

Report za zimný semester

Počas zimného semestra som dosiahol nasledovné:

- Oboznámil som sa so základnými princípmi kvantových počítačov
- Oboznámil som sa s nástrojom na prácu s kvantovými počítačmi a vytváranie kvantových programov – Qiskit
- Oboznámil som sa s (matematickou) optimalizáciou a optimalizačnou metódou Particle swarm optimization (PSO)
- Oboznámil som sa s metódou Harmonic oscillator based PSO (HOPSO)
- Hotový algoritmus som paralelizoval pomocou knižnice mpi4py, aby bol program efektívne spustiteľný aj na superpočítači
- HOPSO by mal následne zistiť základný stav (najmenšiu možnú energiu) molekuly, ktorá je zadaná ako hamiltonián

Report za letný semester

- Implementoval som rôzne variácie HOPSO, ktoré rôznymi spôsobmi počítajú amplitúdu a smer oscilácie
- Oboznámil som sa s Ansatz – kvantovým obvodom, používaným na priblíženie (odhad) základného stavu hamiltoniánu
- Pre zadané hamiltoniány molekúl H_2 and LiH a s využitím ansatz som pomocou variácií HOPSO hľadal ich základné stavy.
- Upravoval som hyperparametre HOPSO a porovnával výsledky s cieľom dosiahnuť “chemickú presnosť” – odchýlka o veľkosti 0,0016 Ha
- Pre H_2 sa ľahko podarilo nájsť základný stav v požadovanej presnosti, pretože má oveľa jednoduchší hamiltonián avšak pre LiH bolo dosiahnutie požadovanej presnosti omnoho výpočtovo zložitejšie, vyžadovalo si veľmi optimálne nastavené hyperparametre a aj úpravu samotnej implementácie
- Napriek tomu implementované variácie HOPSO poskytujú dobrý základ pre škálovanie na zložitejšie problémy