

**Vilnius
University**

Variacinio kvantinio tikrinių reikšmių algoritmo efektyvumo analizė įvairioms molekulėms

Naglis Šuliokas

Vadovas: doc. dr. Linas Petkevičius

Recenzentas: lekt. Irus Grinius

Turiny

1. Įvadas I. Tyrimo objektas, svarba
2. Įvadas II. Problema, tikslas, uždaviniai
3. Metodologija
4. Eksperimento struktūra
5. Rezultatai
6. Išvados

Ivadas I

- Kvantiniai skaičiavimai ir NISQ era.

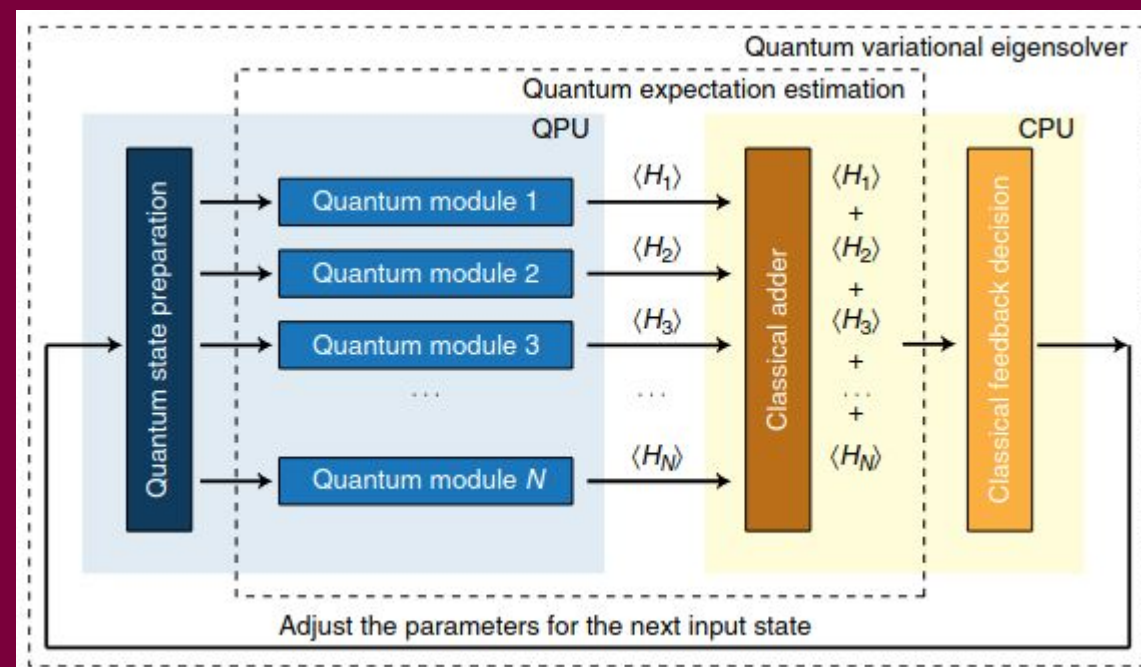
- **Tyrimo objektas:**

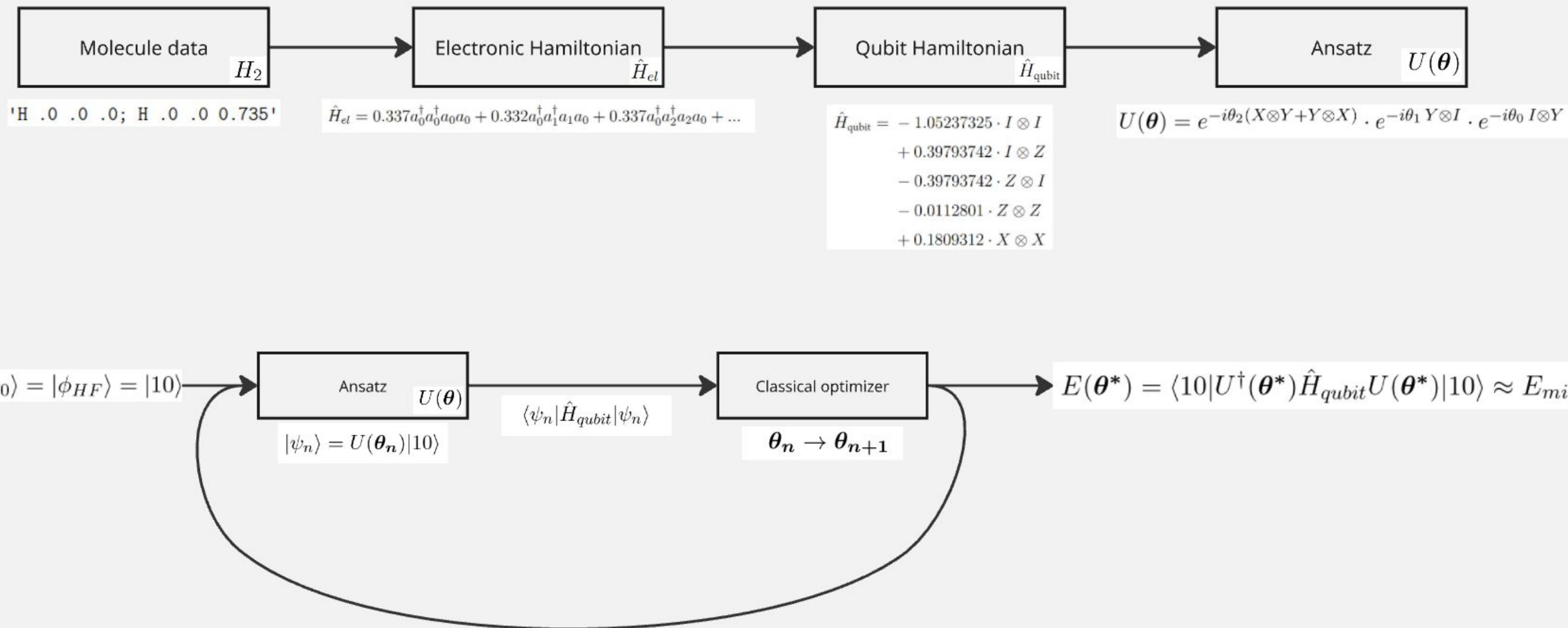
Variacinis kvantinis tikrinių reikšmių algoritmas (Peruzzo et al., 2014).

- **Svarba:**

Medžiagų mokslas, medicina.

$$C(\boldsymbol{\theta}) = \langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | \hat{H}_{qubit} | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle$$





Įvadas II

- **Problema:** ieškoma pagrindinės būsenos energija (daug naujų VQE patobulinimų, mažai analizės duomenų, “varginantis” kodo įgyvendinimas).
- **Tikslas:** išanalizuoti, rasti geriausius VQE metodus, nustatyti skaičiavimo apribojimus.
- **Uždaviniai:**
 - literatūros analizė (Hamiltoniano atvaizdavimai, ansatzai, optimizatoriai),
 - atlikti našumo testus su simulatoriu ir su tikra kvantine įranga H_2 , LiH , BeH_2 molekulėms,
 - nustatyti apribojimus,
 - palyginti su literatūra.

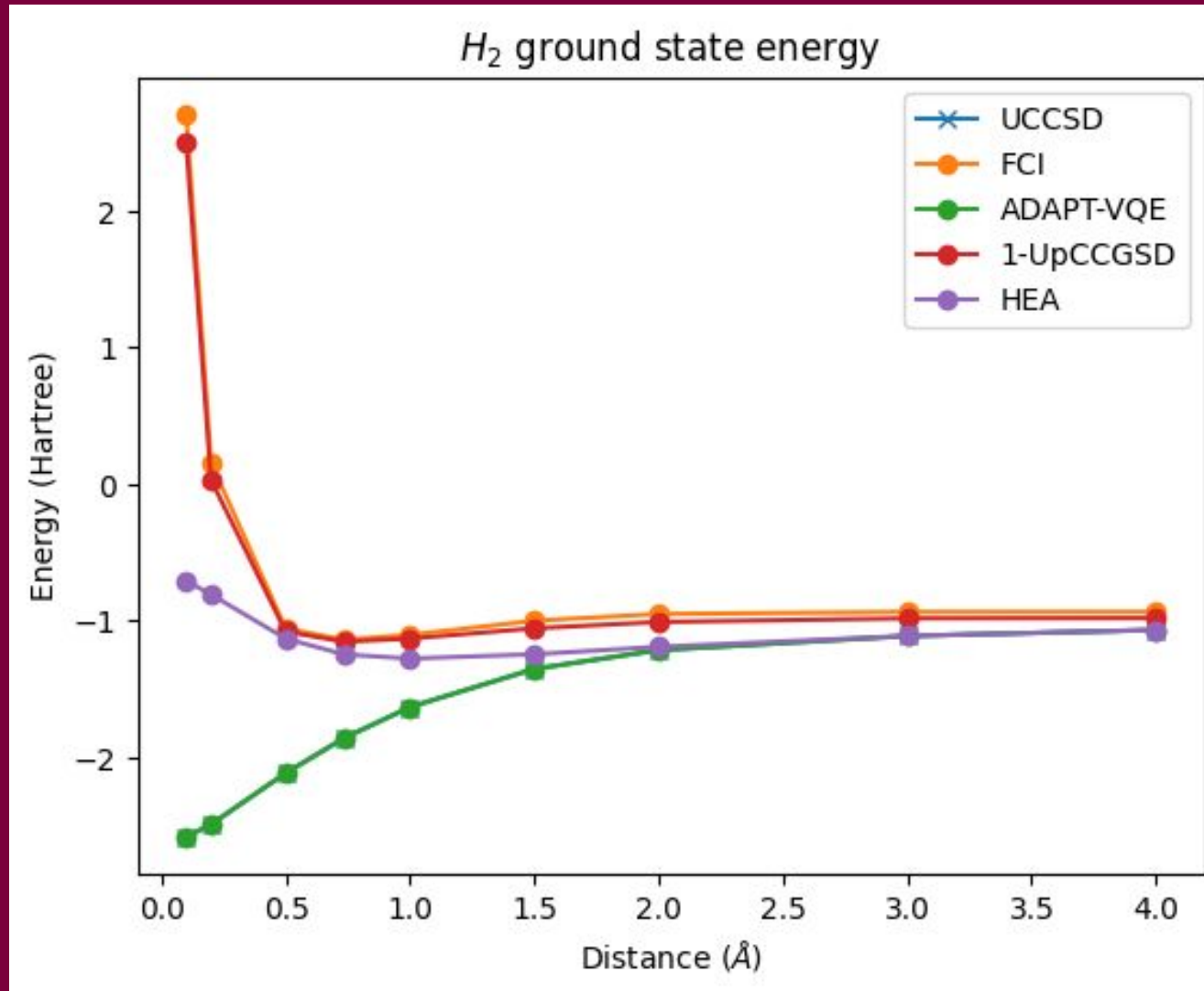
Metodologija

- **Įrenginiai:** Aer simulatorius, Madness simulatorius, ibm_brisbane kvantinė įranga (127 kubitai).
- **Analizė:**
 - Hamiltoniano atvaizdavimas - didžiausias Pauli svoris, priklausomai nuo kubitų kiekio,
 - ansatz - VQE konvergavimas, tikslumas,
 - optimizatorius - tikslumas.

Eksperimento struktūra

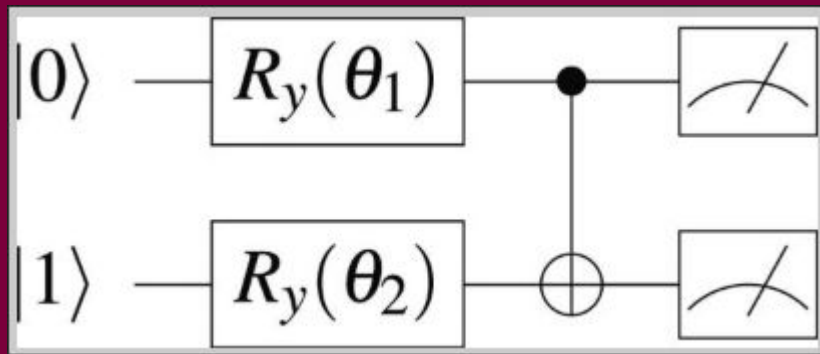
- **Hamiltoniano atvaizdavimas:**
 - Džordano-Vignerio, Bravyi-Kitaevo, pariteto.
- **Ansatz ir VQE variacijos:**
 - UCCSD, k-UpCCGSD, ADAPT-VQE.
- **Optimizatorius:**
 - L-BFGS-B, COBYLA.

Rezultatai I

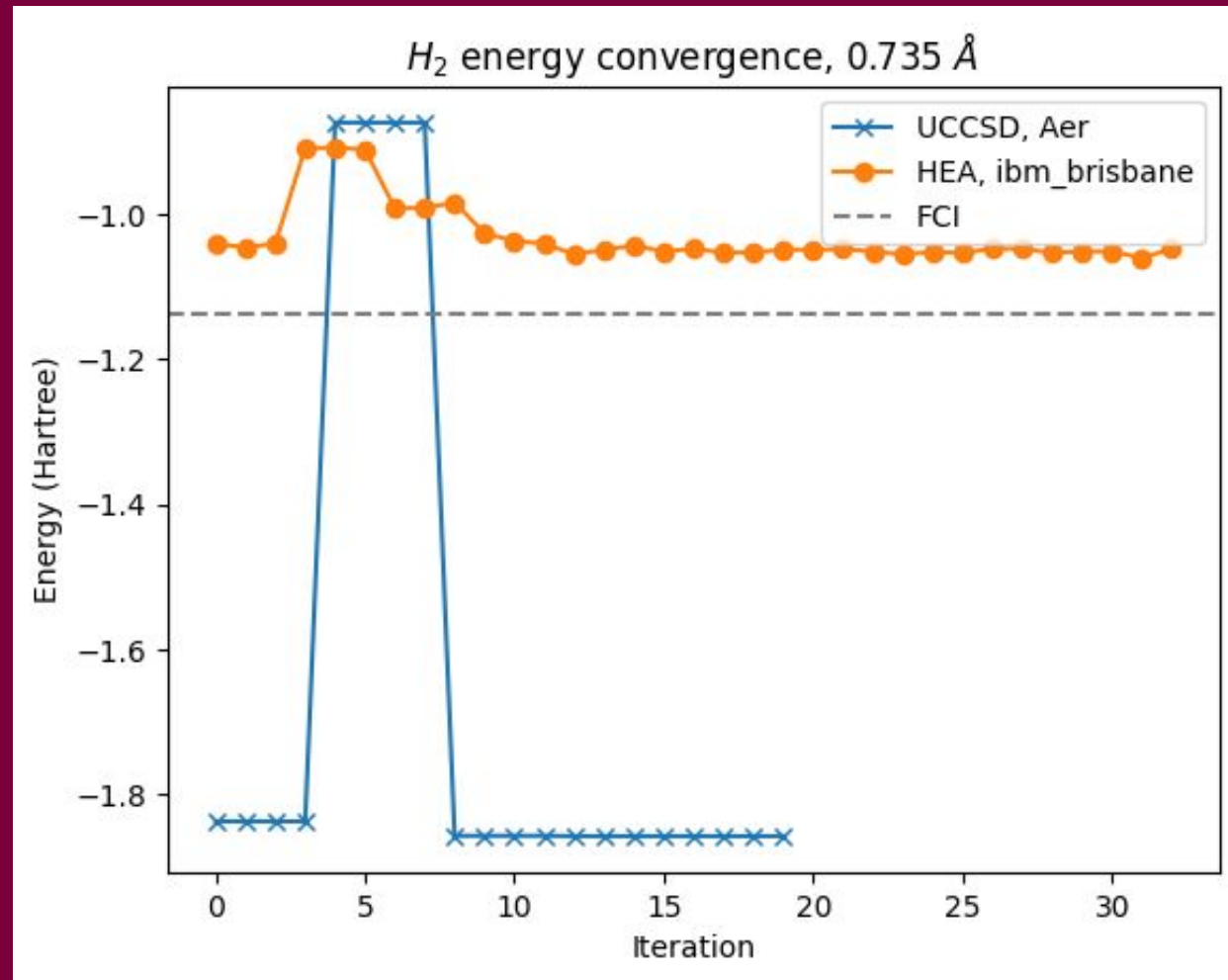


Rezultatai II

Vilnius
University

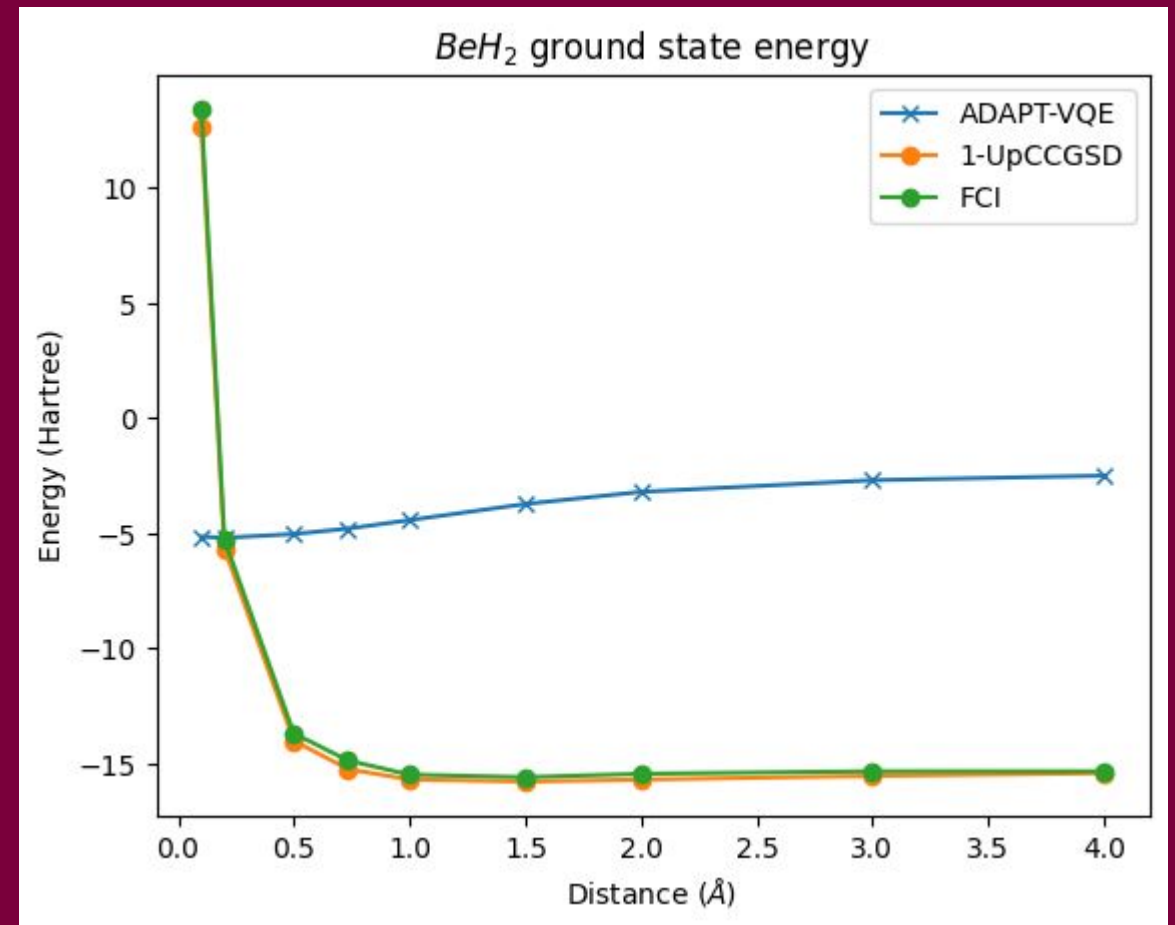
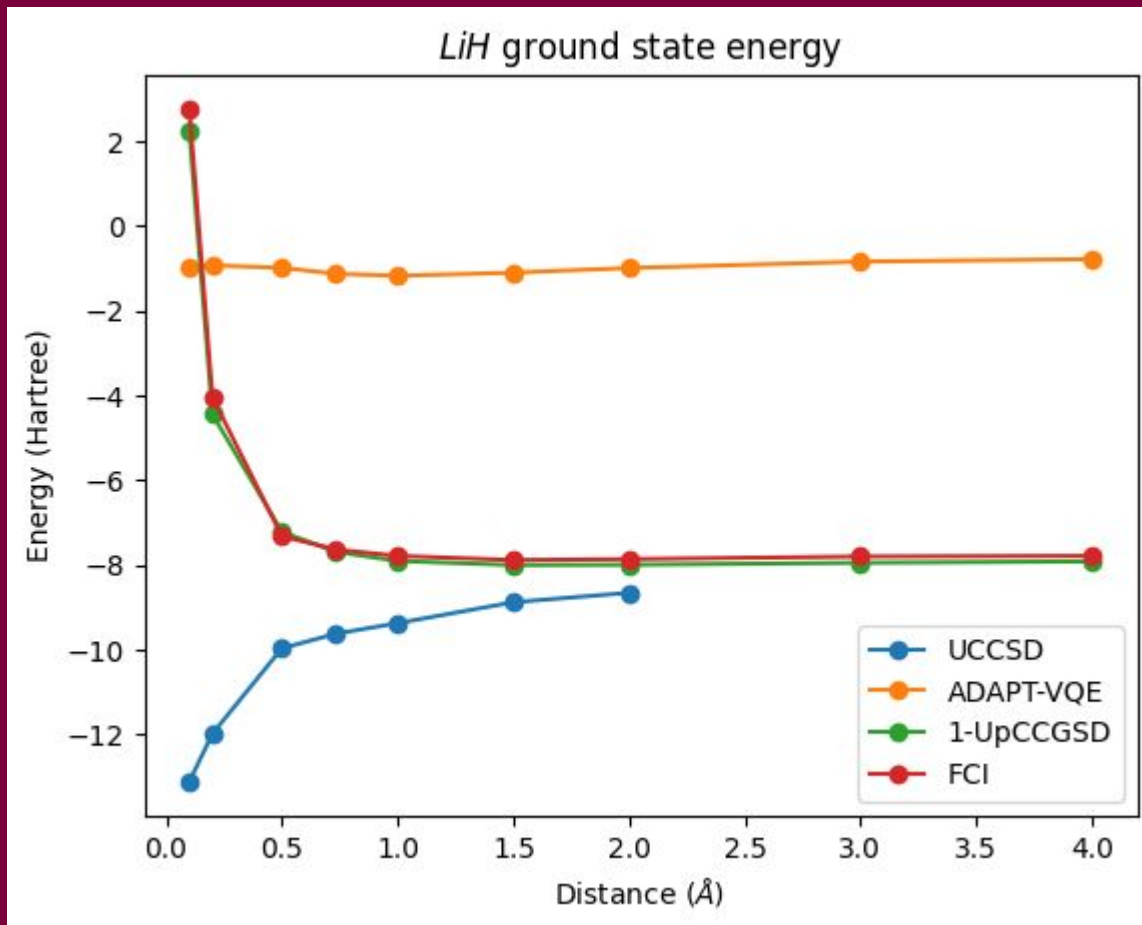


Choy et al. (2023)

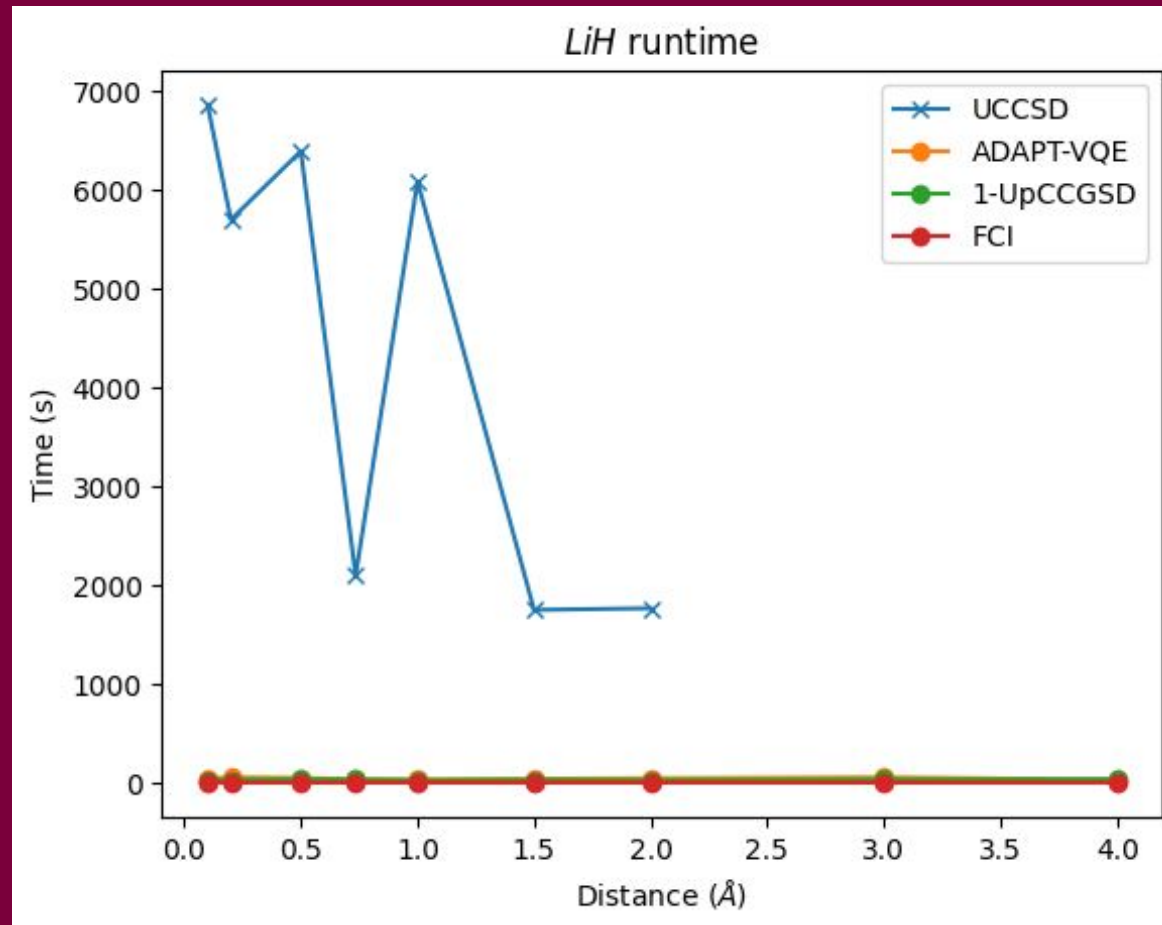


Rezultatai III

Vilnius
University



Rezultatai IV

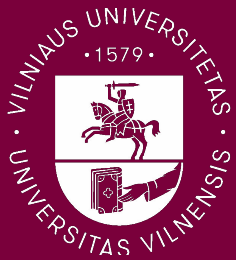


Išvados

- **Palyginimas:**
 - ADAPT-VQE tikslumas prieštaraujamas,
 - k-UpCCGSD tikslesnis nei UCCSD (taip pat ir literatūroje),
 - Bravyi-Kitaevo geresnis nei pariteto, Džordano-Vignerio atvaizdavimai (taip pat ir literatūroje),
 - optimizatoriai - su mažomis molekulėmis nepamatomas skirtumas.
- Nauji duomenys, kodo įgyvendinimas.
- **Apribojimai:**
 - mažai molekulių, mažai duomenų, plati ir “sekli” algoritmo analizė.
- **Ateities tyrimai:**
 - daugiau analizės, daugiau skaičiavimų su kvantine įranga, gradiento paklaidos reguliavimas, pilnutinis tikslus kodo įgyvendinimas naujiems atradimams.
- **Rekomendacijos:**
 - chemijos metodų analizė, siejant su kvantinių skaičiavimų dalimi.

Šaltiniai

- Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M. H., Zhou, X. Q., Love, P. J., ... & O'brien, J. L. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. Nature communications, 5(1), 4213.
- Choy, B., & Wales, D. J. (2023). Molecular energy landscapes of hardware-efficient ansatze in quantum computing. Journal of chemical theory and computation, 19(4), 1197-1206.



**Vilnius
University**

KONTAKTAI

Naglis Šuliokas

Programų sistemų bakalauras, 4 kursas

naglis.suliokas@mif.stud.vu.lt

naglis.suliokas@gmail.com