



Title	Quantum Classical Hybrid Algorithms for Accurate Quantum Chemistry Calculations with Resource-Limited Quantum Computers
Author(s)	Erhart, Luca Klaus
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/98685">https://doi.org/10.18910/98685</a>
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 ( Luca Erhart )	
Title	Quantum Classical Hybrid Algorithms for Accurate Quantum Chemistry Calculations with Resource-Limited Quantum Computers (高精度量子化学計算に向けた量子コンピュータのリソース制約を考慮した量子古典混合アルゴリズム)
<p>Quantum computing offers new possibilities in Quantum chemistry for calculating the electronic structure of a molecule. Quantum computers, which utilize quantum mechanical principles for their computations, are generally considered to be better suited for this task than classical hardware. On the other hand, quantum computers are severely limited by their number of qubits and the number of operations they can perform with high fidelity. This limits the number of degrees of freedom (i.e., orbitals) that can be considered in an electronic structure calculation for a molecule on a quantum computer. For the foreseeable future, quantum computers alone are unlikely to be able to handle problems involving molecules of realistic size. Practical problems in quantum chemistry require quantum-classical hybrid algorithms that combine a quantum computer with a classical computer.</p> <p>In this thesis, we address the issue of the limitation of orbital numbers for calculating the electronic structure of a molecule using quantum computing in different ways.</p> <p>One way we effectively increase the number of orbitals that can be considered is by using a divide-and-conquer method. One particular algorithm that uses this method is the deep Variational Quantum Eigensolver (deep VQE). This kind of method misses some correlation energies when recombining the divided systems. We examined multiple methods to recombine the divided systems and compared them regarding accuracy and computational requirements. Using our newly proposed strategies, the deep VQE algorithm can significantly reduce the number of qubits required to calculate the electronic structure of a molecule. We were even able to showcase this advantage by calculating the ground state energy of retinal, a molecule that plays an important role in the human retina.</p> <p>Our second approach involves compensating for degrees of freedom that cannot be handled by the quantum computer using classical post-processing techniques. A common strategy is to reduce the computational cost of an electronic structure calculation of a molecule by using the active space approximation. In the active space approximation method, only a molecule's most relevant orbitals and electrons are considered for the calculation. Such an approach can produce inaccurate results due to the missing electron correlation from ignored orbitals and electrons. We improved the active space approximation using a post-process correction method. We calculate the active space accurately on a quantum computer and take consider the missing electron correlation in a follow-up tailored coupled cluster calculation on a classical computer. We show that we successfully reintroduce the missing electron correlation on multiple, molecules and use it to predict the activation energy of a chemical reaction.</p> <p>The third approach we explore involves developing an Ansatz (wave function representation) that can be used interchangeably between quantum and classical computers. Coupled Cluster (CC) theory is a highly effective framework in computational chemistry to calculate electronic structures. The CC method is not variational, and it can fail to predict the electronic structures of molecules with strongly correlated electrons. A variational variant of the CC methods (VCC) prevents this failure. However, on a classical computer VCC requires an exponential computational cost, making VCC calculations virtually impossible for most molecules. We propose a method for applying an approximated version of the VCC that scales polynomials in system size on a quantum computer, and allows us to represent an approximation of the VCC wave function. The parameters can be optimized in a quantum-classical hybrid approach. The relationship between VCC and CC allows for a classical approximation of the VCC parameters, resulting in fast convergence on the quantum computer and, in addition, the efficient extraction of information about the quantum state. We show that the approximated version of the VCC on the quantum computer produces results that are in good agreement with the conventional VCC algorithm.</p> <p>We show three different approaches how quantum classical hybrid algorithms using a resource-limited quantum computer can be used for accurate quantum chemistry calculations.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

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

論文審査の結果の要旨

本論文は、量子コンピュータを用いた量子化学計算における「軌道数の制限問題」に対して、その解決に向けた三つの異なるアプローチを量子古典ハイブリッドアルゴリズムの枠組みの中で提案するものとなっている。量子コンピュータを用いた量子化学計算、より正確には電子状態計算、では「軌道」という自由度を量子ビットと対応させる。しかしながら、現在の量子コンピュータはノイズの影響があり実行可能な操作数に厳しい制限があり、量子化学計算で利用できる量子ビット数は限定されている。将来ノイズのない誤り耐性量子コンピュータができたとしても、ノイズの影響がなくなる代わりに実行時間に大きなオーバーヘッドがかかるため、実行時間の都合上取り扱える軌道の数には大きな制限がかかると予想されている。

この問題に対処するべくまず本論文では、分割統治法に基づき大規模な問題を少ない数の量子ビットで記述するための量子古典ハイブリッドアルゴリズム deep Variational Quantum Eigensolver (deep VQE)を量子化学計算に向けて改良している。改良のために分割した領域を再結合させるための方法を詳細に検討し、分子の電子状態に必要な量子ビット数を削減することに成功している。改良した手法は、視覚にも関わる分子レチナールの基底状態計算に対して応用・検証されている。

次に本論文では、量子コンピュータで直接扱えない自由度（軌道）について、量子計算後のポストプロセスとして古典コンピュータ上で考慮する方法を提案している。このプロセスは、Computational Basis Tomography (CBT) という手法により量子コンピュータから波動関数の情報を効率的に取得し、得られた波動関数の方法を結合クラスター波動関数に埋め戻すテーラード結合クラスター法(TCC)を使うことで実現している。提案手法CBT-TCCは、化学反応の活性化エネルギー計算にも応用され、古典アルゴリズムを用いた高精度計算に匹敵する精度で化学反応を記述しうることが示されている。

最後の第三のアプローチとしては本論文では、量子コンピュータと古典コンピュータの間でより互換性のあるアンザッツ（波動関数表現）の実装法を開発している。より具体的には、既存の古典コンピュータを用いた量子化学計算で広く使われているアンザッツであるノンユニタリーな結合クラスター法を、量子コンピュータ上で近似的に実装する方法を提案している。変分法に基づく結合クラスター法(VCC)は、精度面で優れたパフォーマンスを示すが古典コンピュータ上では指数的なコストがかかることが知られているが、本論文で提案された実装法によって量子コンピュータを使うことで近似VCCの多項式時間での実行が可能となったことが示されている。

このように本論文では、量子コンピュータの限られたリソース下で高精度な電子状態計算を如何に実現するかという重要な課題に対し、i)より少ない量子ビット数でより大きな分子を取り扱う方法、ii)量子コンピュータでは扱いきれない自由度を量子計算の後処理の段階で精度よく考慮する方法、iii)既存の量子化学アルゴリズムとより互換性の高い量子回路の実装法、という有効なアプローチを示しており、この分野における量子古典ハイブリッドアルゴリズムのさらなる発展へ寄与するものとして学術的意義は大きい。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。