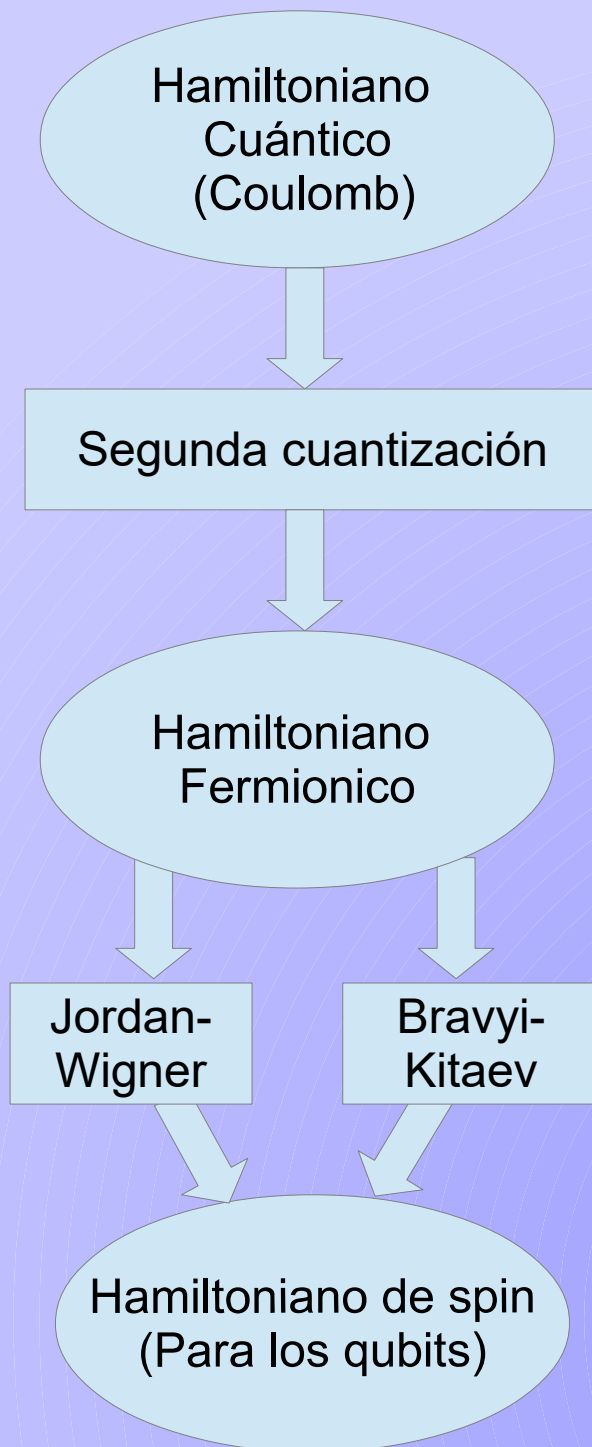


ALGORITMO DE LA SERPIENTE EN QUÍMICA CUÁNTICA

Autores: Yongcheng Ding

Jorge López

Ander Fernandez



$$H_1 = -\sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{2M_i} - \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{2} - \sum_{i,j} \frac{Z_i}{|R_i - r_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{Z_i Z_j}{|R_i - R_j|} + \sum_{i,j>i} \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

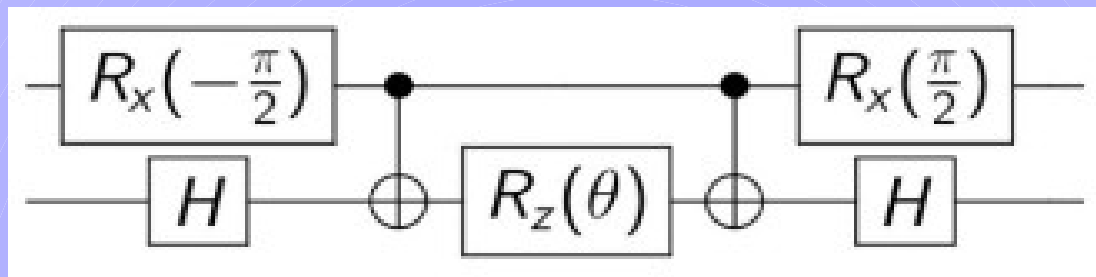
$$H_2 = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s,$$

MOLÉCULA DE H_2

$$H^{\text{BK}} = c_0 \mathcal{I} + c_1 \sigma_0^z + c_2 \sigma_1^z + c_3 \sigma_0^z \sigma_1^z + c_4 \sigma_0^x \sigma_1^x + c_5 \sigma_0^y \sigma_1^y$$

$$U(\theta) = \exp(-i\theta \sigma_0^x \sigma_1^y)$$

U_{CC} ansatz
(Unitary Coupled cluster ansatz)



Estado de referencia: Hartree-Fock $|01\rangle$

VQE con COBYLA

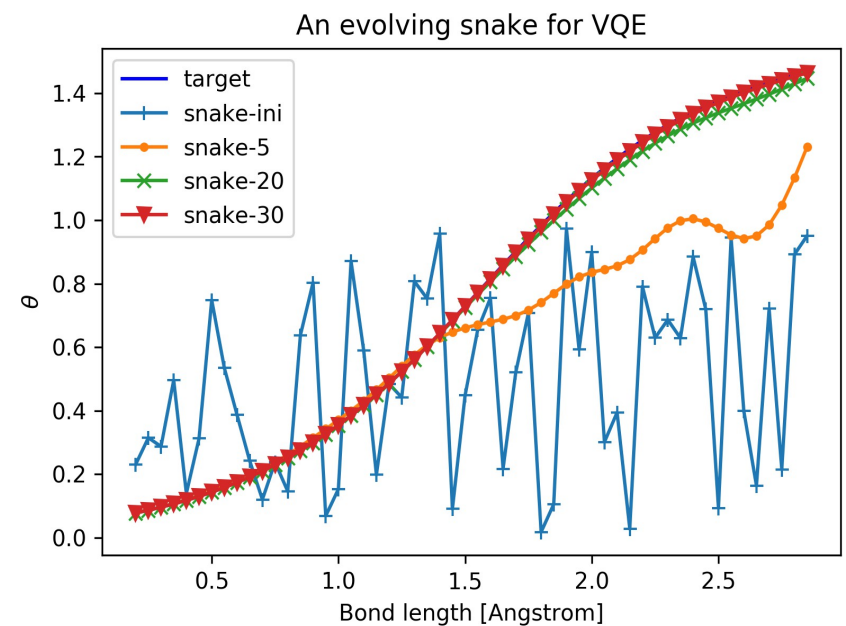
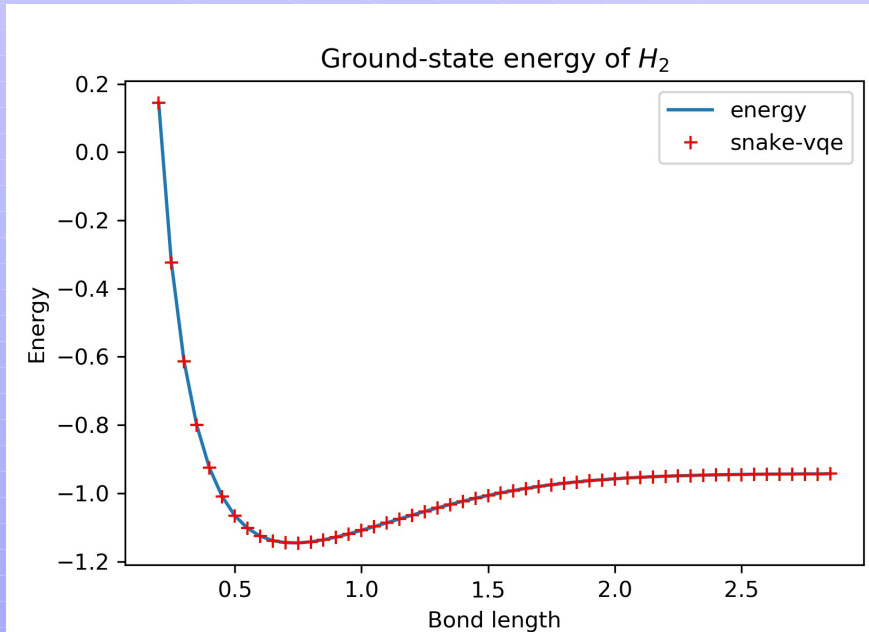
- Hiperparámetros:
 - Número de iteraciones: 30
 - Distancia: 0.2-2.85 Å
 - Paso: 0.05 Å
- Tiempo de ejecución: 48s

SNAKE ALGORITHM

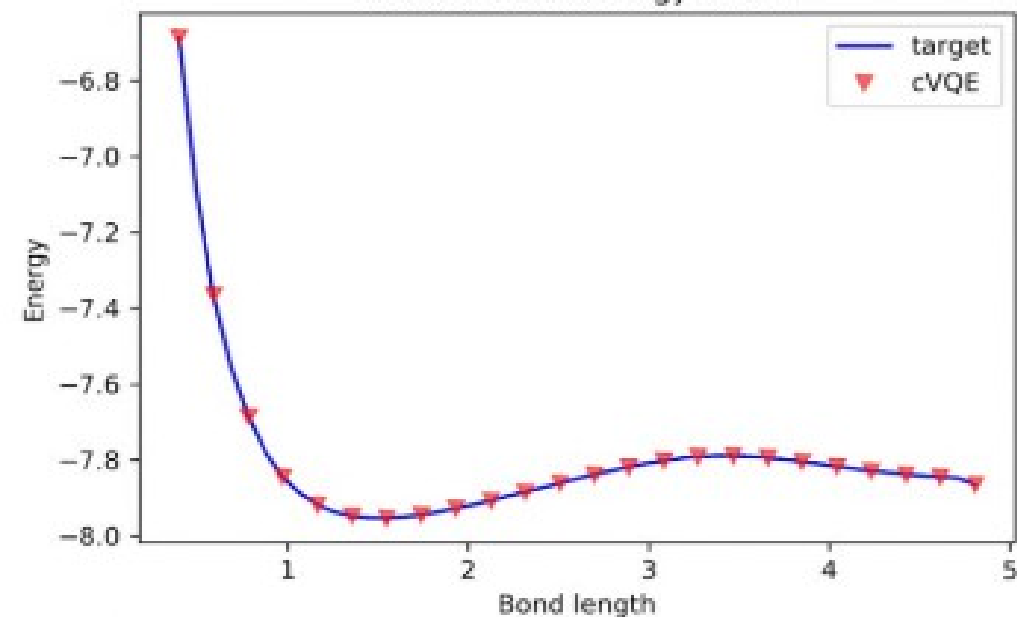
- Algoritmo desarrollado para interpretación de imágenes
- Una vez encontrado un mínimo, la serpiente se “amolda” a la función, extendiéndose y doblándose para encontrar los demás
- Con los mismos hiperparámetros (añdiendo la rigidez y la flexibilidad), tiempo de ejecución: 42s

$$L[\boldsymbol{\theta}(\lambda)] = \int_{\lambda_0}^{\lambda_T} (\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}(\lambda)) + \mathcal{E}(\boldsymbol{\theta}(\lambda)))$$

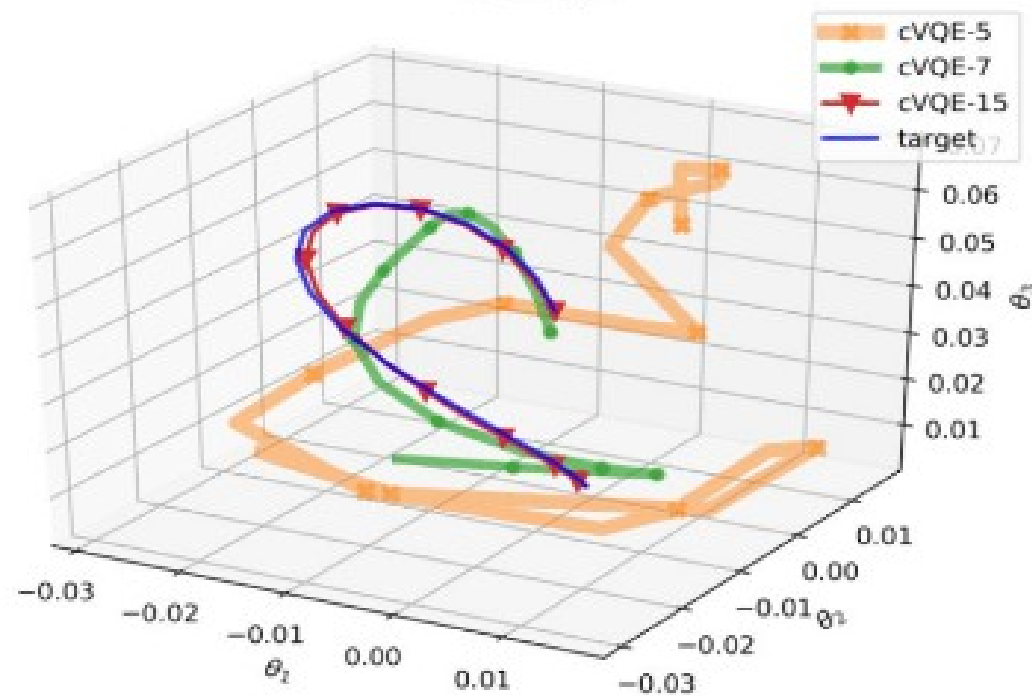
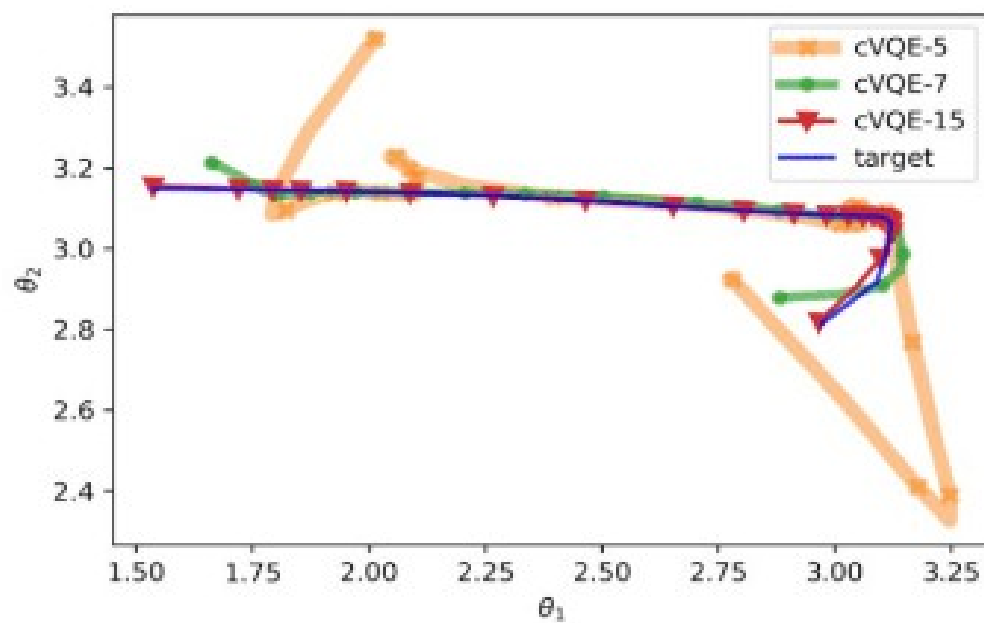
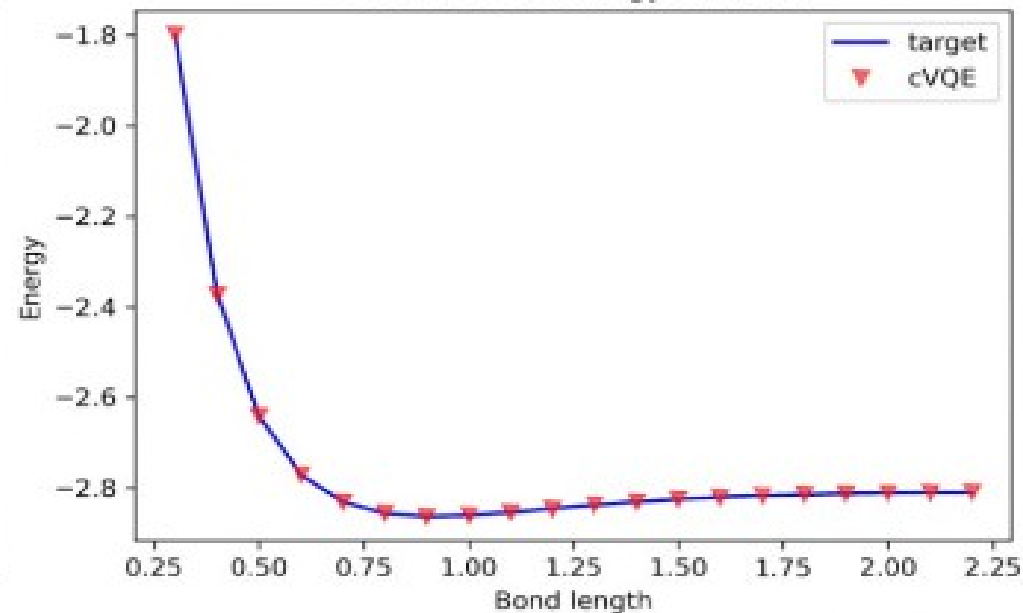
$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}(\lambda)) = \alpha \left| \frac{\partial \boldsymbol{\theta}(\lambda)}{\partial \lambda} \right|^2 + \beta \left| \frac{\partial^2 \boldsymbol{\theta}(\lambda)}{\partial^2 \lambda} \right|^2$$

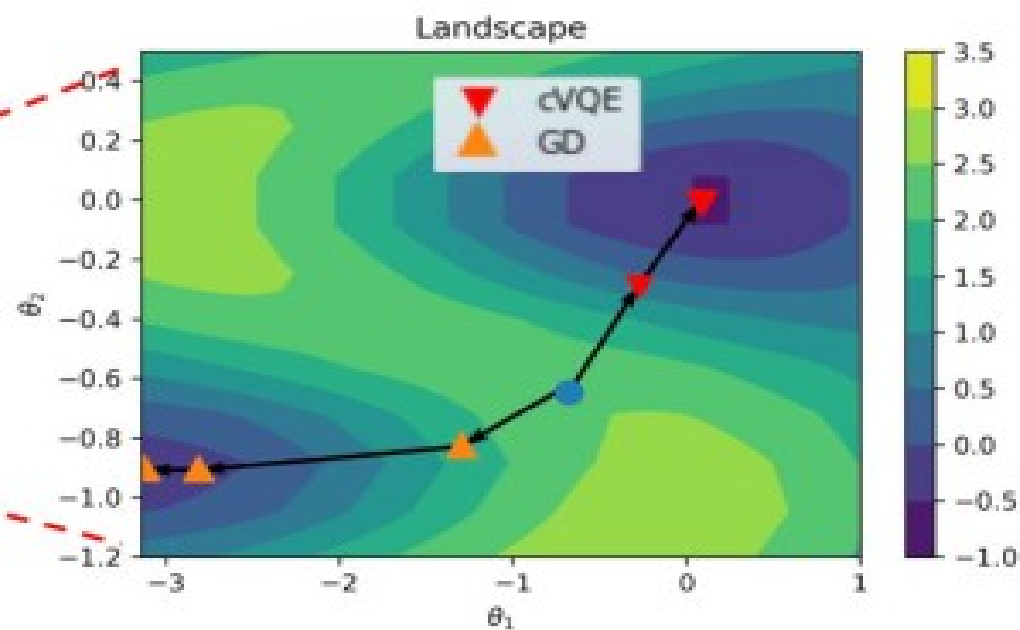
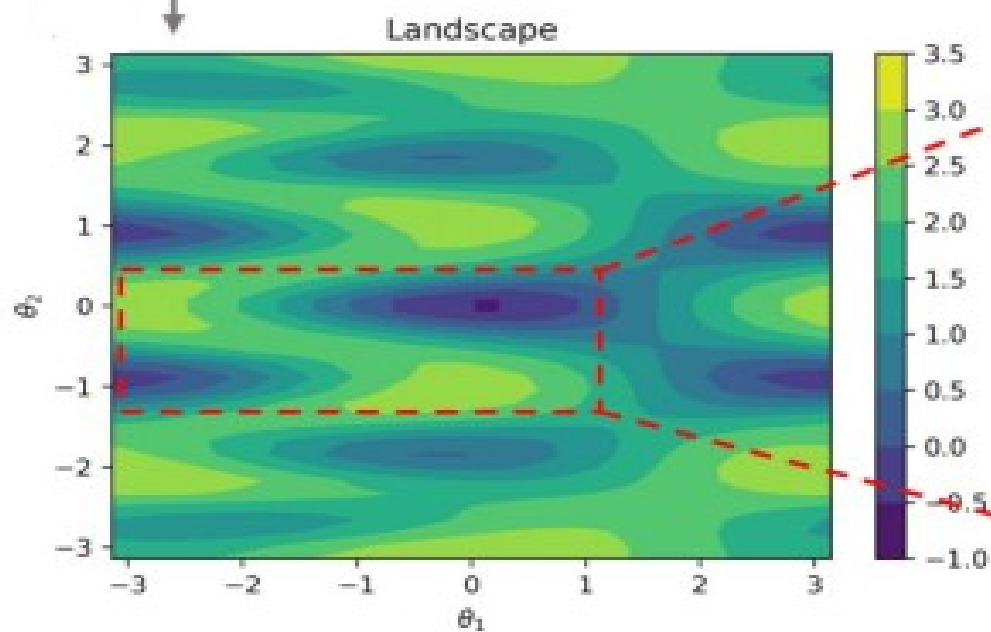
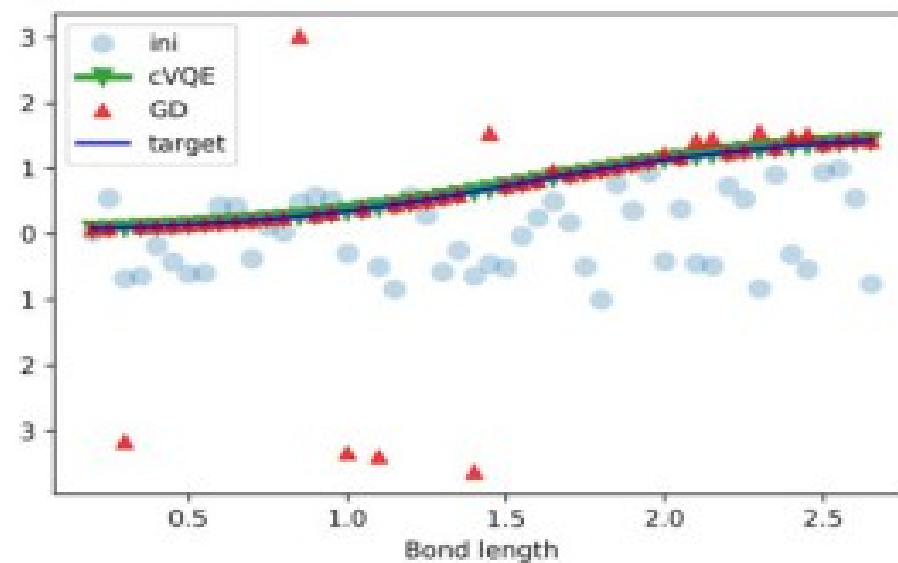
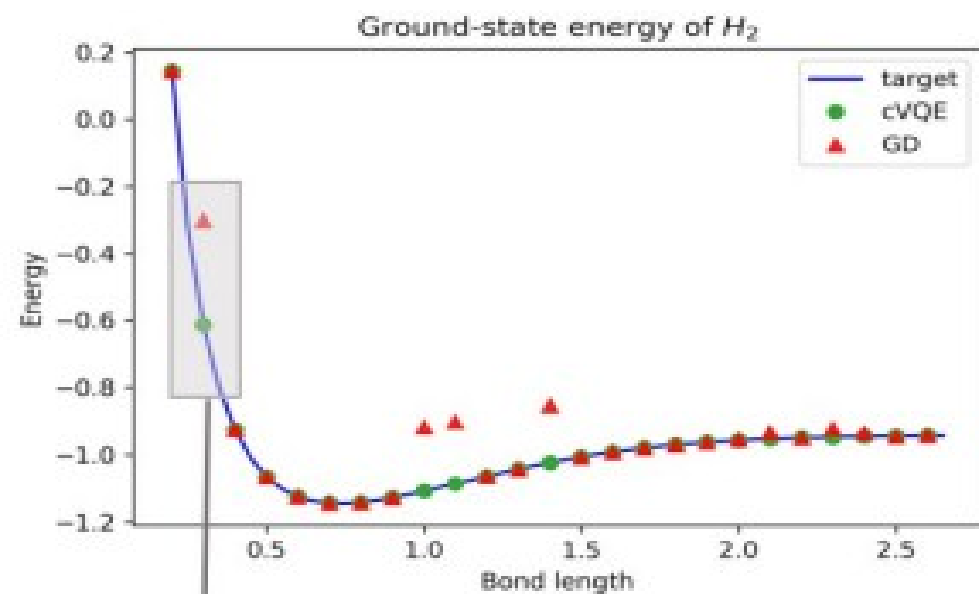


Ground-state energy of LiH



Ground-state energy of HeH⁺





MEJORAS POTENCIALES

- Combinar con otros algoritmos metaheurísticos
- Aplicable a la física nuclear
- Para más de dos cuerpos
- ¿Inteligencia artificial?

ESKERRIK ASKO