**项目信息**

* 项目名称：基于昇思MindQuantum，实现量子蒙特卡洛算法
* 方案描述：基于Quantum Computing Quantum Monte Carlo (arXiv:2206.10431v1)实现量子蒙特卡洛算法，计算H4分子的基态能量，与量子本征求解器Vatiational Quantum Eigensolver, VQE的结果和精确值FCI结果进行对比，突出QC-QMC的优势。方案对其他分子也同样适用，并且可以灵活调节QMC的相关参数。
* 时间规划：

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 时间 | 内容 | 预期目标 |
| 6月1日-6月30日 | 文献调研 | 学习量子蒙特卡洛算法 |
| 7月1日-7月31日 | 实现CPU版本量子蒙特卡洛 | 实现量子蒙特卡洛算法 |
| 8月1日-8月31日 | 实现QMC+VQE Hybrid算法 | 实现QMC+VQE Hybrid算法 |
| 9月1日-9月30日 | 编写项目描述文件 | 按照Mindspore社区标准编写README.md文件，并向社区提交代码 |

**项目进度**

* 已完成工作：

1. 基于昇思MindQuantum实现了Quantum Computing Quantum Monte Carlo量子蒙特卡洛方法

2. 求解了H4分子的基态能，该基态能与分子基态能的精确值误差小于化学精度范围，改良了VQE的结果。

* 遇到的问题及解决方案：

1. 量子蒙特卡洛方法的具体实现路径应该如何选择？

量子蒙特卡洛方法在量子计算机上的实现途径是多样的，有基于虚时演化的Unbiasing fermionic quantum Monte Carlo with a quantum computer, Nature 603, 416–420 (2022)；有基于实时演化的Accelerated Quantum Monte Carlo with Mitigated Error on Noisy Quantum Computer, PRX QUANTUM 2, 040361 (2021); 基于FCIQMC的Quantum Computing Quantum Monte Carlo, arXiv:2206.10431v1等。我最终选择了最后这个基于FCIQMC的方案，原因一方面是因为这个方案比较简洁明了，易于实现，另一方面则是因为这一方案基于VQE算法，能够最大程度发挥出MindSpore和MindQuantum的优势。

2. 程序运行报错，显示invalid array

我首先通过小规模测试数据的方法，定位了报错的地点为以总体population为分母的一步除法，即找到了报错的原因是population归零，但我仍然不清楚问题的根源是什么。这时我请教了我的指导老师龙瀚林老师和较为熟悉QMC的武汉大学的谢晴兴博士，共同排查问题。在共同的努力下，我们最终发现是论文的伪代码写错了，误导了我的代码。在修复这些问题之后，我最终得到了满意的成果。