

Расчёт энергии основного состояния атома московия с помощью квантовых алгоритмов

Владимир Зайцев, Илья Мальцев, Максим Грошев,
Анастасия Дурова, Владимир Шабает

Формулировка задачи и методы решения

Задача

- ▶ Вычисление электронной структуры
- ▶ Поиск энергии основного состояния
- ▶ Построение волновой функции основного состояния

Атом московия ($Z = 115$)

Конфигурация: $[Rn] 5f^{14}6d^{10}7s^27p^3$

Методы решения

- ▶ Variational Quantum Eigensolver (VQE)
- ▶ iterative Phase Estimation Algorithm (iPEA)

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

Приготовим состояние

$$|\Psi(\theta)\rangle = \mathcal{U}(\theta) |\Psi_0\rangle$$

Ищем \mathcal{U} и θ , минимизирующие

$$E_\theta = \langle \Psi(\theta) | H | \Psi(\theta) \rangle$$

VQE - гибридный алгоритм

- ▶ квантовый компьютер – преобразование ВФ и вычисление среднего
- ▶ классический компьютер – определение изменения \mathcal{U} и θ

Вопросы

- ▶ Как строить \mathcal{U} ?
- ▶ Как менять θ ?

Зафиксируем анзац \mathcal{U} одним из способов

- ▶ унитарные связанные кластеры (dUCC)
- ▶ архитектуру ориентированный (Hardware Efficient)

Унитарные связанные кластеры (UCC)

Анзац имеет вид

$$\mathcal{U}(\boldsymbol{\theta}) = e^{T(\boldsymbol{\theta}) - T^\dagger(\boldsymbol{\theta})}$$

где

$$T(\boldsymbol{\theta}) - T^\dagger(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\gamma}^{\text{exc}} \theta_{\gamma} A_{\gamma}$$

Однократные $\theta_{\gamma} = \theta_i^a$; $i \in \text{occ}$; $a \in \text{vac}$

$$A_{\gamma} = a_a^\dagger a_i - a_i^\dagger a_a$$

Двухкратные $\theta_{\gamma} = \theta_{ij}^{ab}$; $i, j \in \text{occ}$; $a, b \in \text{vac}$

$$A_{\gamma} = a_a^\dagger a_b^\dagger a_i a_j - a_j^\dagger a_i^\dagger a_b a_a$$

Расцепленные UCC (dUCC)

- ▶ Обычный UCC

$$\mathcal{U}(\boldsymbol{\theta}) = e^{\sum_{\gamma} \theta_{\gamma} A_{\gamma}}$$

- ▶ dUCC

$$\mathcal{U}(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{\gamma} e^{\theta_{\gamma} A_{\gamma}}$$

требуется специальный порядок операторов

- ▶ Может быть эффективно реализован
- ▶ Не требуется никаких приближений

Архитектура ориентированный (Hardware Efficient)

- ▶ Заключается в применении максимального числа операций
- ▶ Не имеет физически обоснованной структуры
- ▶ Высокая устойчивость к шумам
- ▶ Обладает излишней параметризацией

Изменение параметров θ

Градиентный спуск

$$\Delta\theta_i = -\eta \frac{\partial}{\partial\theta_i} \langle \Psi(\theta) | H | \Psi(\theta) \rangle$$

Adam

Kingma and Ba, arXiv:1412.6980

- ▶ Обладает “инерцией”
- ▶ Величина шага η адаптируется

Изменение параметров θ

Градиентный спуск

$$\Delta\theta_i = -\eta \frac{\partial}{\partial\theta_i} \langle \Psi(\theta) | H | \Psi(\theta) \rangle$$

Quantum Natural Gradients (QNG)

Stokes et al., Quantum 4, 269 (2020)

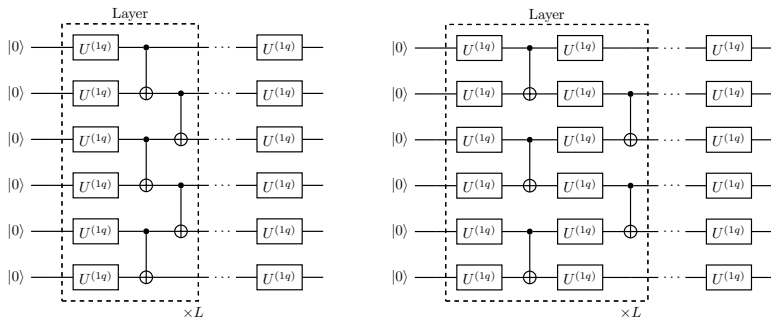
$$\sum_j g_{ij} \Delta\theta_j = -\eta \frac{\partial}{\partial\theta_i} \langle \Psi(\theta) | H | \Psi(\theta) \rangle$$

$$g_{ij} = \text{Re} \left[\left\langle \frac{\partial\Psi_\theta}{\partial\theta_i} \left| \frac{\partial\Psi_\theta}{\partial\theta_j} \right. \right\rangle \right] - \left\langle \frac{\partial\Psi_\theta}{\partial\theta_i} \left| \Psi_\theta \right. \right\rangle \left\langle \Psi_\theta \left| \frac{\partial\Psi_\theta}{\partial\theta_j} \right. \right\rangle$$

Базис	Пространственные орбитали	N_e	N_q	$N_{\text{Sl.det.}}$
<i>A</i>	$\{7s, 7p_{1/2}, 7p_{3/2}\}$	5	6	~ 10
<i>B</i>	$+\{8s, 8p_{1/2}, 8p_{3/2}\}$	5	14	~ 500
<i>C</i>	$+\{6d_{3/2}, 6d_{5/2}\}$	15	24	$\sim 500\,000$

Московий: VQE + Hardware Efficient

Структура



Однокубитные вращения

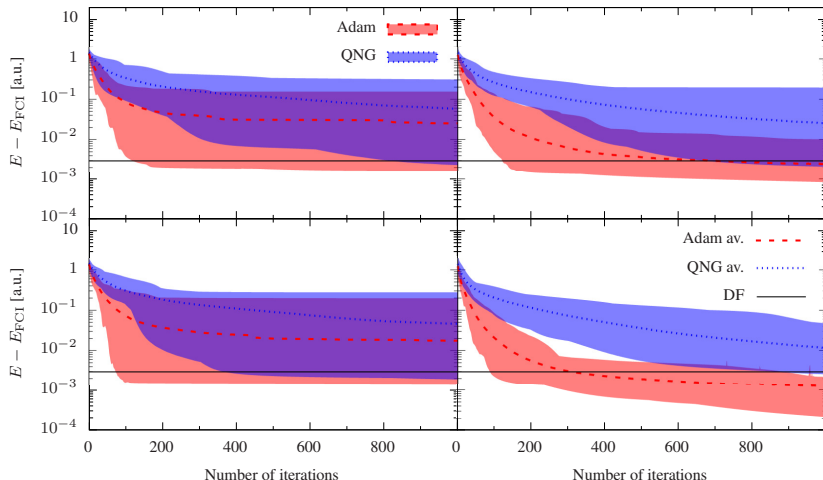
$$U_{zyz}^{(1q)} = R_z(\theta_3)R_y(\theta_2)R_z(\theta_1)$$

$$U_{zx}^{(1q)} = R_z(\theta_2)R_x(\theta_1)$$

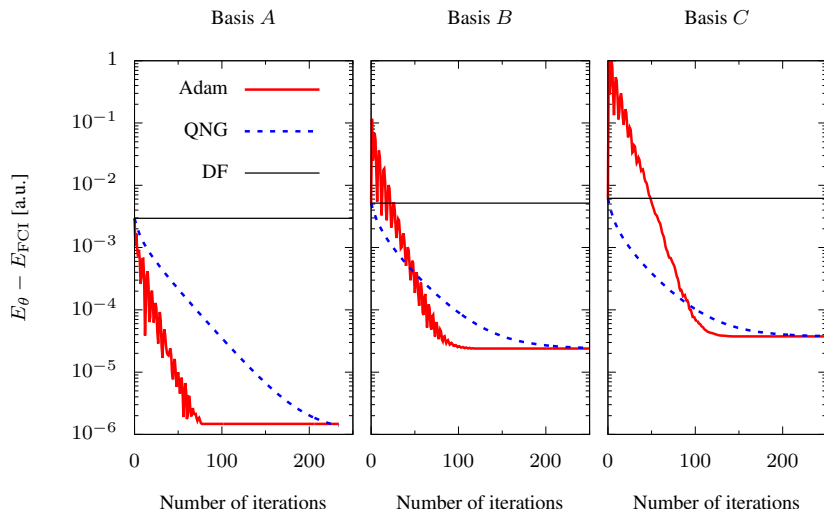
Московий: VQE + Hardware Efficient

Базис $\{7s, 7p_{1/2}, 7p_{3/2}\}$, 5 слоёв,

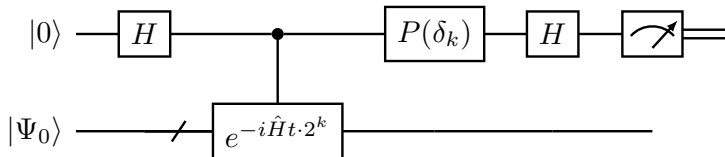
merged zx	splitted zx
merged zyz	splitted zyz



Московий: VQE + dUCC-SD



Схема



Троттеризация

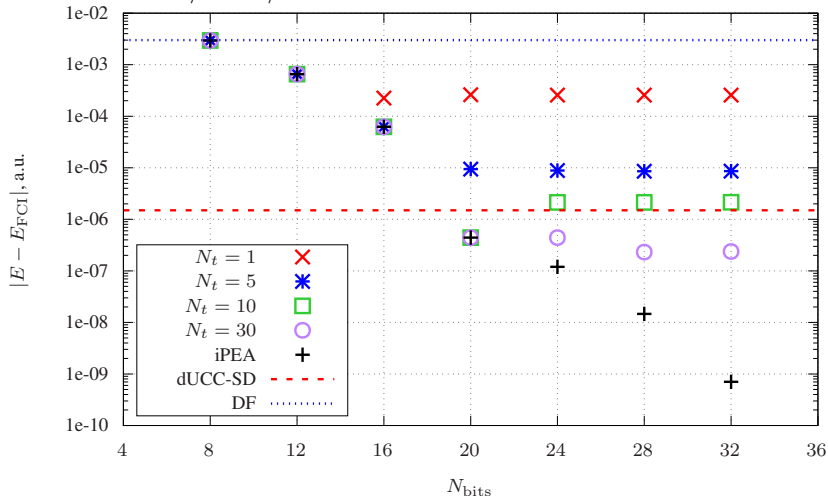
$$e^{-i\hat{H}t} = e^{-i\sum_n \gamma_n P_n t} = \left(e^{-i\sum_n \gamma_n P_n \tau} \right)^{N_t} \approx \left(\prod_n e^{-i\gamma_n P_n \tau} \right)^{N_t} + O(t\tau),$$

Griffiths and Niu, Phys. Rev. Lett. 76, 3228 (1996)

Parker and Plenio, Phys. Rev. Lett. 85, 3049 (2000)

Московий: iPEA

Базис $\{7s, 7p_{1/2}, 7p_{3/2}\}$



Заключение

- ▶ Протестированы разные анзацы
- ▶ Протестированы разные методы варьирования θ
- ▶ Реализован алгоритм сокращения числа гейтов
- ▶ Публикация готовится к представлению

Наилучший результат даёт VQE + dUCC-SD + Adam

Планы

- ▶ Прямое измерение разности энергий
- ▶ Ориентация на коррекцию ошибок

Московий: количество гейтов

Сокращение числа операций

Cowtan, Simmons, and Duncan, arXiv:2007.10515

Vandaele, Martiel, and de Brugiere, arXiv:2104.00934

Patel, Markov, and Hayes, Quantum Inf. and Comp. 8, 0282 (2008)

Базис $\{7s, 7p_{1/2}, 7p_{3/2}\}$

	"greedy"		После сокращения	
	SQ	CNOT	SQ	CNOT
HE	198	25		
dUCC-SD	198	156	76	88
$e^{i\hat{H}'\tau}$	604	568	192	237
$Ce^{i\hat{H}'\tau}$	6552	4368	2549	1770