hình 1). Tham số tương tác U/t được khảo sát trong khoảng từ 0 đến 10, bao phủ chế độ tương quan yếu đến mạnh và phù hợp với giới hạn độ sâu mạch VQE (Cai, 2020).



Hình 1. Cấu trúc của mô hình Fermi-Hubbard

Để mô phỏng trên máy tính lượng tử, chúng tôi dùng ánh xạ Jordan-Wigner (JW) (Gulacsi, 2025): mỗi vị trí j với hai spin được gán hai qubit. Toán tử fermion chuyển thành:

$$c_k = \frac{X_k + iY_k}{2} \prod_{\alpha=0}^{k-1} Z_{\alpha}; \quad c_k^{\dagger} = \frac{X_k - iY_k}{2} \prod_{\alpha=0}^{k-1} Z_{\alpha} \quad (2)$$

Với thành phần nhảy giữa hai vị trí i và $j > i$, ta thu được:

$$c_i^{\dagger} c_j + c_j^{\dagger} c_i \rightarrow \frac{1}{2} (X_i X_j + Y_i Y_j) Z_{i+1} Z_{i+2} \dots Z_{j-1} \quad (3)$$

Với thành phần tương tác tại chỗ được biểu diễn thành:

$$n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} \rightarrow \frac{1}{4} (I - Z_{2j}) (I - Z_{2j+1}) \quad (4)$$

2.2. Thuật toán lượng tử VQE và thiết kế ansatz hybrid

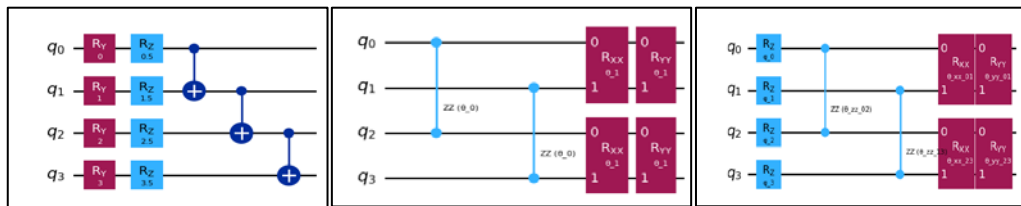
Thuật toán VQE tìm trạng thái nền thông qua việc tối thiểu hóa năng lượng trung bình dựa trên nguyên lý biến phân (Griffiths & Schroeter, 2018):

$$E_{var} = \langle \psi_{var} | H | \psi_{var} \rangle \geq E_{min} = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle \quad (5)$$

Trong nghiên cứu này, trạng thái Néel được chọn làm trạng thái tham chiếu vì nó phản ánh chính xác bản chất tương quan mạnh của mô hình Fermi-Hubbard (Poilblanc, 2014) ở cấu hình nửa đầy, giúp quá trình tối ưu hội tụ nhanh và đạt độ chính xác cao hơn các lựa chọn khởi tạo khác:

$$|\psi_{Néel}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle \quad (6)$$

Tiếp đó, ansatz được xây dựng từ các cổng lượng tử tham số hóa để tạo ra mức độ vướng víu cần thiết nhằm biểu diễn chính xác không gian trạng thái của hệ.



a) mạch ansatz HEA

b) ansatz HVA

c) ansatz kết hợp giữa HVA và HEA

Hình 2. Sơ đồ các mạch lượng tử

2.2.1. Ansatz HEA

HEA là mạch tham số gồm các lớp quay một qubit xen kẽ cổng vướng víu, thiết kế phù hợp kết nối phần cứng (Hình 2a) (Kandala et al., 2017). Với độ sâu p , mạch có dạng:

$$U_{\text{HEA}}(\theta) = \prod_{l=1}^p [U_{\text{ent}}^{(l)} \otimes_{i=1}^n R(\theta_{l,i})] \quad (7)$$

trong đó n là số qubit, $U_{\text{ent}}^{(l)}$ là lớp gây vướng víu thứ l thường được hiện thực bằng các chuỗi cổng controlled-Z, và phép quay một qubit tại vị trí i trong lớp l có dạng

$$R(\theta_{l,i}) = R_y(\theta_{l,i}^{(y)}) R_z(\theta_{l,i}^{(z)}) \quad (8)$$

với $R_y(\theta) = e^{-i\theta\sigma^y/2}$ và $R_z(\theta) = e^{-i\theta\sigma^z/2}$. HEA có ưu điểm là linh hoạt và dễ triển khai trên nhiều kiến trúc khác nhau, nhưng việc thiếu cấu trúc gắn với Hamiltonian bài toán khiến không gian tham số có thể quá lớn và dễ dẫn đến cao nguyên cần cỗi trong mạch sâu.

2.2.2. Ansatz HVA

HVA dựa trên thuật toán tối ưu xấp xỉ lượng tử và nguyên lý đoạn nhiệt (Farhi et al., 2014), như Hình 2b ansatz HVA được sử dụng mô phỏng phản tương tác tại chỗ thông qua cổng R_{ZZ} và số hạng nhảy thông qua R_{XX} R_{YY} , tận dụng cấu trúc Hamiltonian bài toán. Với $H = \sum_{i=1}^q H_i$, HVA có dạng:

$$|\psi_p\rangle = \prod_{l=1}^p \left(\prod_s \exp(-i\theta_{l,i} H_i) \right) |\psi_0\rangle \quad (9)$$

trong đó $\theta_{l,i}$ là tham số biến phân gắn với hạng tử H_i ở lớp l . Ansatz này bảo toàn đối xứng, thu hẹp không gian tối ưu, thường hội tụ nhanh và chính xác hơn HEA trên các bài toán có cấu trúc, nhưng có thể yêu cầu mạch sâu hơn (Park, 2024).

2.2.3. Hybrid ansatz HEA – HVA

Chúng tôi đề xuất ansatz Hybrid cho mô hình Fermi-Hubbard (Hình 2c), kết hợp HVA cho các hạng tử nhảy và tương tác tại chỗ với các lớp quay đơn qubit kiểu HEA nhằm tăng khả năng biểu diễn và điều chỉnh pha cục bộ. Ansatz độ sâu p có dạng:

$$|\psi(\theta)\rangle = \prod_{l=1}^p \left(U_{\text{sin}}^{(l)}(\alpha) U_{\text{hop}}^{(l)}(\phi) U_{\text{int}}^{(l)}(\gamma) \right) |\psi_{\text{Néel}}\rangle \quad (10)$$

trong đó $U_{\text{sin}}^{(l)}(\alpha)$ là lớp quay một qubit kiểu HEA, gồm các phép quay R_z trên từng qubit với tham số α , $U_{\text{hop}}^{(l)}(\phi)$ là lớp HVA cho các hạng tử nhảy, được xây dựng từ các toán tử $e^{-i\phi_{l(i,j)} H_{(i,j)}^{\text{hop}}}$, $U_{\text{int}}^{(l)}(\gamma)$ là lớp HVA cho các hạng tử tương tác tại chỗ $e^{-i\gamma_{l,i} H_i^{\text{int}}}$. Để cân bằng linh hoạt và số tham số, các liên kết đối xứng được gán cùng tham số trong mỗi lớp, từ đó giúp mở rộng không gian biểu diễn so với HVA thuần.

Để định lượng chi phí tài nguyên và khả năng triển khai trên phần cứng NISQ, chúng tôi thống kê số tham số biến phân, độ sâu mạch, số lớp p và số cổng 2-qubit của từng ansatz như trong Bảng 1.

Năng lượng trung bình của trạng thái thử được tính thông qua hàm chi phí

$$C(\vec{\theta}) := \langle \psi(\vec{\theta}) | H | \psi(\vec{\theta}) \rangle \quad (11)$$

trong đó $|\psi(\vec{\theta})\rangle$ là trạng thái lượng tử được tạo bởi mạch ansatz ứng với bộ tham số biến phân $\vec{\theta}(\alpha, \phi, \gamma)$. Sau mỗi vòng lặp, giá trị $C(\vec{\theta})$ được đưa vào bộ tối ưu cổ điển để cập nhật $\vec{\theta}$. Quá trình này được lặp lại cho đến khi $C(\vec{\theta})$ hội tụ về giá trị cực tiểu.

Bảng 1. Thống kê tài nguyên mạch của các ansatz (HEA, HVA, Hybrid) cho các cấu hình 4×1 , 2×2 và vòng 6 vị trí

	Ansatz	Số tham số	Độ sâu của mạch	Số lớp	Số cổng 2 qubit
4×1	HEA	64	17	4	28
	HVA	8	21	4	64
	Hybrid	72	25	4	64
2×2	HEA	64	17	4	28
	HVA	8	61	4	144
	Hybrid	80	41	4	144
6 vị trí	Hybrid	180	145	6	372

Sau khi ước lượng, hàm chi phí VQE và VQD trở thành bài toán tối ưu phi tuyến theo $\vec{\theta}$. Các bộ tối ưu trong VQA thường chia làm ba nhóm: dựa trên gradient, không đạo hàm, và chuyên biệt phần cứng. Nhóm gradient dùng quy tắc cập nhật như hạ gradient:

$$\theta_{n+1} = \theta_n - h \left. \frac{df}{d\theta} \right|_{\theta=\theta_n} \quad (12)$$

với h là tốc độ học. Phương pháp không đạo hàm dùng khi gradient khó tính hoặc kém tin cậy; nhóm chuyên biệt phần cứng tận dụng thành phần lượng tử (Singh et al., 2023).

Trong quá trình mô phỏng Fermi-Hubbard 2D, ánh xạ JW thường tạo ra các chuỗi toán tử Z kéo dài tại các liên kết nhảy dọc do các qubit tương ứng không nằm liền kề, làm tăng đáng kể độ sâu mạch. Để khắc phục và đảm bảo tuân thủ tính chất chống giao hoán của fermion khi hoán vị các qubit xa nhau, đồng thời, để giảm số lượng toán tử Z xuất hiện, hạn chế độ sâu mạch và đồng thời bảo toàn chính xác tính chất thống kê fermion của hệ chúng tôi sử dụng mạng lưới hoán vị fermionic với cổng FSWAP (Kivlichan et al., 2018).

Để đánh giá được hiệu suất của mạch chúng tôi sử dụng độ trung thực $\mathcal{F}$ giữa trạng thái được xây dựng bởi ansatz VQE $|\psi(\theta)\rangle$ thu được từ phép chéo hóa cổ điển:

$$\mathcal{F} = |\langle \psi_{gs} | \psi(\theta) \rangle|^2 \quad (13)$$

Đối với trạng thái cơ bản là không suy biến nếu độ trung thực $\mathcal{F} > 99.9\%$, chúng tôi xem như ansatz đã tái tạo thành công trạng thái cơ bản. Đối với mạch ansatz hybrid, độ trung thực đặc biệt quan trọng vì nó phản ánh trực tiếp chất lượng biểu diễn trạng thái của mạch. Hơn nữa, độ không trung thực $\epsilon = 1 - \mathcal{F}$ còn giới hạn sai lệch giữa giá trị trung bình từ ansatz và giá trị trung bình chính xác của trạng thái cơ bản theo bất đẳng thức:

$$|\langle O \rangle_{gs} - \langle O \rangle_{\theta}| \leq 2c(\sqrt{\epsilon(1-\epsilon)} + \epsilon) \quad (14)$$

với c là chuẩn toán tử của quan sát O (Beach et al., 2019).

2.3. Thuật toán VQD tính toán mức năng lượng kích thích thứ nhất

Để truy cập các mức kích thích, nhiều mở rộng của VQE đã được đề xuất như phương

pháp dưới không gian (SS-VQE), mở rộng dưới không gian lượng tử (QSE) hay các sơ đồ deflation (McClean et al., 2017; Nakanishi et al., 2019; Parrish et al., 2019; Stair et al., 2020). Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng biến thể (VQD) để xác định mức năng lượng kích thích thứ nhất (Higgott et al., 2019).

Trước tiên VQE được sử dụng để tối ưu bộ tham số $\vec{\theta}_0$ cho trạng thái cơ bản xấp xỉ $|\psi_0\rangle$ qua cực tiểu $\langle H \rangle$ (McClean et al., 2016; Peruzzo et al., 2014). Sau đó, VQD tìm trạng thái kích thích thứ nhất bằng cách tối ưu một bộ tham số mới $\vec{\theta}_1$ trên cùng ansatz nhưng với ràng buộc trực giao đối với trạng thái cơ bản gần đúng $|\psi(\vec{\theta}_0)\rangle$. Ràng buộc này được mã hóa dưới dạng hàm tử phạt trong hàm chi phí:

$$F_1(\vec{\theta}_1) = \langle \psi(\vec{\theta}_1) | H | \psi(\vec{\theta}_1) \rangle + \beta |\langle \psi(\vec{\theta}_1) | \psi(\vec{\theta}_0) \rangle|^2 \quad (15)$$

Trong đó, β là hệ số phạt điều chỉnh mức độ cường bức trực giao giữa trạng thái kích thích thử và trạng thái cơ bản xấp xỉ $|\psi(\vec{\theta}_0)\rangle$ (Higgott et al., 2019). Khi β đủ lớn, nghiệm cực tiểu của F_1 cho năng lượng xấp xỉ E_1 theo nguyên lý Rayleigh–Ritz (Higgott et al., 2019). Nghiệm $\vec{\theta}_1^* = \text{argmin}_{\theta_1} F_1(\vec{\theta}_1)$ cho ta giá trị:

$$E_1^{VQD} \approx \langle \psi(\vec{\theta}_1^*) | H | \psi(\vec{\theta}_1^*) \rangle \quad (16)$$

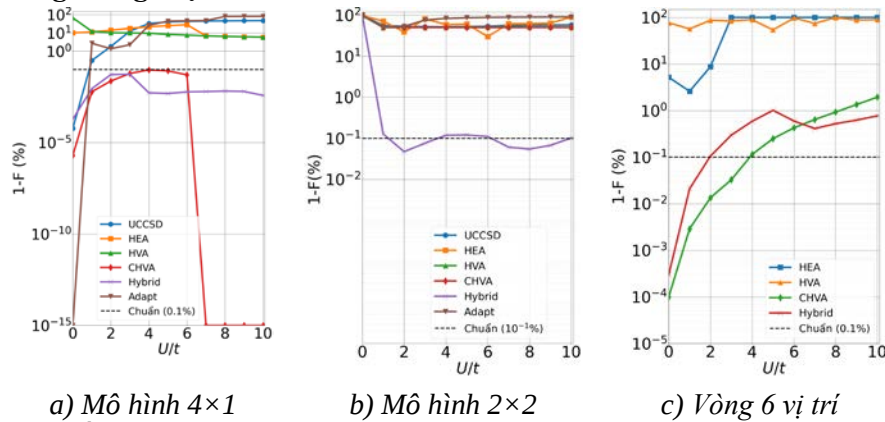
Trong phạm vi nghiên cứu này, chúng tôi chỉ xét bài toán ở mức mô phỏng số, do đó $|\langle \psi(\vec{\theta}_1) | \psi(\vec{\theta}_0) \rangle|^2$ được tính trực tiếp từ vector trạng thái thu được sau khi gán tham số cho mạch lượng tử.

Quy trình VQE–VQD được áp dụng trên ansatz hybrid HEA–HVA cho mô hình Fermi-Hubbard (Kandala et al., 2017; Wecker et al., 2015), và kết quả được so sánh với chéo hóa chính xác (Higgott et al., 2019; Nakanishi et al., 2019; Stair et al., 2020).

Về nguyên tắc, độ chính xác năng lượng bị giới hạn bởi độ bất định của trạng thái biến phân. Do đó, tương tự các nghiên cứu trước (Dev et al., 2025; McClean et al., 2016), chúng tôi làm tròn giá trị năng lượng trạng thái cơ bản đến bốn chữ số thập phân nhằm đảm bảo tính nhất quán và phù hợp với mức độ hội tụ của thuật toán.

3. Kết quả

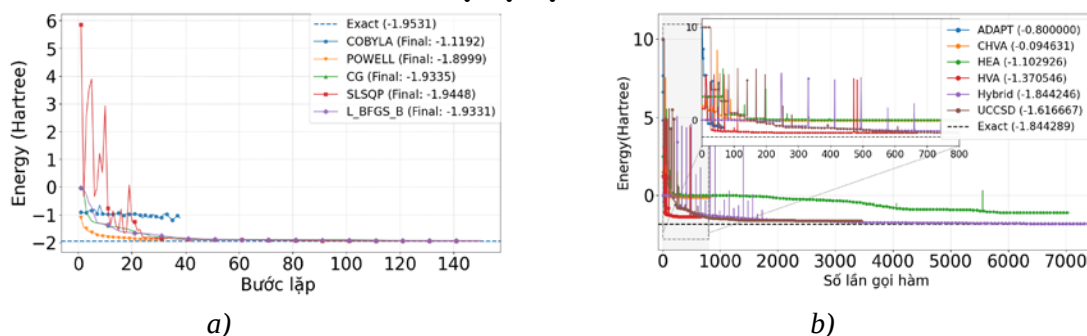
3.1. Độ không trung thực



Hình 3. Đối sánh độ không trung thực mô hình Fermi-Hubbard theo tỉ lệ ($U/t=0-10$) giữa các ansatz HEA, HVA, Hybrid, UCCSD, ADAPT-VQE, Compressed HVA và kết quả chính xác

Độ không trung thực phụ thuộc rõ rệt vào tham số tương tác U/t và kích thước hệ được thể hiện ở Hình 3. Với hệ 4×1 (Hình 3a), phần lớn các ansatz đều nhanh chóng bị bão hòa khi U/t tăng, với độ không trung thực vượt ngưỡng 0,1%, cho thấy khả năng biểu diễn còn hạn chế. Ngược lại, Hybrid HEA–HVA và Compressed HVA duy trì độ không trung thực dưới ngưỡng này trên toàn miền khảo sát. Trong đó, Hybrid HEA–HVA thể hiện tính ổn định cao với sai lệch cực đại khoảng 0,05%, trong khi Compressed HVA đạt độ chính xác tốt ở miền tương quan mạnh nhưng xuất hiện dao động ở vùng trung gian. Với hệ 2×2 (Hình 3b), tất cả các ansatz đều không mô tả được trạng thái suy biến tại $U/t = 0$. Khi U/t tăng, chỉ Hybrid HEA–HVA cho kết quả tiệm cận giá trị chuẩn, với độ không trung thực lớn nhất khoảng 0,12%, trong khi các ansatz khác tiếp tục bị bão hòa. Đối với hệ vòng 6 vị trí (Hình 3c), ansatz UCCSD và ADAPT – VQE không hội tụ nên không thu được kết quả, nguyên nhân sẽ được trình bày ở phần 3.3. Các ansatz còn lại như HEA và HVA vẫn bị bão hòa khi U/t tăng. Compressed HVA có xu hướng giảm độ chính xác ở miền tương quan mạnh, với độ không trung thực tăng lên khoảng 2%. Trong khi đó, Hybrid HEA–HVA duy trì hiệu năng tốt hơn, với sai lệch lớn nhất khoảng 0,8% và có xu hướng ổn định khi U/t tăng. Tổng thể, Hybrid HEA–HVA là ansatz cho kết quả ổn định và chính xác nhất trong cả ba hệ, đặc biệt là trường hợp 2×2 khi đây là ansatz duy nhất mô phỏng được trạng thái.

3.2. Khảo sát tối ưu hóa cổ điển và độ hội tụ



Hình 4. a) So sánh độ hội tụ của các thuật toán tối ưu cổ điển trong VQE cho mô hình Fermi-Hubbard 4×1 tại $U/t = 4$ (150 vòng lặp), đối chiếu với nghiệm chéo hóa chính xác, b) So sánh độ hội tụ năng lượng cho mô hình Fermi-Hubbard 2×2 tại $U/t = 5$ giữa các ansatz HEA, HVA, hybrid HEA – HVA, UCCSD, Compressed HVA, ADAPT – VQE với chéo hóa chính xác

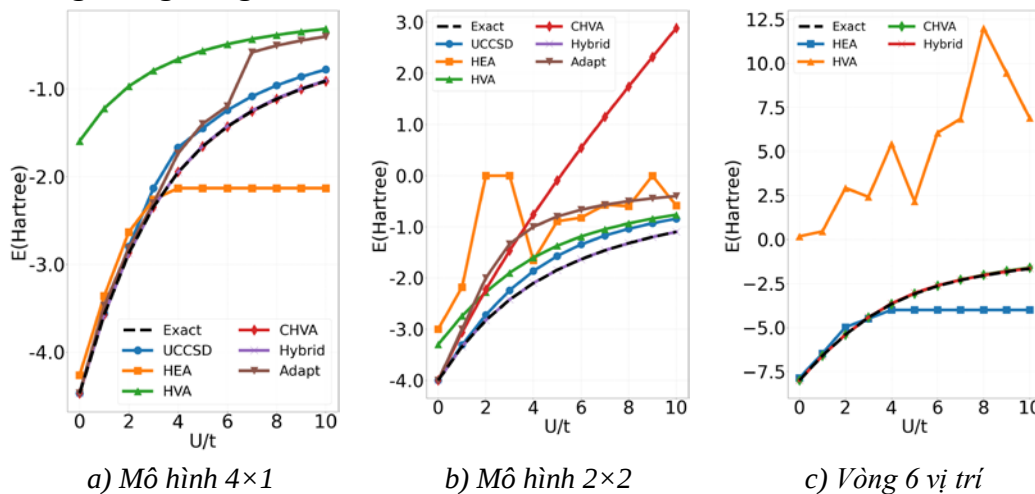
Bảng 2. Thống kê thời gian, số tham số của các ansatz ở mô hình 2×2 ($U/t = 5$)

2×2 ($U/t = 5$)	HEA	HVA	UCCSD	ADAPT - VQE	Hybrid	Compressed HVA
Số tham số	64	8	26	29	80	12
Thời gian (s)	279	12	5511	22	512	14

Hình 4a cho thấy sự khác biệt rõ rệt về tốc độ hội tụ và độ chính xác giữa các trình tối ưu. Powell hội tụ nhanh nhất (sau ~20 vòng lặp) nhưng bị kẹt ở mức năng lượng cao. CG và L-BFGS-B ổn định sau 30-40 vòng lặp nhưng vẫn còn sai lệch đáng kể. Ngược lại, SLSQP dù dao động mạnh ở giai đoạn đầu nhưng đạt mức năng lượng tiệm cận nghiệm tham chiếu tốt nhất sau khoảng 40 vòng lặp. Do đó, SLSQP được lựa chọn cho các mô phỏng tiếp theo.

Để đảm bảo hội tụ ổn định khi mở rộng sang các hệ phức tạp hơn (2×2 hoặc 6 vị trí), giới hạn tối ưu hóa được tăng lên 500–1000 vòng lặp tùy mô hình. Hình 4b cho thấy mạng 2×2 là trường hợp khó hơn rõ rệt so với mạng 4×1 . Một số ansatz như CHVA, HVA, UCCSD và ADAPT hội tụ nhanh ở giai đoạn đầu nhưng sớm bão hòa tại các mức năng lượng còn lệch đáng kể so với nghiệm chính xác, cho thấy khả năng biểu diễn hoặc khả năng thoát cực tiểu cục bộ còn hạn chế. HEA tuy linh hoạt nhưng vẫn chưa tái tạo tốt trạng thái cơ bản của hệ. Trái lại, ansatz Hybrid HEA–HVA tiếp tục giảm năng lượng một cách ổn định sau giai đoạn đầu và đạt giá trị cuối gần nghiệm chính xác nhất. Kết quả này cho thấy trong bài toán 2 chiều, ansatz hybrid thể hiện lợi thế theo nghĩa hiệu quả độ chính xác và chi phí, không hội tụ nhanh nhất theo số lần gọi hàm, nhưng cho nghiệm cuối tốt nhất và ổn định nhất. Kết quả này phù hợp với Bảng 2, khi Hybrid HEA–HVA có số tham số và thời gian tính toán lớn hơn (80 tham số, 512 s) nhưng đạt độ chính xác cao nhất. Ngược lại, HVA và CHVA có chi phí rất thấp nhưng bị hạn chế khả năng biểu diễn nên dễ bão hòa sớm. UCCSD có chi phí rất lớn nhưng hiệu quả không tương xứng, còn ADAPT-VQE đạt cân bằng chi phí–độ chính xác nhưng vẫn kém hybrid. Nhìn chung, tồn tại đánh đổi rõ rệt giữa chi phí và độ chính xác, trong đó hybrid là lựa chọn tối ưu cho bài toán 2×2 .

3.3. Năng lượng trạng thái cơ bản

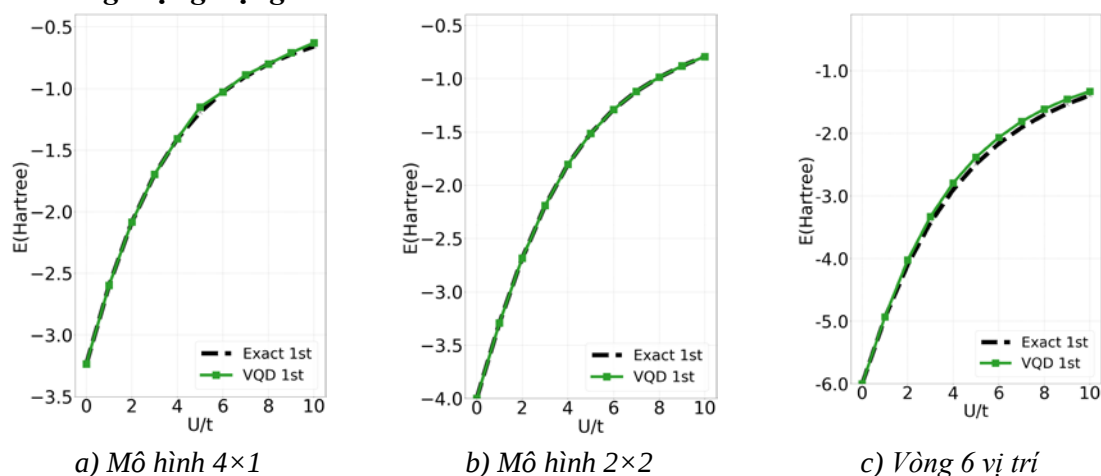


Hình 5. Đối sánh năng lượng trạng thái cơ bản theo tỉ lệ ($U/t=0 - 10$) giữa các ansatz HEA, HVA, Hybrid, UCCSD, ADAPT-VQE, Compressed HVA và kết quả chính xác

Kết quả năng lượng có xu hướng tăng khi U/t tăng từ 0 đến 10 như thể hiện ở Hình 5. Xu hướng này phản ánh đúng bản chất vật lý mô hình Fermi-Hubbard khi tương tác tăng năng lượng được đẩy lên cao. Với 4×1 (Hình 5a) Hybrid HEA – HVA ổn định toàn cục, trong khi Compressed HVA đạt độ chính xác cục bộ cao. Cụ thể, Hybrid duy trì sai số rất nhỏ và tăng gần như đơn điệu theo U/t , từ 0,00027% tại $U/t = 0$ lên khoảng 0,63% tại $U/t = 10$. Đáng chú ý là không xuất hiện bất kỳ điểm gãy hay dao động bất thường, điều này phản ánh tính tổng quát và độ bền vững của ansatz. Ngược lại ansatz Compressed HVA đạt độ chính xác gần như tuyệt đối tại nhiều điểm đặc biệt có thể kể đến như $U/t = 0$ và 8,

sai số gần như bằng 0, tại $U/t = 5$ sai số chỉ là 0,0001%. Nhìn chung sai số của Compressed HVA luôn duy trì dưới 0,3%, phần lớn là nhỏ hơn Hybrid HEA – HVA. Tuy nhiên điểm đáng chú ý là Compressed không duy trì được tính ổn định tuyệt đối như Hybrid, thể hiện qua sự dao động nhẹ của sai số giữa các điểm lân cận. Với cấu hình mạng vuông 2×2 (Hình 5b), năng lượng trạng thái cơ bản tăng dần khi U/t tăng từ 0 đến 10, phù hợp với xu hướng vật lý của mô hình Fermi-Hubbard khi tương tác đẩy tại chỗ ngày càng chi phối hệ. Trong số các ansatz được khảo sát, Hybrid HEA – HVA cho kết quả bám sát đường chính xác nhất trên toàn miền tham số. Cụ thể, sai số tương đối của Hybrid chỉ khoảng 0,000175% tại $U/t = 0$, tăng lên cực đại khoảng 0,135% tại $U/t = 4$, rồi giảm xuống còn khoảng 0,0033% tại $U/t = 5$. Điều này cho thấy ansatz Hybrid không chỉ tái hiện đúng xu thế năng lượng mà còn duy trì được độ chính xác cao một cách đồng đều trên toàn dải khảo sát. Ngược lại, các ansatz còn lại đều cho sai số lớn hơn rõ rệt; UCCSD vẫn còn sai số ở mức phần trăm, trong khi HEA, HVA, ADAPT – VQE và Compressed HVA lệch đáng kể so với nghiệm chính xác trên phần lớn miền U/t . Như vậy, đối với hệ 2×2 , Hybrid HEA – HVA là ansatz cho kết quả đúng và ổn định nhất trong số các phương pháp được so sánh. Với hệ vòng 6 vị trí (Hình 5c), Hybrid HEA – HVA vẫn là ansatz cho kết quả ổn định nhất, sai số tăng từ khoảng 0,00015% tại $U/t = 0$ lên khoảng 1,10% tại $U/t = 10$. Compressed HVA đạt độ chính xác cao hơn ở một số điểm trong miền U/t nhỏ, nhưng sai số tăng nhanh ở miền tương tác mạnh và đạt khoảng 3,49% tại $U/t = 10$. Trong khi đó, HEA và HVA đều không còn phù hợp với hệ này do sai số lớn trên phần lớn miền khảo sát, đặc biệt HVA lệch rất xa nghiệm chính xác khi U/t tăng. UCCSD và ADAPT-VQE không hội tụ để thu được năng lượng và độ trung thực, chủ yếu do không gian Hilbert lớn kết hợp với tương quan mạnh vượt quá khả năng biểu diễn của ansatz trong độ sâu mạch giới hạn, đồng thời làm xuất hiện bề mặt tối ưu phức tạp gây khó khăn cho quá trình hội tụ. Như vậy, Hybrid HEA-HVA cho thấy sự cân bằng tốt giữa độ chính xác và tính ổn định trên nhiều cấu hình và miền tương tác, đặc biệt hiệu quả trong các hệ lớn và tương quan mạnh.

3.4. Năng lượng trạng thái kích thích thứ nhất



Hình 6. Năng lượng trạng thái kích thích thứ nhất của các mạng mô hình Fermi-Hubbard theo tỉ lệ (U/t từ 0 đến 10) sử dụng ansatz Hybrid HEA – HVA

Quan sát kết quả mô phỏng trên ba hệ 4×1 , 2×2 và vòng 6 vị trí trong dải U/t từ 0 đến 10 cho thấy ansatz Hybrid HEA–HVA có khả năng tái hiện xu hướng năng lượng của trạng thái kích thích thứ nhất so với chéo hóa chính xác. Trong các hệ này, năng lượng tăng theo U/t và đường cong từ VQD bám sát đường chính xác, đặc biệt ở vùng tương tác yếu ($U/t < 4$). Đối với hệ 4×1 (Hình 6a), năng lượng trạng thái kích thích thứ nhất được mô phỏng với độ chính xác rất cao trong vùng tương tác yếu, với sai số từ khoảng 0,0003% tại $U/t = 0$ đến 0,64% tại $U/t = 4$, nhưng tại $U/t = 5$, sai số tăng đột ngột lên khoảng 4,20%, phản ánh rằng trong vùng tương quan trung gian, bề mặt năng lượng trở nên phức tạp hơn, dẫn đến khó tối ưu hơn. Trong khoảng $U/t = 6–10$, sai số giảm nhẹ nhưng vẫn duy trì ở mức tương đối, với giá trị lớn nhất khoảng 3,60% tại $U/t = 10$. Với hệ 2×2 (Hình 6b), kết quả thể hiện độ chính xác vượt trội và ổn định trên toàn dải U/t ; mặc dù hệ tồn tại trạng thái suy biến tại $U/t = 0$, sai số giữa kết quả VQD và chéo hóa chính xác vẫn duy trì ở mức rất thấp, từ 0,00005% tại $U/t = 0$ đến tối đa chỉ khoảng 0,08% tại $U/t = 9$, không xuất hiện hiện tượng đột biến hay mất ổn định. Trong khi đó, với hệ vòng 6 vị trí (Hình 6c), xu hướng vật lý của năng lượng trạng thái kích thích được tái hiện chính xác trên toàn miền $U/t = 0–10$, với sai số rất nhỏ tại $U/t = 0$ ($\sim 0,0001\%$), nhưng tích lũy rõ rệt khi hệ đi vào vùng tương quan trung gian và mạnh, đạt khoảng 4,22% tại $U/t = 5$ và cực đại 5,22% tại $U/t = 8$. Nguyên nhân chính gây sai số trong cả ba hệ là hạn chế biểu diễn của ansatz (4 lớp cho 4×1 và 2×2 , 6 lớp cho vòng 6 vị trí), chưa đủ sâu để bao phủ toàn bộ không gian Hilbert, cùng với sự gia tăng độ vướng víu khi chuyển từ tương tác yếu sang mạnh. Để cải thiện độ chính xác thì có thể áp dụng một số hướng: (i) tăng số lớp cho ansatz (ii) tinh chỉnh để ansatz Hybrid có thể thích nghi (iii) khai thác tính đối xứng của hệ.

4. Kết luận

Các hệ electron tương quan mạnh được mô phỏng thành công bằng cách ansatz lai Hybrid HEA–HVA cho VQE. Phương pháp này được kiểm chứng trên ba hình học mạng tiêu biểu: chuỗi 1D 4×1 , mạng 2D 2×2 và vòng 6 vị trí, tái tạo tốt năng lượng trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thấp nhất, đồng thời ổn định trước thay đổi hình học mạng và điều kiện biên. Sự kết hợp tính biểu cảm của HEA với cấu trúc vật lý trong HVA mang lại cân bằng hiệu quả giữa độ chính xác và độ phức tạp mạch, giảm không gian tham số cần tối ưu và phù hợp với các giới hạn của kỉ nguyên NISQ. Ngoài ra, ansatz nắm bắt đồng thời tính cục bộ của tương tác Coulomb và sự lan truyền lượng tử của electron hai yếu tố then chốt trong các hệ Hubbard và vật liệu tương quan mạnh. Phương pháp mở ra hướng tiếp cận hứa hẹn cho mô phỏng các hệ lớn hơn và trong điều kiện thực tế có nhiều.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Arovas, D. P., Berg, E., Kivelson, S. A., & Raghu, S. (2022). The hubbard model. *Annual Review Of Condensed Matter Physics*, 13(1), 239-274. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031620-102024>
- Beach, M. J. S., Melko, R. G., Grover, T., & Hsieh, T. H. (2019). Making trotters sprint: A variational imaginary time ansatz for quantum many-body systems. *Physical Review B*, 100(9), 094434. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.094434>
- Bethe, H. (1931). Zur theorie der metalle: I. Eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift für Physik*, 71(3), 205-226. <https://doi.org/10.1007/BF01341708>
- Cai, Z. (2020). Resource Estimation for Quantum Variational Simulations of the Hubbard Model. *Physical Review Applied*, 14(1), 014059. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.14.014059>
- Claudino, D. (2022). The Basics of Quantum Computing for Chemists. *International Journal of Quantum Chemistry*, 122(23), e26990. <https://doi.org/10.1002/qua.26990>
- Dagotto, E. (2005). Complexity in strongly correlated electronic systems. *Science*, 309(5732), 257-262. <https://doi.org/10.1126/science.1107559>
- Dev, M., Behera, B. K., Vyas, V., & Panigrahi, P. K. (2025). Excitation Gaps in the Fermi-Hubbard Model via Variational Quantum Eigensolver. arXiv preprint arXiv:2508.12307.
- Devadas, R. M., & Sowmya, T. (2025). Quantum machine learning: A comprehensive review of integrating AI with quantum computing for computational advancements. *MethodsX*, 14, 103318. <https://doi.org/10.1016/j.mex.2025.103318>
- Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014). A Quantum Approximate Optimization Algorithm. arXiv preprint arXiv:1411.4028.
- Fradkin, E., Kivelson, S. A., & Tranquada, J. M. (2015). Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 87(2), 457-482. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.457>
- Georges, T. N., Bothe, M., Sünderhauf, C., Berntson, B. K., Izsák, R., & Ivanov, A. V. (2025). Quantum simulations of chemistry in first quantization with any basis set. *npj Quantum Information*, 11, 55. <https://doi.org/10.1038/s41534-025-00987-1>
- Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/9781316995433>
- Grover, L. K. (1996). A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, 212-219. <https://doi.org/10.1145/237814.237866>
- Gulacsi, Z. (2025). Jordan-Wigner transformation constructed for spinful fermions at spin-1/2 in two dimensions. *Philosophical Magazine*, 105(14), 794-812. <https://doi.org/10.1080/14786435.2025.2465731>
- Higgott, O., Wang, D., & Brierley, S. (2019). Variational quantum computation of excited states. *Quantum*, 3, 156. <https://doi.org/10.22331/q-2019-07-01-156>
- Hubbard, J. (1963). Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276(1365), 238-257. <https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204>
- Iskakov, S., Katsnelson, M. I., & Lichtenstein, A. I. (2024). Perturbative solution of fermionic sign problem in quantum Monte Carlo computations. *npj Computational Materials*, 10(1), 36. <https://doi.org/10.1038/s41524-024-01221-w>

- Jha, N., Parakh, A., & Subramaniam, M. (2025). Quantum Key Distribution: Bridging Theoretical Security Proofs, Practical Attacks, and Error Correction for Quantum-Augmented Networks. arXiv preprint arXiv:2511.20602.
- Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K., Takita, M., Brink, M., Chow, J. M., & Gambetta, J. M. (2017). Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 549(7671), 242-246. <https://doi.org/10.1038/nature23879>
- Kivlichan, I. D., McClean, J., Wiebe, N., Gidney, C., Aspuru-Guzik, A., Chan, G. K.-L., & Babbush, R. (2018). Quantum simulation of electronic structure with linear depth and connectivity. *Physical Review Letters*, 120(11), 110501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.110501>
- Kumar, M., & Mondal, B. (2025). A brief review on quantum key distribution protocols. *Multimedia Tools and Applications*, 84(27), 33267–33306. <https://doi.org/10.1007/s11042-024-20535-x>
- LeBlanc, J. P. F., Antipov, A. E., Becca, F., Bulik, I. W., Chan, G. K.-L., Chung, C.-M., Deng, Y., Ferrero, M., Henderson, T. M., Jiménez-Hoyos, C. A., Kozik, E., Liu, X.-W., Millis, A. J., Prokof'ev, N. V., Qin, M., Scuseria, G. E., Shi, H., Svistunov, B. V., Tocchio, L. F., . . . Gull, E. (2015). Solutions of the Two-Dimensional Hubbard Model: Benchmarks and Results from a Wide Range of Numerical Algorithms. *Physical Review X*, 5(4), 041041. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.041041>
- McClean, J. R., Boixo, S., Smelyanskiy, V. N., Babbush, R., & Neven, H. (2018). Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. *Nature Communications*, 9(1), 4812. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-07090-4>
- McClean, J. R., Kimchi-Schwartz, M. E., Carter, J., & de Jong, W. A. (2017). Hybrid quantum-classical hierarchy for mitigation of decoherence and determination of excited states. *Physical Review A*, 95(4), 042308. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.042308>
- McClean, J. R., Romero, J., Babbush, R., & Aspuru-Guzik, A. (2016). The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. *New Journal of Physics*, 18(2), 023023. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/2/023023>
- Montanaro, A., & Stanisic, S. (2020). Compressed variational quantum eigensolver for the Fermi-Hubbard model. arXiv preprint arXiv:2006.01179.
- Nakanishi, K. M., Mitarai, K., & Fujii, K. (2019). Subspace-search variational quantum eigensolver for excited states. *Physical Review Research*, 1(3), 033062. <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.1.033062>
- Orús, R., Mugel, S., & Lizaso, E. (2019). Quantum computing for finance: Overview and prospects. *Reviews in Physics*, 4, 100028. <https://doi.org/10.1016/j.revip.2019.100028>
- Park, C.-Y. (2024). Efficient ground state preparation in variational quantum eigensolver with symmetry-breaking layers. *APL Quantum*, 1(1), 016101. <https://doi.org/10.1063/5.0186205>
- Parrish, R. M., Hohenstein, E. G., McMahon, P. L., & Martínez, T. J. (2019). Quantum computation of electronic transitions using a variational quantum eigensolver. *Physical Review Letters*, 122(23), 230401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.230401>
- Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M.-H., Zhou, X.-Q., Love, P. J., Aspuru-Guzik, A., & O'Brien, J. L. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, 5(1), 4213. <https://doi.org/10.1038/ncomms5213>
- Poiblanc, D. (2014). Entanglement Hamiltonian of the quantum Néel state. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2014(10), P10026. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2014/10/P10026>
- Rietsche, R., Dremel, C., Bosch, S., Steinacker, L., Meckel, M., & Leimeister, J.-M. (2022). Quantum computing. *Electronic Markets*, 32(4), 2525–2536. <https://doi.org/10.1007/s12525-022-00570-y>

- Sachdev, S., Sengupta, K., & Girvin, S. M. (2002). Mott insulators in strong electric fields. *Physical Review B*, 66(7), 075128. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.075128>
- Shor, P. W. (1994). Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. In *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 124–134. <https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365700>
- Singh, H., Majumder, S., & Mishra, S. (2023). Benchmarking of different optimizers in the variational quantum algorithms for applications in quantum chemistry. *The Journal of Chemical Physics*, 159(4), 044117. <https://doi.org/10.1063/5.0161057>
- Stair, N. H., Huang, R., & Evangelista, F. A. (2020). A Multireference Quantum Krylov Algorithm for Strongly Correlated Electrons. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16(4), 2236–2245. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b01125>
- Wecker, D., Hastings, M. B., & Troyer, M. (2015). Progress towards practical quantum variational algorithms. *Physical Review A*, 92(4), 042303. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.042303>
- Yamada, S., Imamura, T., & Machida, M. (2005). 16.447 tflops and 159-billion-dimensional exact-diagonalization for trapped fermion-hubbard model on the earth simulator. SC'05: Proceedings of the 2005 ACM/IEEE Conference on Supercomputing, Washington, DC, USA. <https://doi.org/10.1109/SC.2005.1>

QUANTUM SIMULATION OF THE FERMI-HUBBARD MODEL USING VARIATIONAL QUANTUM ALGORITHMS WITH A HYBRID HEA–HVA ANSATZ

Pham Van Anh¹, Ho Xuan Nhat¹, Tran Minh Duc¹, Pham Dang Quang¹,
Dung Van Nhat Tan¹, Nguyen Quang San², Dung Van Lu^{1*}

¹Faculty of Physics and Chemistry, The University of Danang, University of Science and Education, Vietnam

²School of Engineering and Technology – Hue University, Vietnam

*Corresponding author: Dung Van Lu – Email: dvlu@ued.udn.vn

Received: January 07, 2026; Revised: April 14, 2026; Accepted: April 28, 2026

ABSTRACT

Simulating the Fermi-Hubbard model is a central challenge in condensed-matter physics and often exceeds the capabilities of classical computational methods as system size increases. This study proposes a variational quantum simulation workflow employing VQE and VQD to estimate the ground-state and first excited-state energies. The hybrid HEA–HVA ansatz combines the advantages of both approaches to balance state-representation capacity against quantum-circuit resource requirements. Numerical simulations were conducted on three lattice configurations—a 4×1 chain, a 2×2 square lattice, and a six-site ring—with the interaction ratio U/t ranging from 0 to 10. The results show that the hybrid HEA–HVA ansatz converges reliably and accurately reproduces both the ground-state and lowest excited-state energies. Compared with the individual ansatzes, the hybrid structure produces smaller or comparable energy deviations, particularly in the intermediate-to-strong interaction regime, while maintaining a circuit depth compatible with noisy intermediate-scale quantum (NISQ) devices. These findings highlight the potential of hybrid ansatzes for simulating strongly correlated fermionic systems and provide a foundation for extending the approach to larger systems with more complex energy spectra.

Keywords: Fermi-Hubbard model; quantum simulation; variational quantum algorithm (VQA); variational quantum deflation (VQD); variational quantum eigensolver (VQE)