



Title	Developing Efficient Quantum Algorithms for State Preparation and Post-Processing in Quantum Chemistry
Author(s)	Khinevich, Viktor
Citation	大阪大学, 2026, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/105546
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (Khinevich Viktor)	
Title	Developing Efficient Quantum Algorithms for State Preparation and Post-Processing in Quantum Chemistry (量子化学計算における状態準備および後処理のための高効率な量子アルゴリズムの開発)
Abstract of Thesis Quantum computers are anticipated to provide computational advantages over classical devices for specific classes of problems. In quantum chemistry, such an advantage can be achieved on fault-tolerant quantum computers (FTQCs) using quantum phase estimation (QPE), which can, in principle, provide accurate electronic energies with polynomial scaling. However, the practical success of QPE and related algorithms critically depends on the availability of high-quality initial quantum states with sufficient overlap with the target eigenstates. Moreover, even FTQCs are expected to be limited in size and total computational resources for the foreseeable future, restricting quantum calculations to reduced subspaces and allowing only a partial treatment of electronic correlation. For chemically meaningful predictions, the remaining correlation effects must therefore be recovered through post-processing. Motivated by these limitations, this dissertation develops two complementary strategies for the preparation of chemically relevant quantum states on FTQCs and a classical post-processing scheme. The first strategy introduces a unified framework for power-iteration-like state preparation methods based on generalized quantum signal processing (GQSP). This framework encompasses and generalizes several quantum algorithms, including quantum power iteration, quantum power Lanczos, quantum inverse iteration, and quantum folded spectrum method, enabling efficient energy filtering. The second strategy enforces fundamental physical symmetries of electronic Hamiltonians, such as particle number and spin. Symmetry projectors are constructed using linear combination of unitaries, GQSP and generalized quantum singular value transformation. They ensure symmetry-adapted state preparation and improve overlap with target eigenstates. A classical post-processing framework was also designed to recover the electronic correlation not captured by quantum calculations in restricted subspaces. This method, referred to as QC-CBT-AFQMC (quantum-classical computational basis tomography auxiliary-field quantum Monte Carlo), enables the reconstruction of quantum-prepared multiconfigurational wave functions and their subsequent refinement. Together, the proposed quantum state preparation algorithms and the QC-CBT-AFQMC post-processing pipeline establish a concrete hybrid quantum-classical workflow. These approaches extend the reach of FTQC toward quantitatively accurate and chemically relevant simulations of strongly correlated molecular systems.	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (Khinevich Viktor)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	藤井 啓祐
	副 査	教 授	山本 俊
	副 査	教 授	北河 康隆
	副 査	教 授	水上 渉 (量子情報・量子生命研究センター)
	副 査	准教授	御手洗 光祐

論文審査の結果の要旨

本論文は、量子化学計算における量子計算優位性の実現に向けて、誤り耐性量子コンピュータ (FTQC) 上での効率的な量子状態準備手法と古典計算機による後処理手法を統合的に提案するものである。量子コンピュータは量子位相推定 (QPE) を通じて分子のエネルギーの高精度計算への応用が期待されているが、QPEの成功確率は準備された初期量子状態と目標固有状態との重なりに依存する。そのため、QPEは実用上高品質な初期状態の準備が不可欠となっている。加えて、この問題が解決されたとしても、FTQCのゲート操作の速度は古典コンピュータよりも大幅に低くなると見込まれており、QPEの適用は電子状態のなかでも制限された活性空間内の問題に当面限定されてしまう。量子化学計算において定量的な計算には活性空間外の記述が不可欠であることは広く知られており、活性空間外の電子相関を回復するための古典後処理は不可避となっている。本論文はこれらの制約を正面から捉え、実用的な量子化学計算に向けた具体的解決策を提示している。

そうした解決策として、まず本論文では、固有値問題に対して古典コンピュータで広範に使われている「べき乗法」、一般化量子信号処理 (GQSP) に基づき統一的に量子コンピュータ上で実現する枠組みを構築し、量子べき乗反復法を中心とした量子状態準備手法群を開発している。この枠組みにより、量子べき乗法、量子Lanczos法、量子逆反復法、量子折り畳みスペクトル法といった既存の状態準備アルゴリズムを包含・一般化することで、効率的なエネルギーフィルタリングを可能にしている。

次に本論文では、分子ハミルトニアンが持つ粒子数保存やスピン対称性といった基本的な連続対称性に着目し、線形結合ユニタリ (LCU)、GQSP、一般化量子特異値変換 (GQSVT) を用いた対称性射影子の体系的な構成法を開発している。複数の射影子構成法の資源コストを比較し、最も効率的な実装を特定するとともに、対称性フィルタリングがQPEの成功確率を大幅に向上させることを数値的に示している。特に、FeMocoのような強相関系に対して、QPEと比較して数桁低いコストでの対称性適合状態の準備が実現可能であることを明らかにしている。

最後に、第三のアプローチとして本論文では、制限された活性空間では捉えきれない電子相関を回復するための古典後処理手法QC-CBT-AFQMCを提案している。この手法は、計算基底トモグラフィ (CBT) を用いて量子計算で生成された多配置波動関数を効率的に再構成し、補助場量子モンテカルロ法 (AFQMC) の試行波動関数として活用するものである。既存のQC-AFQMC手法と比較して大幅な計算コストの削減を達成しつつ高い精度を維持することを、水酸化ラジカル、エチレン、窒素分子等のポテンシャルエネルギー曲面の計算および[3+2]環化付加反応の反応障壁の推定を通じて実証している。

このように本論文は、FTQCを前提として、実用的な量子化学計算のための初期状態準備と古典後処理を含む具体的な計算フローを提示し、1) GQSPに基づくべき乗法の量子コンピュータ上での統一的実装法の確立、2) 分子ハミルトニアンの連続対称性を活用した対称性射影子の体系的構成法の開発、3) CBTとAFQMCを組み合わせた効率的な古典後処理手法の提案とその実証、という三つの重要な成果を達成している。これらの成果は、量子コンピュータの量子化学分野への実応用に向けた重要な理論的・技術的基盤を提供し、FTQCと古典計算化学の融合分野の発展に寄与するものである。以上の理由から博士 (理学) の学位論文として価値があるものと認める。