繰り返し位相推定アルゴリズムの統計的精度

Statistical Precision of Quantum Chemistry Algorithms

新村星太郎（M2）
Shintaro Niimura

Abstract

Calculating molecular energies is an important factor to be able to simulate chemical reactions. Quantum computers are expected to resolve the anticorrelation between precision and complexity, however less work has focused on the precision. We introduce how we can discuss the precision of the quantum computational chemistry algorithms.

1. 導入

量子化学計算の一つの目的は原子や分子のハミルトニアンで定義される基底エネルギーを計算することにある。この基底エネルギーを得るために様々なアルゴリズムが開発されてきた。これらは古典コンピュータで次の二種類に分類される：分子軌道法(Hartree-Fock based methods: HF)と密度汎関数論法（Density Functional Theory methods: DFT）。

基底エネルギーを求める上では、どれくらい早く計算できるか、および、どれくらい精度よく計算できるかに着眼点が置かれてきた。HF ではより高精度の計算にはより多くの時間がかかる、トレードオフの関係が知られており、スーパーコンピュータをもってしても数原子までしか高精度な計算は行えない　(Figure 1. [1])。

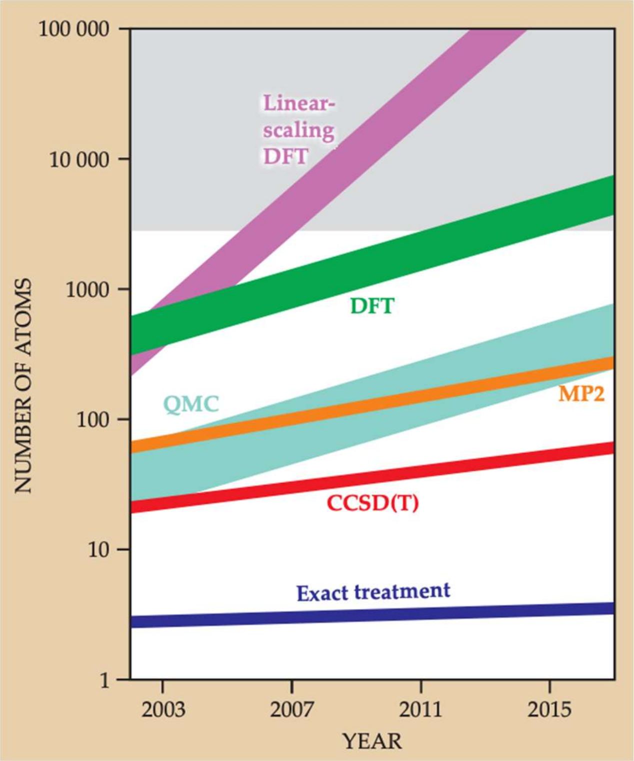

Fig. 1 The number of atoms that can be calculated with the fastest supercomputer of each year [1].

そこで、2005 年に量子コンピュータで計算すれば、古典コンピュータで分子の規模に対して指数関数的に増加するアルゴリズムが多項式程度で収まることが報告された[2]。この時、提案されたアルゴリズムが位相推定アルゴリズム(Phase Estimation Algorithm: PEA)である。しかし、PEA は精度に応じ

て必要な qubit 数が増加し、現代の量子コンピュータの qubit 数では高精度の計算は期待できないことが周知の事実となっている。そこで、qubit 数を減らした手法として、エネルギーを一桁ずつ求めていくアルゴリズムである繰り返し位相推定アルゴリズム(Iterative Phase Estimation Algorithm: IPEA)[3]が推奨されている。

2. 統計的な誤差の定義

古典アルゴリズムでは精度と速さの関係が一つの基準となっていたが、これらは量子アルゴリズムの場合どのように評価できるのか？先行研究では、PEA および IPEA は分子の規模 N、分子を構成する原子の最大原子数 Z_{max} に対して、$\sim O\left(N^4(N^2 Z_{max}^3 + N^5 Z_{max}^{3/2})\right)$の計算コストがかかることが報告された[4]。

しかしながら、これらの先行研究では、量子コンピュータでは避けられない統計的な誤差を考えていない。量子コンピュータでは、一回の計算は確率的な答えしか出さず、何回も計算することで得られる統計分布から我々が答えを判断する。本当の統計分布だと判断するためには無限回計算しなければいけないので、有限回の計算では統計分布が間違っている可能性が常に存在している。我々はこれを統計的な誤差と定義し、統計分布から読み取った答えが間違っている確率の標準偏差として与える。今年度の研究では、IPEA の統計的な誤差を定義するために必要な理論的枠組みを作成した。

References

[1] M. Head-Gordon, E.Artacho, “Chemistry on the computer,” Phys. Today **61,** 4, 58 (2008).

[2] A. Aspuru-Guzik, A.D. Dutoi, P.J. Love, and M. Head- Gordon, “Simulated Quantum Computation of Molecular Energies”, Sci., **309**, 5741, 1704-1707 (2005).

[3] A.Y. Kitaev “Quantum measurements and the Abelian stabilizer problem” Electron. Colloquium Comput. Complexity **3**, 3, 1‐20 (1996).

[3] R. Babbush, J. McClean, D. Wecker, A. Aspuru-Guzik, and N. Wiebe, “Chemical basis of Trotter-Suzuki errors in quantum chemistry simulation”, Phys. Rev. A. **91**, 022311 (2015).