

Расчёт энергии основного состояния атома московия с помощью квантовых алгоритмов

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

СПбГУ, каф. Квантовой Механики

Оценка требуемых вычислительных ресурсов

$$\Psi(x_1, \dots, x_{N_e}) = \sum_{\gamma} c_{\gamma} \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \psi_{\gamma_1}(x_1) & \dots & \psi_{\gamma_1}(x_{N_e}) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{\gamma_{N_e}}(x_1) & \dots & \psi_{\gamma_{N_e}}(x_{N_e}) \end{vmatrix}$$

Фиксируем:

- ▶ число электронов N_e
- ▶ чётность P
- ▶ проекцию полного момента J_z
- ▶ одноэлектронные функции N

Оценка требуемых вычислительных ресурсов

Фиксируем:

- ▶ число электронов N_e
- ▶ чётность P
- ▶ проекцию полного момента J_z
- ▶ одноэлектронные функции N

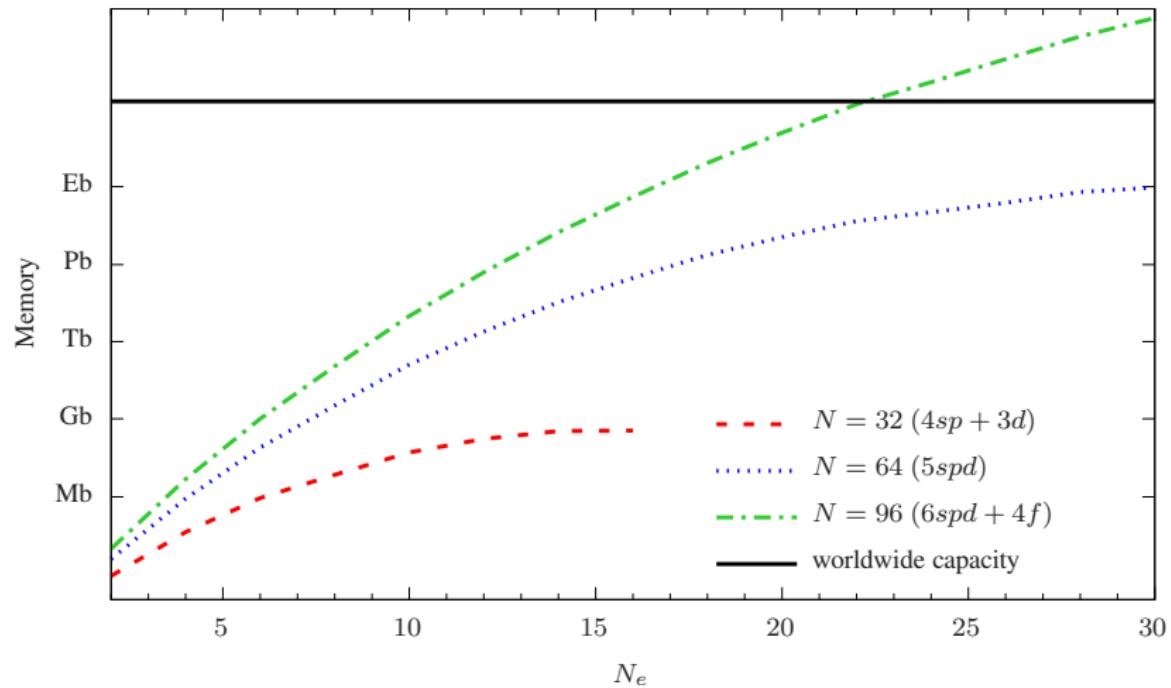
Храним:

- ▶ коэффициенты разложения c_γ
- ▶ числа заполнение q

Пример: $N_e = 2, P = 0, J_z = 0, N = 4$

c_n	$1s_{-1/2}$	$1s_{+1/2}$	$2s_{-1/2}$	$2s_{+1/2}$	q
c_0	1	1	0	0	12
c_1	0	1	1	0	6
c_2	1	0	0	1	9
c_3	0	0	1	1	3

Оценка требуемых вычислительных ресурсов



Квантовый компьютер

Кубит (квантовый бит)

двууровневая квантовая система

Состояние такой системы

$$\begin{aligned} |\psi_{1q}\rangle &= \alpha_0 |g\rangle + \alpha_1 |e\rangle \\ &= \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \end{aligned}$$

где $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$

Квантовый компьютер

Кубит (квантовый бит)

двууровневая квантовая система

Состояние такой системы

$$\begin{aligned} |\psi_{1q}\rangle &= \alpha_0 |g\rangle + \alpha_1 |e\rangle \\ &= \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \end{aligned}$$

где $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$



Бит



Кубит

Квантовый компьютер

Из кубитов собирается квантовый компьютер,

2 кубита

$$\begin{aligned} |\psi_{2q}\rangle &= \alpha_0 |0\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_1 |0\rangle_1 |1\rangle_0 + \alpha_2 |1\rangle_1 |0\rangle_0 + \alpha_3 |1\rangle_1 |1\rangle_0 \\ &= \alpha_0 |00\rangle + \alpha_1 |01\rangle + \alpha_2 |10\rangle + \alpha_3 |11\rangle \\ &= \sum_{x=0}^3 \alpha_x |x\rangle \end{aligned}$$

N кубитов

$$|\psi_N\rangle = \sum_{q=0}^{2^N-1} c_q |q\rangle$$

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Детали:

- ▶ Разрешены только унитарные операции

Зачем нужен квантовый компьютер?

Пример вычислений

- ▶ Классический компьютер

$$101 \xrightarrow{f} f(101)$$

- ▶ Квантовый компьютер

$$\frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |0\rangle \xrightarrow{U_f} \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{x=0}^7 |x\rangle |f(x)\rangle$$

Квантовый параллелизм

Детали:

- ▶ Разрешены только унитарные операции
- ▶ Как извлечь информацию?

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

Приготовим состояние

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

Ищем \mathcal{U} и θ , минимизирующие

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

VQE – гибридный алгоритм

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

Унитарные связанные кластеры (UCC)

Анзац имеет вид

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

где

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

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

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

Изменение параметров θ

Градиентный спуск

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

Adam

Kingma and Ba, arXiv:1412.6980

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

Quantum Natural Gradients (QNG)

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

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

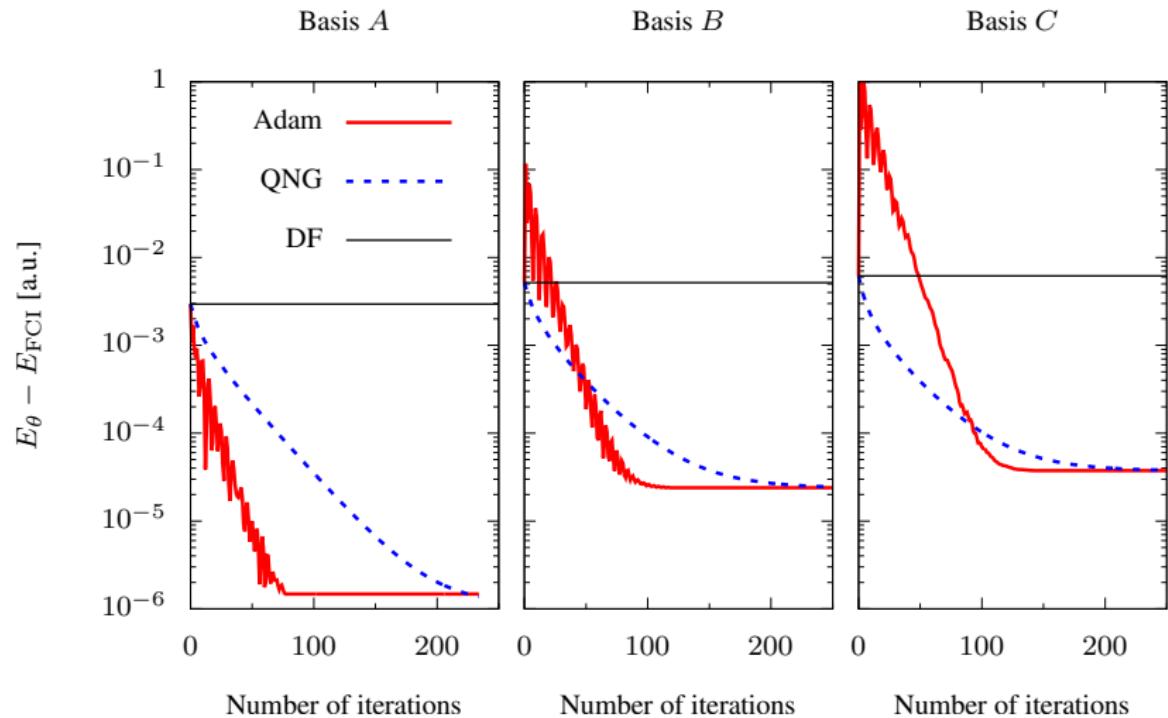
Московий

Атом московия ($Z = 115$)

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

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

Московий: VQE + UCC-SD



Заключение

Не вошло в доклад:

- ▶ другие анзацами
- ▶ кодировка и редукция кубитов
- ▶ алгоритм iterative Phase Estimation
- ▶ disentangled UCC
- ▶ Метод мнимого времени
- ▶ Алгоритм сокращения числа гейтов

arXiv:2207.08255

Заключение

Не вошло в доклад:

- ▶ другие анзацами
- ▶ кодировка и редукция кубитов
- ▶ алгоритм iterative Phase Estimation
- ▶ disentangled UCC
- ▶ Метод мнимого времени
- ▶ Алгоритм сокращения числа гейтов

arXiv:2207.08255

Спасибо за внимание!

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

Поиск 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)

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

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

Расцепленные UCC (dUCC)

- ▶ Обычный UCC

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

- ▶ dUCC

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

требуется специальный порядок операторов

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