



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 115116552 B

(45) 授权公告日 2024.08.13

(21) 申请号 202110296483.4

G06N 10/20 (2022.01)

(22) 申请日 2021.03.19

(56) 对比文件

(65) 同一申请的已公布的文献号

CN 111462825 A, 2020.07.28

申请公布号 CN 115116552 A

CN 111599414 A, 2020.08.28

(43) 申请公布日 2022.09.27

审查员 王青

(73) 专利权人 本源量子计算科技(合肥)股份有限公司

地址 230088 安徽省合肥市合肥市高新区
创新大道2800号创新产业园二期E2楼
六层

(72) 发明人 李叶 窦猛汉

(51) Int. Cl.

G16C 10/00 (2019.01)

G16C 20/50 (2019.01)

G16C 20/70 (2019.01)

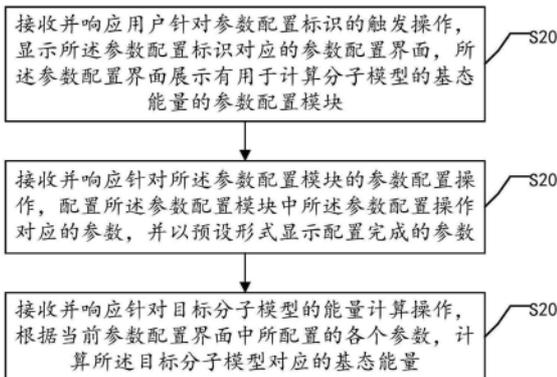
权利要求书2页 说明书12页 附图2页

(54) 发明名称

一种量子化学模拟的分子能量计算方法及装置

(57) 摘要

本发明公开了一种量子化学模拟的分子能量计算方法及装置,方法包括:接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示参数配置标识对应的参数配置界面,参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;接收并响应针对参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的几个参数,计算目标分子模型对应的基态能量。利用本发明实施例,能够为量子化学模拟计算的实现提供支持,将有技术关联的参数集中显示,配置简单,节约时间,降低用户的专业性要求,实用性较强。



1. 一种量子化学模拟的分子能量计算方法,其特征在于,所述方法包括:

接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,通过迭代计算所述目标分子模型的叠加态在目标分子模型的分子哈密顿量上的期望获得所述目标分子模型对应的基态能量,其中,目标分子模型的叠加态是初始化目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化得到的叠加态。

2. 根据权利要求1所述的方法,其特征在于,所述映射参数配置模块包括:映射方式,所述拟设参数配置模块包括:拟设方式,所述优化器参数配置模块包括:优化方法、优化参数配置方式。

3. 根据权利要求2所述的方法,其特征在于,所述接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数,包括:

当所述参数配置模块为映射参数配置模块时,接收并响应针对所述映射参数配置模块的映射方式选择操作,配置所述映射方式选择操作对应的映射方式,并显示所述映射方式及其对应的映射原理。

4. 根据权利要求2所述的方法,其特征在于,所述接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数,包括:

当所述参数配置模块为拟设参数配置模块时,接收并响应针对所述拟设参数配置模块的拟设方式选择操作,配置所述拟设方式选择操作对应的拟设方式,并显示所述拟设方式及其对应的量子线路和拟设原理。

5. 根据权利要求4所述的方法,其特征在于,所述根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量,包括:

计算目标分子模型的分子哈密顿量,并构造费米算子形式的费米哈密顿量;

根据所述映射参数配置模块配置的映射方式,将所述费米哈密顿量变换为泡利算子形式的泡利哈密顿量;

初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化,得到演化后的叠加态;其中,所述拟设方式中量子线路的可调参数由所述优化器参数配置模块确定,所述拟设方式中的拟设原理与所述泡利哈密顿量相对应;

计算所述演化后的叠加态在所述分子哈密顿量上的期望,获得所述目标分子模型在所述演化后的叠加态下的能量;

判断当前演化后的叠加态下的能量与前次演化后的叠加态下的能量差值是否小于预设阈值,若小于,将当前演化后的叠加态下的能量确定为所述目标分子模型对应的基态能量;

否则,根据所述优化器参数配置模块配置的优化参数,对当前可调参数进行优化,返回执行所述初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态的步骤,直至得到所述目标分子模型对应的基态能量。

6. 一种量子化学模拟的分子能量计算装置,其特征在于,所述装置包括:

接收显示模块,用于接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

接收配置模块,用于接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

接收计算模块,用于接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,通过迭代计算所述目标分子模型的叠加态在目标分子模型的分子哈密顿量上的期望获得所述目标分子模型对应的基态能量,其中,目标分子模型的叠加态是初始化目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化得到的叠加态。

7. 根据权利要求6所述的装置,其特征在于,所述映射参数配置模块包括:映射方式,所述拟设参数配置模块包括:拟设方式,所述优化器参数配置模块包括:优化方法、优化参数配置方式。

8. 根据权利要求7所述的装置,其特征在于,所述接收配置模块,具体用于:

当所述参数配置模块为映射参数配置模块时,接收并响应针对所述映射参数配置模块的映射方式选择操作,配置所述映射方式选择操作对应的映射方式,并显示所述映射方式及其对应的映射原理。

9. 一种存储介质,其特征在于,所述存储介质中存储有计算机程序,其中,所述计算机程序被设置为运行时执行所述权利要求1至5任一项所述的方法。

10. 一种电子装置,包括存储器和处理器,其特征在于,所述存储器中存储有计算机程序,所述处理器被设置为运行所述计算机程序以执行所述权利要求1至5任一项所述的方法。

一种量子化学模拟的分子能量计算方法及装置

技术领域

[0001] 本发明属于量子计算技术领域,特别是一种量子化学模拟的分子能量计算方法及装置。

背景技术

[0002] 量子计算机是一类遵循量子力学规律进行高速数学和逻辑运算、存储及处理量子信息的物理装置。当某个装置处理和计算的是量子信息,运行的是量子算法时,它就是量子计算机。量子计算机因其具有相对普通计算机更高效的处理数学问题的能力,例如,能将破解RSA密钥的时间从数百年加速到数小时,故成为一种正在研究中的关键技术。

[0003] 量子计算模拟是一个借助数值计算和计算机科学来仿真遵循量子力学规律的模拟计算,作为一个仿真程序,它依据量子力学的量子比特的基本定律,利用计算机的高速计算能力,刻画量子态的时空演化。

[0004] 在化学模拟领域,分子模型的原子之间在不同的键长时,具有不同的势能,即具有不同的能量。分子模型的基态,是在正常状态下化学分子处于的最低能态,也是最稳定的状态,分子基态的寻找也是化学模拟的重要组成部分。对于量子化学分子基态能量的模拟计算,通常基于量子化学理论来进行分析求解,但是需要结合量子计算应用,由于该领域的局限性和复杂性,导致用户对计算涉及的参数配置等方面的专业性和应用性不强,影响量子化学模拟应用的进一步发展。

发明内容

[0005] 本发明的目的是提供一种量子化学模拟的分子能量计算方法及装置,以解决现有技术中的不足,它能够为用户提供支持,将有技术关联的参数集中显示,配置简单,节约时间,降低用户的专业性要求,实用性较强,促进量子化学模拟应用的进一步发展。

[0006] 本申请的一个实施例提供了一种量子化学模拟的分子能量计算方法,方法包括:

[0007] 接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

[0008] 接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

[0009] 接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0010] 可选的,所述映射参数配置模块包括:映射方式,所述拟设参数配置模块包括:拟设方式,所述优化器参数配置模块包括:优化方法、优化参数配置方式。

[0011] 可选的,所述接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数,包括:

[0012] 当所述参数配置模块为映射参数配置模块时,接收并响应针对所述映射参数配置模块的映射方式选择操作,配置所述映射方式选择操作对应的映射方式,并显示所述映射方式及其对应的映射原理。

[0013] 可选的,所述接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数,包括:

[0014] 当所述参数配置模块为拟设参数配置模块时,接收并响应针对所述拟设参数配置模块的拟设方式选择操作,配置所述拟设方式选择操作对应的拟设方式,并显示所述拟设方式及其对应的量子线路和拟设原理。

[0015] 可选的,所述根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量,包括:

[0016] 计算目标分子模型的分子哈密顿量,并构造费米算子形式的费米哈密顿量;

[0017] 根据所述映射参数配置模块配置的映射方式,将所述费米哈密顿量变换为泡利算子形式的泡利哈密顿量;

[0018] 初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化,得到演化后的叠加态;其中,所述拟设方式中量子线路的可调参数由所述优化器参数配置模块确定,所述拟设方式中的拟设原理与所述泡利哈密顿量相对应;

[0019] 计算所述演化后的叠加态在所述分子哈密顿量上的期望,获得所述目标分子模型在所述演化后的叠加态下的能量;

[0020] 判断当前演化后的叠加态下的能量与前次演化后的叠加态下的能量差值是否小于预设阈值,若小于,将当前演化后的叠加态下的能量确定为所述目标分子模型对应的基态能量;

[0021] 否则,根据所述优化器参数配置模块配置的优化参数,对当前可调参数进行优化,返回执行所述初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态的步骤,直至得到所述目标分子模型对应的基态能量。

[0022] 本申请的又一实施例提供了一种量子化学模拟的分子能量计算装置,装置包括:

[0023] 接收显示模块,用于接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

[0024] 接收配置模块,用于接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

[0025] 接收计算模块,用于接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0026] 本申请的一个实施例提供了一种存储介质,所述存储介质中存储有计算机程序,其中,所述计算机程序被设置为运行时执行上述任一项所述的方法。

[0027] 本申请的一个实施例提供了一种电子装置,包括存储器和处理器,所述存储器中存储有计算机程序,所述处理器被设置为运行所述计算机程序以执行上述任一项所述的方法。

[0028] 与现有技术相比,本发明提供一种量子化学模拟的分子能量计算方法,接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示参数配置标识对应的参数配置界面,参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;接收并响应针对参数配置模块的参数配置操作,配置参数配置模块中参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;根据当前参数配置界面中所配置各个参数,计算目标分子模型对应的基态能量,从而为量子化学模拟计算的实现提供支持,并且通过将有技术关联的参数集中显示,配置简单,节约时间,降低用户的专业性要求,实用性较强,促进量子化学模拟应用的进一步发展。

附图说明

[0029] 图1为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算方法的计算机终端的硬件结构框图;

[0030] 图2为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算方法的流程图;

[0031] 图3为本发明实施例提供的一种拟设方式对应的量子线路结构示意图;

[0032] 图4为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算装置的结构示意图。

具体实施方式

[0033] 下面通过参考附图描述的实施例是示例性的,仅用于解释本发明,而不能解释为对本发明的限制。

[0034] 本发明实施例首先提供了一种量子化学模拟的分子能量计算方法,该方法可以应用于电子设备,如计算机终端,具体如普通电脑、量子计算机等。

[0035] 下面以运行在计算机终端上为例对其进行详细说明。图1为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算方法的计算机终端的硬件结构框图。如图1所示,计算机终端可以包括一个或多个(图1中仅示出一个)处理器102(处理器102可以包括但不限于微处理器MCU或可编程逻辑器件FPGA等的处理装置)和用于存储数据的存储器104,可选地,上述计算机终端还可以包括用于通信功能的传输装置106以及输入输出设备108。本领域普通技术人员可以理解,图1所示的结构仅为示意,其并不对上述计算机终端的结构造成限定。例如,计算机终端还可包括比图1中所示更多或者更少的组件,或者具有与图1所示不同的配置。

[0036] 存储器104可用于存储应用程序的软件程序以及模块,如本申请实施例中的量子化学模拟的分子能量计算方法对应的程序指令/模块,处理器102通过运行存储在存储器104内的软件程序以及模块,从而执行各种功能应用以及数据处理,即实现上述的方法。存

存储器104可包括高速随机存储器,还可包括非易失性存储器,如一个或者多个磁性存储装置、闪存、或者其他非易失性固态存储器。在一些实例中,存储器104可进一步包括相对于处理器102远程设置的存储器,这些远程存储器可以通过网络连接至计算机终端。上述网络的实例包括但不限于互联网、企业内部网、局域网、移动通信网及其组合。

[0037] 传输装置106用于经由一个网络接收或者发送数据。上述的网络具体实例可包括计算机终端的通信供应商提供的无线网络。在一个实例中,传输装置106包括一个网络适配器(Network Interface Controller, NIC),其可通过基站与其他网络设备相连从而可与互联网进行通讯。在一个实例中,传输装置106可以为射频(Radio Frequency, RF)模块,其用于通过无线方式与互联网进行通讯。

[0038] 量子计算是一种遵循量子力学规律调控量子信息单元进行计算的新型计算模式,其中,量子计算基于的最基本的一个原理为量子力学态叠加原理,量子力学态叠加原理使得量子信息单元的状态可以处于多种可能性的叠加状态,从而使得量子信息处理从效率上相比于经典信息处理具有更大潜力。一个量子系统包含若干粒子,这些粒子按照量子力学的规律运动,称此系统处于态空间的某种量子态,而对于化学分子来说,可以实现量子化学模拟,为量子计算提供研究支持。

[0039] 需要说明的是,真正的量子计算机是混合结构的,它包含两大部分:一部分是经典计算机,负责执行经典计算与控制;另一部分是量子设备,负责运行量子程序进而实现量子计算。而量子程序是由量子语言如QRunes语言编写的一串能够在量子计算机上运行的指令序列,实现了对量子逻辑门操作的支持,并最终实现量子计算。具体的说,量子程序就是一系列按照一定时序操作量子逻辑门的指令序列。

[0040] 在实际应用中,因受限于量子设备硬件的发展,通常需要进行量子计算模拟以验证量子算法、量子应用等等。量子计算模拟即借助普通计算机的资源搭建的虚拟架构(即量子虚拟机)实现特定问题对应的量子程序的模拟运行的过程。通常,需要构建特定问题对应的量子程序。本发明实施例所指量子程序,即是经典语言编写的表征量子比特及其演化的程序,其中与量子计算相关的量子比特、量子逻辑门等等均有相应的经典代码表示。

[0041] 量子线路作为量子程序的一种体现方式,也称量子逻辑电路,是最常用的通用量子计算模型,表示在抽象概念下对于量子比特进行操作的线路,其组成包括量子比特、线路(时间线),以及各种量子逻辑门,最后常需要通过量子测量操作将结果读取出来。

[0042] 不同于传统电路是用金属线所连接以传递电压信号或电流信号,在量子线路中,线路可看成是由时间所连接,亦即量子比特的状态随着时间自然演化,在这过程中按照哈密顿运算符的指示,一直到遇上逻辑门而被操作。

[0043] 一个量子程序整体上对应有一条总的量子线路,本发明所述量子程序即指该条总的量子线路,其中,该总的量子线路中的量子比特总数与量子程序的量子比特总数相同。可以理解为:一个量子程序可以由量子线路、针对量子线路中量子比特的测量操作、保存测量结果的寄存器及控制流节点(跳转指令)组成,一条量子线路可以包含几十上百个甚至千上万个量子逻辑门操作。量子程序的执行过程,就是对所有的量子逻辑门按照一定时序执行的过程。需要说明的是,时序即单个量子逻辑门被执行的时间顺序。

[0044] 需要说明的是,经典计算中,最基本的单元是比特,而最基本的控制模式是逻辑门,可以通过逻辑门的组合来达到控制电路的目的。类似地,处理量子比特的方式就是量子

逻辑门。使用量子逻辑门,能够使量子态发生演化,量子逻辑门是构成量子线路的基础,量子逻辑门包括单比特量子逻辑门,如Hadamard门(H门,阿达马门)、泡利-X门(X门)、泡利-Y门(Y门)、泡利-Z门(Z门)、RX门、RY门、RZ门等等;两比特或多比特量子逻辑门,如CNOT门、CR门、CZ门、iSWAP门、Toffoli门等等。量子逻辑门一般使用酉矩阵表示,而酉矩阵不仅是矩阵形式,也是一种操作和变换。一般量子逻辑门在量子态上的作用是通过酉矩阵左乘以量子态右矢对应的矩阵进行计算的。

[0045] 参见图2,图2为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算方法的流程图示意图,可以包括如下步骤:

[0046] S201,接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;

[0047] 具体的,参数配置标识可以是文本标识或图形标识,触发操作可以是点击操作等等。例如,用户可以点击量子化学模拟应用主界面的参数配置标识,在次级界面显示对应的参数配置界面,在参数配置界面上显示用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块,参数配置模块可以包括技术关联的子模块,将子模块中相关联的参数一并展示出来,方便用户配置和计算。

[0048] 具体的,子模块可以包括但不限于:用于将分子模型的费米哈密顿量映射(可以包括其反对易关系)到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块。

[0049] 其中,分子模型可以认为是用户想要计算基态能量的分子结构建模,例如包括组成该化学分子的原子类型、原子个数、原子坐标、电荷及自旋多重度等等。

[0050] S202,接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

[0051] 具体的,映射参数配置模块可以包括:映射方式,拟设参数配置模块可以包括:拟设方式,优化器参数配置模块可以包括:优化方法、优化参数配置方式等等。

[0052] 当针对的参数配置模块为映射参数配置模块时,可以接收并响应针对映射参数配置模块的映射方式选择操作,配置映射方式选择操作对应的映射方式,并显示映射方式及其对应的映射原理。

[0053] 示例性的,映射方式包括:Jordan-Wigner变换(J-W变换)、Parity变换、Bravyi-Kitaev变换(B-K变换)、SegmentParity变换等等。

[0054] 本领域技术人员能够理解的是,每种映射方式对应的映射原理可以包括:态映射原理和算符映射原理。

[0055] 例如,对于J-W变换,显示的态映射为:

$$[0056] \begin{pmatrix} q0 \\ q1 \\ q2 \\ q3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f0 \\ f1 \\ f2 \\ f3 \end{pmatrix}$$

[0057] 其中, $\begin{pmatrix} q0 \\ q1 \\ q2 \\ q3 \end{pmatrix}$ 表示量子比特的计算态, $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ 表示变换矩阵, $\begin{pmatrix} f0 \\ f1 \\ f2 \\ f3 \end{pmatrix}$ 表

示费米子体系的占据态。显示的算符映射为:

$$[0058] \quad a_j^\pm \Rightarrow Z_{P(j)} \left(\frac{X_j \mp iY_j}{2} \right)$$

[0059] 其中, a_j^\pm 表示升降算符, j 表示量子比特序号, P 表示宇称集, $Z_{P(j)}$ 表示作用于属于宇称集 P 的量子比特上的一组泡利 Z 矩阵, X 表示泡利 X 矩阵, Y 表示泡利 Y 矩阵。

[0060] 同等的, 算符映射也可显示为:

$$[0061] \quad a_j^\dagger = I^{\otimes n-j-1} \otimes \hat{Q}_j^\dagger \otimes Z_{j-1}^-$$

$$[0062] \quad a_j = I^{\otimes n-j-1} \otimes \hat{Q}_j \otimes Z_{j-1}^-$$

[0063] 其中, a_j^\dagger 表示产生算符, a_j 表示湮灭算符, a_j^\dagger 与 a_j 统称费米子体系的升降算符, $\hat{Q}_j^\dagger/\hat{Q}_j$ 表示量子比特上的产生算符/湮灭算符, Z_{j-1}^- 表示宇称算子, n 表示量子比特数。

[0064] 其他变换的态映射和算符映射显示方式与 J - W 变换同理。具体的, 对于 Parity 变换, 显示的态映射可以为:

$$[0065] \quad \begin{pmatrix} q0 \\ q1 \\ q2 \\ q3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f0 \\ f1 \\ f2 \\ f3 \end{pmatrix}$$

[0066] 算符映射为:

$$[0067] \quad a_j^\pm = \left(\frac{Z_{j-1} X_j \mp iY_j}{2} \right) X_{U(j)}$$

[0068] 其中, U 表示更新集, 即表示需要更新 Parity (宇称) 的量子比特的集合, $X_{U(j)}$ 表示作用于属于更新集的量子比特上的一组泡利 X 矩阵。

[0069] 对于 B - K 变换, 显示的态映射为:

$$[0070] \quad \begin{pmatrix} q0 \\ q1 \\ q2 \\ q3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f0 \\ f1 \\ f2 \\ f3 \end{pmatrix}$$

[0071] 算符映射为:

$$[0072] \quad a_j^\pm = \left(\frac{Z_{P(j)} X_j \mp iY_{P(j)-F(j)}}{2} \right) X_{U(j)}$$

[0073] 其中, F 表示翻转集, 即量子比特占据态需要翻转的量子比特的集合, $P(j)-F(j)$ 表

示:将P(j)中与F(j)中重合的量子比特去除。

[0074] 对于S-P变换,显示的态映射为:

$$[0075] \begin{pmatrix} q0 \\ q1 \\ q2 \\ q3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f0 \\ f1 \\ f2 \\ f3 \end{pmatrix}$$

[0076] 算符映射为:

[0077] q_j 是记录Parity宇称信息的宇称比特时:

$$[0078] a_j^\pm = Z_{P_1(j)} \left(\frac{Z_{P_2(j)} X_j \bar{\mp} i Y_{P(j)}}{2} \right)$$

[0079] q_j 是非宇称比特时:

$$[0080] a_j^\pm = Z_{P_1(j)} Z_{P_2(j)} \left(\frac{X_j \bar{\mp} i Y_{P(j)}}{2} \right) X_{U(j)}$$

[0081] 当针对的参数配置模块为拟设参数配置模块时,接收并响应针对拟设参数配置模块的拟设方式选择操作,配置拟设方式选择操作对应的拟设方式,并显示拟设方式及其对应的量子线路和拟设(ansatz)原理。

[0082] 示例性的,拟设方式包括:UCC(Unitary Coupled Cluster,么正耦合簇算符)等等,UCC具体可分为单激发偶合簇UCCS、单双激发偶合簇UCCSD。

[0083] 对应的,对于UCCS和UCCSD,拟设对应的量子线路相同,例如为图3所示。图3为一种4量子比特 q_0 、 q_1 、 q_2 、 q_3 的量子线路示意图, $X_{-\pi/2}$ 、 $X_{\pi/2}$ 表示参数分别为 $-\pi/2$ 、 $\pi/2$ 的X门,Y门同理,图标 \oplus 及其与实心连线表示CNOT门, Z_θ 表示参数为 θ 的Z门。显示的拟设原理可以包括:拟设公式,例如可以为量子线路对应的矩阵算子 $U(\theta)$ 。对于UCC,对应拟设公式为:

$$[0084] U(\theta) = e^{T-T^\dagger} \Rightarrow \prod_i e^{i\theta_i P_i}$$

[0085] 其中, e^{T-T^\dagger} 即为拟设, P_i 为生成元,若UCC中的电子簇算符 $T=T_1$,则称这一拟设为UCCS;若UCC中的簇算符 $T=T_1+T_2$,则称这个拟设为UCCSD,其中, T_1 为单粒子激发算符, T_2 为双粒子激发算符。更具体的,在实际应用中,T即可理解为费米哈密顿量。

[0086] 当针对的参数配置模块为优化器参数配置模块时,配置的参数包括但不限于:优化方法及其附属参数、优化参数配置方式。具体的,优化方法可以为梯度无关算法如Nelder-Mead算法或梯度相关算法如梯度下降法等等,优化参数配置方式可分为随机配置和自定义配置,具体是指,拟设对应的量子线路中量子逻辑门的待优化参数 θ 的初始值,可由随机初始化或自定义设置确定。

[0087] 例如,接收用户针对优化器参数配置模块的参数配置操作,配置优化方法为Nelder-Mead,对应附属参数中,迭代次数设为200、函数调用次数设为200、变量收敛精度设为 $1e-4$ 、函数值收敛精度设为 $1e-4$ 或 $1e-6$,优化参数配置方法选为随机。对于不同的优化方法,优化器参数配置模块还可以包括学习率、动量系数等其他附属参数。

[0088] 需要强调的是,以上提出的映射方式、拟设方式及优化方法等仅仅作为示例,并不

构成对本发明的限定,例如,拟设方式还包括HE (Hardware Efficient,硬件高效)、SP (Symmetry Preserved,对称保持)等等。

[0089] S203,接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0090] 具体地,如上文说明,不同分子模型对应该化学分子处于不同能态,例如,氢分子处于不同能态时,其两个原子的距离不同,但是肯定会有一个距离对应最稳定状态,也就是能量最低的状态即氢分子的基态,此处即计算该基态能量。

[0091] 示例性的,一种具体的计算方式可以如下:

[0092] S2031,计算目标分子模型的分子哈密顿量,并构造费米算子形式的费米哈密顿量;

[0093] 首先获得待计算的目标分子模型的哈密顿量。其中,哈密顿量是所有粒子的动能的总和加上与系统相关的粒子的势能。对于不同的情况或数量的粒子,哈密顿量是不同的,因为它包括粒子的动能之和以及对应于这种情况的势能函数,一般用H表示。在量子力学中,经典力学的物理量变为相应的算符,哈密顿量对应的正是哈密顿算符。

[0094] 具体的,可以根据分子模型的固有性质的参数如分子坐标、电荷或自旋多重度等等,通过化学开源计算库(量子化学计算包),计算分子哈密顿量 H_p ,然后将其哈密顿量用费米算符转化表示,得到费米哈密顿量 H_u 。

[0095] S2032,根据所述映射参数配置模块配置的映射方式,将所述费米哈密顿量变换为泡利算子形式的泡利哈密顿量;

[0096] 其中,将费米(子)哈密顿量通过所配置的映射方式,变换为泡利算符表示的泡利哈密顿量。例如,对于UCC的拟设 e^{T-T^\dagger} ,T为费米算符表示的哈密顿量,需要将其变换为泡利算子形式,以便根据泡利算子生成酉算子,酉算子正是构造拟设对应的具体量子线路的基础。

[0097] S2033,初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化,得到演化后的叠加态;其中,所述拟设方式中量子线路的可调参数由所述优化器参数配置模块确定,且拟设原理与泡利哈密顿量对应关联;

[0098] 例如,对于含有四个单电子自旋分子轨道两个电子的氢分子的Hartree-Fock(哈特里-福克)态,是用量子态 $|0011\rangle$ 来表示的,即一个量子比特代表一个自旋分子轨道, $|0\rangle$ 表示空轨道, $|1\rangle$ 表示占据轨道。通过在对应比特上分别施加一个NOT门,就可以在量子线路中将 $|0000\rangle$ 初始化成 $|0011\rangle$ 。对于任意一个含有M个自旋分子轨道的N电子体系,对应hartree-fock态都可以同理表示。

[0099] 根据拟设参数配置模块所配置的拟设方式,假设为UCC的拟设 e^{T-T^\dagger} ,则从Hartree-Fock分子轨道 $|\varphi\rangle$ 出发,通过拟设得到叠加态 $|\psi\rangle$:

$$[0100] \quad |\psi\rangle = e^{T-T^\dagger} |\varphi\rangle_{\text{Hartree-Fock}}$$

[0101] 其中, $|\varphi\rangle_{\text{Hartree-Fock}}$ 即为Hartree-Fock态,而拟设方式对应的量子线路即为拟设 e^{T-T^\dagger} 的具体实现方式,在构造拟设对应的量子线路时,在将费米哈密顿量通过J-W变换为

泡利算子形式后,还可以通过渐进近似定理——特罗特公式(Trotter Formula),进一步便于将泡利算子的哈密顿量分解生成含可调参数的酉算子。

[0102] 通过运行对应量子线路,可以将Hartree-Fock态演化为叠加态 $|\psi\rangle$,量子线路中可调参数的初始值由所述优化器参数配置模块确定,如前述随机初始化或自定义设置确定。

[0103] S2034,计算所述演化后的叠加态在所述分子哈密顿量上的期望,获得所述目标分子模型在所述演化后的叠加态下的能量;

[0104] 具体的,在制备出叠加态 $|\psi\rangle$ 后,可以利用量子期望估计算法计算叠加态 $|\psi\rangle$ 在分子哈密顿量上的期望。

[0105] 其中,量子期望估计,是指对于多电子体系、Heisenberg模型(海森堡模型)、量子Ising模型(易辛模型)等体系的哈密顿量H可以展开成多个泡利算符形式的子项的和。由于可观测量是线性的,因此在利用下式计算体系的平均能量E时:

$$[0106] \quad E = \langle \psi^* | H | \psi \rangle$$

[0107] 其中, ψ^* 为 ψ 的转置共轭, ψ^* 与 ψ 是正交归一的。该等式右边也可以对应展开成子项之和的形式。通过对每个子项求期望,然后对各个期望求和,就能得到体系的平均能量,即目标分子模型在演化后的叠加态下的能量。

[0108] 在一种具体实现中,可以构造测量线路对叠加态 $|\psi\rangle$ 进行测量,测量出期望值。测量线路可以通过J-W变换等方法将化学开源计算库所计算出来的氢分子哈密顿量 H_p 映射到量子比特构造出来。在测量期望时,所运用的方法可为前述量子期望估计算法,即首先分别构造整个分子哈密顿量 H_p 的各子项的测量线路,测量出各个子项的期望 $E(i)$ 。然后,计算分子在该叠加态下的平均能量 $E_m = \sum_{i=1}^m E(i)$ 。其中,m表示子项数。

[0109] S2035,判断当前演化后的叠加态下的能量与前次演化后的叠加态下的能量差值是否小于预设阈值,若小于,将当前演化后的叠加态下的能量确定为所述目标分子模型对应的基态能量;

[0110] 否则,根据所述优化器参数配置模块配置的优化参数,对当前可调参数进行优化,返回执行所述初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态的步骤,直至得到所述目标分子模型对应的基态能量。

[0111] 在实际应用中,对于任意一个试验态即叠加态 $|\psi\rangle$ (它为一个品优波函数),用某一体系(如多电子体系)的哈密顿量作用于它时,可以得到该体系在这一状态下的平均能量E,该平均能量大于或等于体系的基态能量 E_0 。不断调整试验态,直到当试验态 $|\psi\rangle$ 为体系的基态 $|\psi_0\rangle$ 时,则对应得到体系的基态能量 E_0 。

[0112] 具体的,在当前演化为第一次演化时,前次演化不存在,可以默认前次演化后的叠加态下的能量为0,或直接进入下一次迭代。在能量差值小于预设阈值时,即未达到收敛,此时,根据优化器参数配置模块配置的优化方法、函数调用次数(求期望的函数)、变量收敛精度、函数值(期望值)收敛精度等等,调用该优化方法,对拟设中量子线路的可调参数进行优化,更新优化后的参数,返回执行S2033的步骤,直到某次演化的能量差值小于预设阈值,将该次演化后的叠加态下的能量确定为目标分子模型对应的基态能量。其中,预设阈值可根据实际需求设定,可以与配置的函数值收敛精度保持一致。

[0113] 可见,通过接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示参数配置标识对应的参数配置界面,参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;

其中,参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;接收并响应针对参数配置模块的参数配置操作,配置参数配置模块中参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算目标分子模型对应的基态能量,从而为量子化学模拟计算的实现提供支持,并且通过将有技术关联的参数集中显示,配置简单,节约时间,降低用户的专业性要求,实用性较强,促进量子化学模拟应用的进一步发展。

[0114] 参见图4,图4为本发明实施例提供的一种量子化学模拟的分子能量计算装置的结构示意图,与图2所示的流程相对应,所述装置包括:

[0115] 接收显示模块401,用于接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

[0116] 接收配置模块402,用于接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

[0117] 接收计算模块403,用于接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0118] 具体的,所述映射参数配置模块包括:映射方式,所述拟设参数配置模块包括:拟设方式,所述优化器参数配置模块包括:优化方法、优化参数配置方式。

[0119] 具体的,所述接收配置模块,具体用于:

[0120] 当所述参数配置模块为映射参数配置模块时,接收并响应针对所述映射参数配置模块的映射方式选择操作,配置所述映射方式选择操作对应的映射方式,并显示所述映射方式及其对应的映射原理。

[0121] 具体的,所述接收配置模块,具体用于:

[0122] 当所述参数配置模块为拟设参数配置模块时,接收并响应针对所述拟设参数配置模块的拟设方式选择操作,配置所述拟设方式选择操作对应的拟设方式,并显示所述拟设方式及其对应的量子线路和拟设原理。

[0123] 具体的,所述接收计算模块,具体用于:

[0124] 计算目标分子模型的费米算子形式的费米哈密顿量;

[0125] 根据所述映射参数配置模块配置的映射方式,将所述费米哈密顿量变换为泡利算子形式的泡利哈密顿量;

[0126] 初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态,根据所述拟设参数配置模块配置的拟设方式,对所述Hartree-Fock态进行演化,得到演化后的叠加态;其中,所述拟设方式中量子线路的可调参数由所述优化器参数配置模块确定;

[0127] 计算所述演化后的叠加态在所述泡利哈密顿量上的期望,获得所述目标分子模型在所述演化后的叠加态下的能量;

[0128] 判断当前演化后的叠加态下的能量与前次演化后的叠加态下的能量差值是否小于预设阈值,若小于,将当前演化后的叠加态下的能量确定为所述目标分子模型对应的基

态能量；

[0129] 否则,根据所述优化器参数配置模块配置的优化参数,对当前可调参数进行优化,返回执行所述初始化所述目标分子模型的Hartree-Fock态的步骤,直至得到所述目标分子模型对应的基态能量。

[0130] 可见,通过接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示参数配置标识对应的参数配置界面,参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;接收并响应针对参数配置模块的参数配置操作,配置参数配置模块中参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算目标分子模型对应的基态能量,从而为量子化学模拟计算的实现提供支持,并且通过将有技术关联的参数集中显示,配置简单,节约时间,降低用户的专业性要求,实用性较强,促进量子化学模拟应用的进一步发展。

[0131] 本发明实施例还提供了一种存储介质,所述存储介质中存储有计算机程序,其中,所述计算机程序被设置为运行时执行上述任一项方法实施例中的步骤。

[0132] 具体的,在本实施例中,上述存储介质可以被设置为存储用于执行以下步骤的计算机程序:

[0133] S1,接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块;

[0134] S2,接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数;

[0135] S3,接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0136] 具体的,在本实施例中,上述存储介质可以包括但不限于:U盘、只读存储器(Read-Only Memory,简称为ROM)、随机存取存储器(Random Access Memory,简称为RAM)、移动硬盘、磁碟或者光盘等各种可以存储计算机程序的介质。

[0137] 本发明实施例还提供了一种电子装置,包括存储器和处理器,其特征在于,所述存储器中存储有计算机程序,所述处理器被设置为运行所述计算机程序以执行上述任一项方法实施例中的步骤。

[0138] 具体的,上述电子装置还可以包括传输设备以及输入输出设备,其中,该传输设备和上述处理器连接,该输入输出设备和上述处理器连接。

[0139] 具体的,在本实施例中,上述处理器可以被设置为通过计算机程序执行以下步骤:

[0140] S1,接收并响应用户针对参数配置标识的触发操作,显示所述参数配置标识对应的参数配置界面,所述参数配置界面展示有用于计算分子模型的基态能量的参数配置模块;其中,所述参数配置模块包括:用于将分子模型的费米哈密顿量映射到量子比特的映射参数配置模块、用于制备待计算分子模型的能量对应的叠加态的拟设参数配置模块、以及

用于迭代优化叠加态以达到基态的优化器参数配置模块；

[0141] S2,接收并响应针对所述参数配置模块的参数配置操作,配置所述参数配置模块中所述参数配置操作对应的参数,并以预设形式显示配置完成的参数；

[0142] S3,接收并响应针对目标分子模型的能量计算操作,根据当前参数配置界面中所配置的各个参数,计算所述目标分子模型对应的基态能量。

[0143] 以上依据图式所示的实施例详细说明了本发明的构造、特征及作用效果,以上所述仅为本发明的较佳实施例,但本发明不以图面所示限定实施范围,凡是依照本发明的构想所作的改变,或修改为等同变化的等效实施例,仍未超出说明书与图示所涵盖的精神时,均应在本发明的保护范围内。

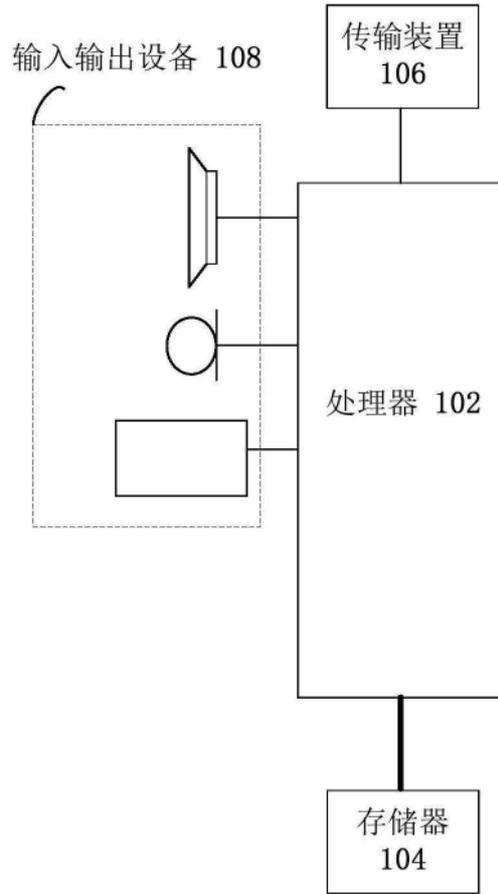


图1

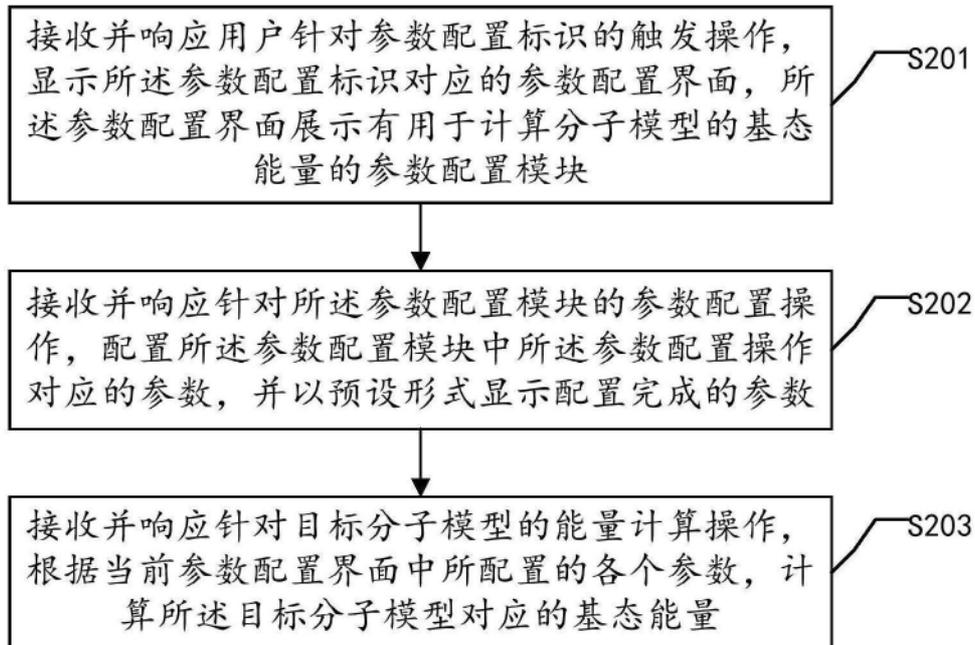


图2

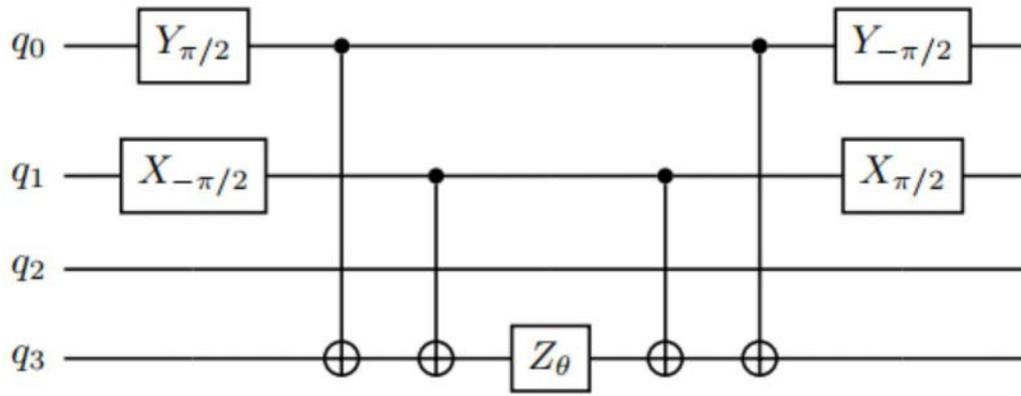


图3

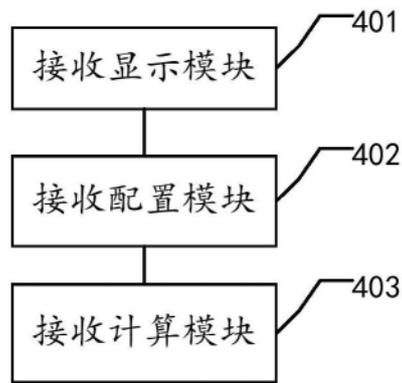


图4