1. 결과 혹은 FMO 방식이 유효한지.

텍스트, 라인, 도표, 그래프이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

**분홍색** : FMO를 사용하지 않고, 페르미레벨 근처의 16개의 스핀오비탈을 (실험에 사용한 큐비트수와 같은 큐비트수) 고려한 VQE에서의 파울리행렬로 표현된 행렬을 대각화하여 얻은 결과

**빨간색** : FCI 계산결과. , Active space를 마찬가지로 제한적으로 적용.

**파란색** : CCSD 결과.

**노란색** : FMO 방식을 따르되, 각 monomer, Dimer에서의 에너지를 VQE가 아닌, 파울리행렬을 대각화 해서 얻은 결과. (= 즉, VQE에서 최적화 과정이 완벽히 이루어졌을떄 얻을 수 있는 가장 optimal한 결과)

초록색 : 이번 연구에서 제시한 VQE를 통해 얻은 결과.

기하학적 구조의 변화에 따른 에너지의 변화보다, 최적화 정도에 따른 에너지 차이가 더 영향이 크게 나타난다고 생각했다. 산화상태에 따라서 전체 분자의 에너지는 어떻게 될지 모르지만, 적어도 Dimer에 대해서는, 기하학적인 거리가 분명 증가함에따라서 에너지 자체도 증가해야하는데, 그런 일관성을 보이지 않았다. 이러한 이유인지, 초록색 그래프, 즉 우리의 연구의 결과만을 그려보았을때, 분명 FMO를 적용하지 않은 데이터와는 큰 차이를 보인다.

이 문제는 x=0.66, 0.75 에서의 데이터를 수정하면서 드러나게 되었다. 기존의 데이터는 우연일지 하필일지 x=0.66 의 데이터는 하나의 Dimer를 제외한 다른 Dimer의 데이터가 덮어씌워져 있었고, x=0.75 에서의 데이터는 Co=O 의 데이터가 덮어씌워져 있었다. 하지만, 이번에 세미나를 진행하며 그 오류를 찾았고, 원본 데이터를 찾아서 데이터를 그려본것이 위의 그림(초록색)이다.

그런데, 0.66, 0.75의 데이터가 기존의 개형과는 좀 다른양상을 보이는것 같았다.

그래서 첫 접근은 분명 저 데이터가 튀는값, 혹은 최적화가 잘 안되었기 때문에 저런 그래프가 나왔다고 생각하여, 저부분에 대해서 실험을 다시해야겠다는 생각을 했다.

그런데, 이 과정을 의논하면서, 근본적인 생각을 하게 되었다.

이게 음.. 최적화의 유무가 좋은데이터와 안좋은 데이터의 차이를 만든다고 하는게 그게 맞을까? 그러한 관점에서, 그래 그럼 최적화를 어떻게든 조절해서 정말 optimal한 값을 찾아낼 수도 있겠지. 라는 생각을 하게 되었다.

그럼 이제 자연스러운 흐름으로, 그럼 그 optimal한 계산값은 정말 유의미 할까? 를 생각하게 되면서 그 optimal한 값, 즉 시스템의 Hamiltonian을 대각화로 해결한 값을 그래프에 그려보았다. 그게 바로 **노란색** 그래프이다. 근데, 딱 그리고 보니까? 이게 우리 실험이 안된건 아니다. 분명 그 optimal한 값을 따라간것은 맞다. 근데 그 optimal 한 값이 뭔가 이상하네?

그럼 이제 생각할 수 있는건, 우리의 FMO방식이 분명 무언가 잘못된건가? 라고 생각하게된다.

그 문제가 어떤것에 기인하던, 일단 실험은 다시 해야하고,

그 실험을 어떻게 다시할까에 대해서는 좀 깊은 생각을 해봐야할것이다.

1. 일단 지금의 결과를 잘 해석한다.

뭐 저 numpy minimum eigensolver 푼거 자체가 이상하니까. VQE라고하는것은 괜찮은 과정인가?

아 모르곘네 잘 해석을 못하겠음..

1. 다시한다.

다시할거, 기왕할거 좀더 좋은 데이터 얻도록 해보자.

* 최적화과정 좀더 다듬어 보고(Ex. 파라미터의 초기값?)
* 화학적인 스토리 좀더 따라가 보기

Remark.

1. 저 Classical 값은 맞냐?
2. 일단 큐비트가 20개 넘어가니까, 단순 행렬 대각화로는 못푼다.

이러한 점에서 분명 VQE는 의미가 있긴 하네.

2.

**New 셀링 포인트.**

막상 뭔가 저렇게 뽑아보니까 또 할 이야기가 있어보인다.

1. 일단. 같은 조건, 그니까 같은 큐비트수를 사용했다고 할때 기존의 VQE보다 훨씬 더 좋은 결과를 보이는건 맞다.
2. CCSD또한, 내일 확인해봐야겠지만, 만약 비슷하게 Active-Core를 사용한다고 하면, 핑크색 VQE랑 아주 비슷한(0.01Ha) 정도로 계산되는것 같다.

그래서일단 어떻게 팔아야할지는 모르겠지만, 일단 그런 그래프를 하나 넣는건 좋을것 같다. FCI 랑 CCSD를 같은 Active-space를 걸고 계산해본 그래프를 그려보는건 필요할것이다. 그랬을때 일단 CCSD와 통짜 VQE보다는 낮은에너지를 계산하는건 확인 했으니까(0.66 제외) 거기서도 일단 할 이야기는 있다. FCI나 CCSD 에서 고려하는건 전체 분자의 관점에서 페르미레벨에 가까운 16개의 스핀오비탈인데 FMO 에서는 이게 각 Dimer에서 그게 고려가 되기때문에 더 좋은 결과를 보일 수 도 있다.

그리고 그럼 Classical 하게 모든 Dimer의 에너지를 계산해서 FMO를 적용해본 계산을 넣을 수도 있겠네. 그랬을때도 저 FMO들의 개형을 따른다면, 어 그렇다면 FMO 방식에서 기인한 문제일테고, 그때는 1)원자 하나를 조각으로 취급했기 때문에, 2)헤밀토니안의 외부 전기장항 둘중 하나의 문제이지 않을까 싶다. 그러면 그런 오차에 대해서 말 할 게 있을것이다.

그리고 또하나. FCI던, CCSD던 가능한 Cost를 풀 가용해서 계산했을때의 에너지도 구할 수 있으면, 뭔가 그거와 관련해서도 할 이야기가 있겠다. 이거는 확인해봐야겠지만, FMO를 사용했을때 저 0.78에서 굴곡? 혹은 극소점이 있는데, 이게 만약 더 좋은 시뮬레이터를 사용했을때도 저러한 개형이 나온다 라고하면 베스트. 우리가 할 이야기가 훨씬 많아지지. 그래서 일단 위에

Active-Space

그니까 클래시컬도 계산할때 Core 맞춰서 계산해야지.

그래야 뭔가 이야기가 하기 더 좋지.

같은 Active-space 에서 비교하나.

저 클래시컬 시뮬레이터로 최대한 쎄게 돌렸을때도 저 굴곡이 나온다면?

이거는 베스트.

근데 안나온다 라면 뭐 다른식으로 스토리를 잡아봐야겠지./

같은, (제한도ㅓㅣㄴ) 큐비트 내에서 FMO 방식이 더 정확한 계산을 할 수 있는건 맞음.

이거랑 비슷한 결과를 얻기 위해서는

그니까 이정도 얻을려면 몇개 필요한데(고전적으로던 뭐던0

근데 우리는 줄이고도 잘 했다.

-> 이애기 할려면 좀 잘 된 클래시컬 계산이 있ㄲ으면 좋다.