

## QProjects: Simulating Molecules using VQE in Qiskit

کد پروژه: #ir\_qproject101\_5

عنوان:

**Title:** A survey for Variational Quantum Eigensolver (VQE) as a promising quantum algorithm in NISQ era and beyond.

سطح پروژه: متوسط

تعداد اعضای مورد نیاز گروه: (۲ تا ۳ نفر)

مربی دوره: عباس (امید) حساس فر / Abbas (Omid) Hassasfar

پیش نیازها: محاسبات کوانتومی / آشنایی با کیسکیت / آشنایی مقدماتی با مکانیک کوانتومی

چکیده فارسی:

یکی از کاربردهای مهمی که محاسبات کوانتومی ارائه می دهد، کمک به شبیه سازی و فهم بهتر ساختارهای مولکولی در شیمی است. توانایی درک آنچه در چنین مقیاس کوچکی رخ می دهد به طور بالقوه به ما در مسائل مربوط به کشف دارو و طراحی مواد کمک می کند. اگرچه ما همچنان با کامپیوتر کوانتومی یونیورسال (UQC) که بتواند انواع شبیه سازی های شیمیایی را انجام دهد، فاصله داریم، اما نکته امیدوار کننده این است که ما هنوز هم می توانیم با استفاده از الگوریتم هایی که با استفاده از فناوری کلاسیک و کوانتوم (به طور هایبرید) به محاسبه دسته مهمی از محاسبات پردازیم و کاربردهای کوتاه مدت امیدوارکننده ای در شیمی داشته باشیم. یکی از قابل توجه ترین آنها Variation Quantum Eigensolver (یا به اختصار VQE) است.

هدف این پروژه این است که با در نظر گرفتن هامیلتونی مورد نظر و پارامترهای مدار کوانتومی و حالت اولیه به محاسبه طول پیوند و انرژی حالت پایه (و در فازهای بعدی انرژی حالت های برانگیخته) سیستم پرداخته شود.

اعضای گروه باید پس از مطالعه منابع اولیه و درک کامل از نحوه عملکرد الگوریتم ها به بازتولید نتایج برخی مراجع پردازد و در نهایت با ترکیب ساختار الگوریتم های قبلی و انتخاب یک مولکول مناسب و سبک، به شبیه سازی آن با کیسکیت پردازند.

## معرفی منابع اصلی:

○ منبع اصلی برای شروع این بخش از کتاب آنلاین کیسکیت خواهد بود

<https://qiskit.org/textbook/ch-applications/vqe-molecules.html>

○ علاوه بر مطالب پایه پکیج کیسکیت، پکیج Qiskit-nature نیز باید مورد مطالعه قرار بگیرد.

<https://qiskit.org/documentation/nature/>

[https://qiskit.org/documentation/nature/tutorials/03\\_ground\\_state\\_solvers.html](https://qiskit.org/documentation/nature/tutorials/03_ground_state_solvers.html)

[https://qiskit.org/documentation/nature/tutorials/04\\_excited\\_states\\_solvers.html](https://qiskit.org/documentation/nature/tutorials/04_excited_states_solvers.html)

○ بخش های از مقاله های مروری زیر نیز می تواند کمک کننده باشد :

<https://arxiv.org/pdf/2111.05176>

<https://materialstheory.springeropen.com/articles/10.1186/s41313-021-00032-6>

○ فصل ۹ از لکچرنت زیر و ویدیوهای مربوط به آن برای دانشگاه Chalmers :

<https://www.chalmers.se/SiteCollectionDocuments/Centrum/WACQT/FullLectureNotesv2.pdf>

Part1: <https://www.youtube.com/watch?v=r-uT3DcatLw>

Part2: <https://www.youtube.com/watch?v=cE0ajBlfH3A>

○ پست های بلاگ زیر بسیار کاربردی است :

<https://www.mustythoughts.com/variational-quantum-eigensolver-explained>

<https://www.mustythoughts.com/vqe-challenges.html>

○ ویدیوهای منتخب برای فهم بهتر مسئله:

1. <https://www.youtube.com/watch?v=TUFovZsBcW4>
2. <https://www.youtube.com/watch?v=Z-A6G0WVI9w>
3. <https://www.youtube.com/watch?v=AxfL3Juq7yl>
4. <https://www.youtube.com/watch?v=YtepXvx5zdl>
5. <https://www.youtube.com/watch?v=uvBauYQYVNg&t=37s>
6. <https://www.youtube.com/watch?v=ptb5xdoXIsA&t=3410s>

فازبندی و وظایف پروژه: این پروژه دارای چهار فاز کلی بوده و در بازه زمانی ۱۲ هفته ای انجام می‌گردد.

۱. فاز مطالعاتی (۴ هفته) (۱۵ نمره): گروه باید به مطالعه منابع و مراجع بپردازند تا به درک خوبی از الگوریتم‌ها برسند.

۲. فاز پیاده سازی اولیه (۳ هفته) (۱۵ نمره): گروه باید حداقل نتایج یکی از مراجع را توسط کیسکیت بازتولید کند.

۳. فاز طراحی الگوریتم با کیسکیت (۳ هفته) (۴۰ نمره): گروه باید الگوریتم‌های موجود را با خلاقیت خود و کمک منتور تغییر داده و نتایج را ارائه دهند.

۴. فاز جمع بندی و ارائه گزارش نهایی (۲ هفته) (۳۰ نمره): گروه باید نتایج یافته‌های خود را در قالب یک گزارش مکتوب انگلیسی یا فارسی در فایل Word یا LaTeX ارائه دهد و مشارکت‌ها و وظایف انجام شده هریک از اعضای گروه را نیز شرح دهند. (قالب Word فارسی و انگلیسی در دسترس قرار می‌گیرد).

تعیین ساعت قراردادی هفتگی برای مراجعه دانشجو‌ها: (پنج شنبه‌ها ساعت ۹:۳۰ تا ۱۱ شب)

نحوه محاسبه نمره و موفقیت آمیز بودن پروژه: نمره نهایی از ۱۰۰ برای هریک از اعضای گروه در نظر گرفته می‌شود و اخذ نمره ۷۰ و بالاتر معادل گذراندن دوره با موفقیت است. نمرات با توجه به کیفیت نتایج بازتولید، نتایج طراحی الگوریتم‌ها، نتایج اعتبارسنجی با کیسکیت و گزارش نهایی اعطا می‌گردد. در انتها به دانشجویانی که حداقل نمره را کسب نمایند گواهی معتبر بین المللی از طرف QIRAN و QWORLD اعطا خواهد شد.