

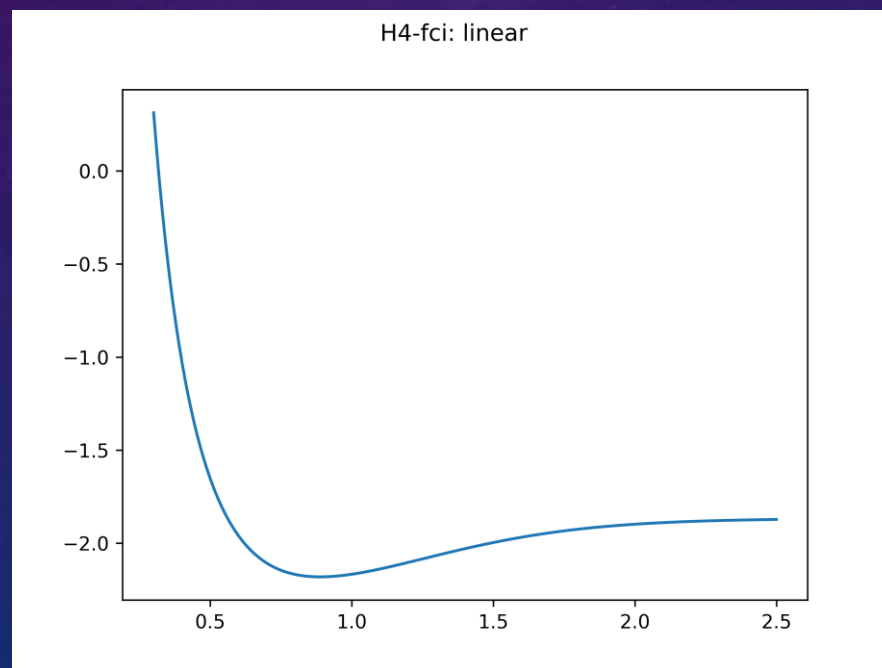


模拟含噪环境下的变分量子算法 求解H4分子基态能量

队名: Quiscus

问题描述

- 模拟含噪量子真机的采样工作方式，运行VQE算法求解H4分子基态能量



不同键长的H4分子基态能量真值

解决方案

- H4分子的几何构型 \Rightarrow Pauli-哈密顿量矩阵
 - 玻恩-奥本海默近似、二次量子化、Hartree-Fock 方法、Jordan-Wigner 变换
- Rayleigh-Ritz 不等式

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \langle U(\theta) | \hat{H} | U(\theta) \rangle$$

- VQE: 选定含参线路 $U(\theta)$, 最小化其线路拟设态在目标哈密顿量 H 上的期望, 此时
 - 期望值即基态能量
 - 拟设态即基态表示

哈密顿量近似简化

- X-Y合并近似
 - 哈密顿量中存在大量相似Pauli串
 - 系数相同、期望相同，仅字母X-Y对偶

- X-Y替换近似 (更激进)

- 所有Y全部替换为X

- 舍去系数小项 $1e-2$

```
coeff= 0.026958030271018913 term=[Y0 X1 X4 Y5] exp=-0.11383608391097913
coeff= 0.026958030271018913 term=[X0 Y1 Y4 X5] exp=-0.11383608391097913
coeff=-0.026958030271018913 term=[Y0 Y1 X4 X5] exp= 0.10745618864662454
coeff=-0.026958030271018913 term=[X0 X1 Y4 Y5] exp= 0.10745618864662454
coeff= 0.011388105812468949 term=[X0 Z1 Y2 Y4 Z5 X6] exp=-0.0271190340289691
coeff= 0.011388105812468949 term=[Y0 Z1 X2 X4 Z5 Y6] exp=-0.02711903402896931
coeff= 0.02441822802586467 term=[X0 Z1 X2 X4 Z5 X6] exp=-0.04584945651403473
coeff= 0.02441822802586467 term=[Y0 Z1 Y2 Y4 Z5 Y6] exp=-0.04584945651403455
coeff= 0.01303012221339572 term=[X0 Z1 X2 Y4 Z5 Y6] exp= 0.028729146940606864
coeff= 0.01303012221339572 term=[Y0 Z1 Y2 X4 Z5 X6] exp= 0.028729146940606683
```

- Pauli 串数量: $184 \rightarrow 102/66$ (44.57/64.13%↓)

拟设选择

- 基本结构: HAE(RY, depth=3)
- 迭代优化-剪枝, 减少门的数量
 - $E = -2.13818$ (err: 1.30%)

HF态 →

00001111>:	0.9677106263678632
00110011>:	-0.18768784145590353
01101001>:	0.07892321707925219
10010110>:	0.07892321707925219
00111100>:	-0.06500319468952202
11001100>:	-0.052037940497991805
01100110>:	-0.048611561597010695
10011001>:	-0.04861156159701068
11000011>:	-0.0416976983518129
01011010>:	-0.03031165548224152
10100101>:	-0.030311655482241504
11110000>:	0.021663372022213884
00011110>:	0.005759131529488659
00101101>:	-0.005759131529488631
01001011>:	0.004410107871199615
10000111>:	-0.004410107871199616
11010010>:	0.0037101578490584645
11100001>:	-0.003710157849058464
01111000>:	0.0026251185155691174
10110100>:	-0.0026251185155691152

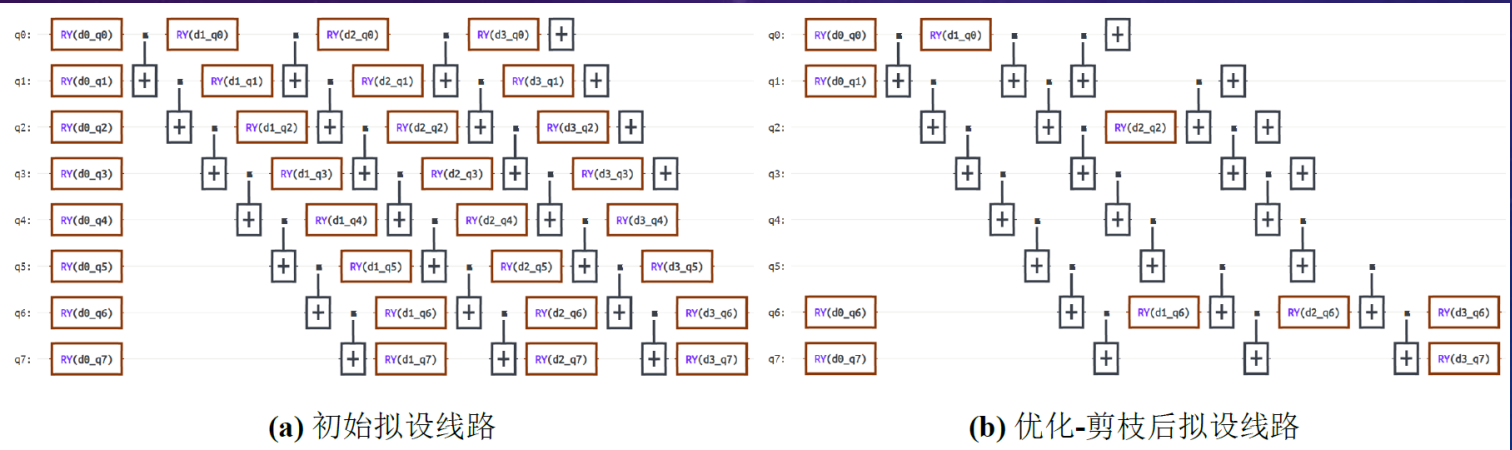
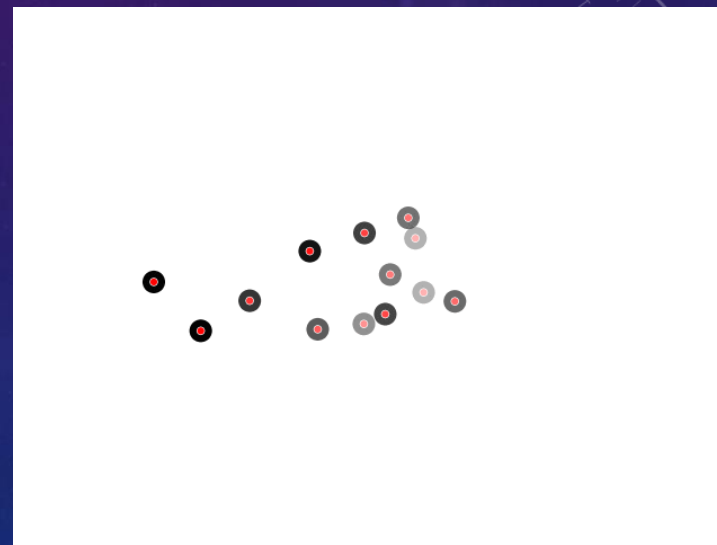


图 1 拟设线路设计

态矢真值

基于预训练-微调的参数优化

- 分子几何构型相似 \Leftrightarrow 振幅项相同、幅值相近
- 预训练: Basin Hopping 算法
 - 随机扰动 + 局部优化
 - 最初用于寻找最低能量分子结构
- 微调: Adam 优化器, $lr=1e-4$

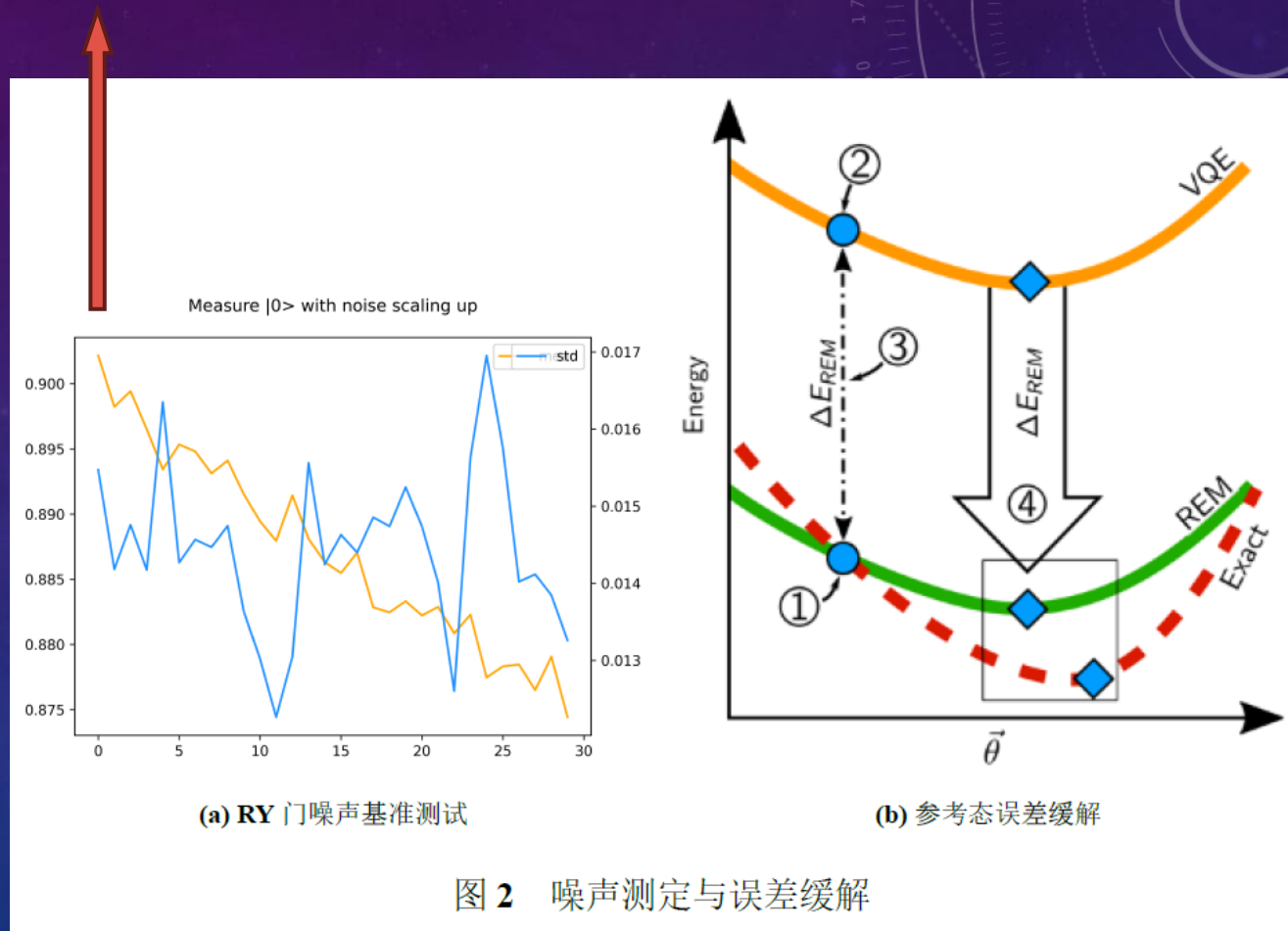


Basin_Hop_Lj13.gif

误差缓解后处理

- 读出误差缓解(REM)
 - RY门噪声测定
 - 线性放缩
- 零噪声外插值(ZNE)
 - 噪声随硬件数量线性放大
- 参考态误差缓解(RSEM)
 - 噪声独立于参数取值
 - $E(U(\hat{\theta})) - E(U(0)) = E - E_0$
 - 零参考态真值 E_0 已知
 - HF线路 + Z-Only哈密顿量 + 上下舍入到1

$$y = -0.001295813123288742 * x + 0.8997612902876868$$



实验结果

- HAE(RY,3) 上存在一个极优解
- REM有效; RSEM比ZNE有效

表 1 实验结果

本地分数 ↑	提交分数 ↑	说明
1.035	<u>0.5226</u>	baseline, trim coeff=1e-3, shot=30
1.334	0.574	HEA(RY), trim coeff=1e-3, shots=100
2.360	1.0077	HF, trim coeff=1e-3, shots=100
3.908	3.826	HEA(RY), trim coeff=1e-3, shots=100, n_meas=10
4.519	4.2442	HEA(RY)_no_HF, trim coeff=1e-3, shots=100, n_meas=10
6 ~ 63	27.9413	HF, Z_only, shots=10, n_meas=10
14.740	15.4219	HF, Z_only (+exp_fix), shots=100 (exactly E_{HF})
15.317	17.0523	HEA(RY), depth=3, shots=100
8.426	13.4319	HEA(RY), depth=3, shots=500
17.266	19.3466	HEA(RY), depth=3, shots=1000
16.958	18.6189	HEA(RY), depth=3, shots=3000
7.924 ~ 87.44	9.6134 ~ 25.224	HEA(RY, 3), init=randn, optim=Adam, shots=1000
9 ~ 33	15.9935 ~ 47.1661	HEA(RY, 3), init=randn, optim=Adam, shots=10000, combine_XY, rescaler
8.038 ~ 26.389	32.0759 ~ 127.9223	HEA(RY, 2), init=randn, optim=Adam, shots=1000, combine_XY, rescaler
203.663	12.5186 ~ 3472.2812	HEA(RY, 3), init=pretrained, optim=Adam(lr=1e-4), shots=1000, combine_XY, rescaler

总结：我们的工作

- 哈密顿量近似简化
 - 拟设选择
 - 基于预训练-微调的参数优化
 - 误差缓解后处理
-
- ★ 结果：平均约 244.76 分 / 最高 3472.2812 分



谢谢观看

模拟含噪环境下的变分量子算法求解H4分子基态能量

队名: Quiscus