中国科学: 化学 2023 年 第 53 卷 第 2 期: 119 ~ 128
SCIENTIA SINICA Chimica chemcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

专题论述

量子计算化学的挑战和机遇

李震宇[1], 刘杰[1], 沈祥建[2*], 高飞雪[2]

1. 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心, 合肥 230026
2. 国家自然科学基金委员会化学部, 北京 100085
*通讯作者, E-mail: shenxj@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2022-11-09; 接受日期: 2022-12-11; 网络版发表日期: 2022-12-29

摘要 本文总结了国家自然科学基金委资助下于中国科学技术大学近期举办的“量子计算机时代的理论化学”战略研讨会的学术交流内容. 首先介绍了量子计算化学的主要特点, 接着说明了当前量子计算化学研究领域所面临的重要挑战, 最后概述了当前我国在量子计算化学领域的研究进展, 探讨了面向当前含噪和未来容错量子计算平台的发展方向. 同时, 面向我国重大战略发展需求, 凝练了面向“量子计算机时代的理论化学”近5~10年的重大关键科学问题, 提出了对面向智能和量子计算时代的电子结构新方法及应用方面加强学科发展布局的战略性资助建议.

关键词 量子计算, 量子计算机, 理论化学, 电子结构, 人工智能

1 引言

量子计算化学(Quantum-Computational Chemistry, 简称QCC)是伴随着量子信息技术蓬勃发展孕育而生的一门新兴的研究领域[1~3]. 具体而言, 量子计算化学可定义为借助量子计算机, 对化学材料体系的电子结构、动力学以及统计性质等进行数值模拟, 以期解决长期以来经典计算机难以解决的化学问题. 为此, 量子计算化学的发展亟需理论化学和量子信息技术学的高效融合. 虽然这两个领域都是基于量子力学原理发展起来的, 但前者来自化学, 而后者来自物理学和计算机科学. 从2005年Alán Aspuru-Guzik等人[4]提出将量子相位估计(Quantum Phase Estimation, 简称QPE)算法应用到分子体系开始, 经过十几年的迅猛发展, 量子计算化学已发展成为理论化学和量子信息领域中相当活跃的前沿交叉领域[5~9].

当前, 主要发达国家为了争夺“量子霸权”, 纷纷出台相关规划并制定了长期的量子计算发展战略, 投入大量资金加快资助相关领域的技术研究和应用[10]. 2020年10月16日, 中共中央政治局集体学习了量子科技研究和应用前景. 习近平总书记在主持学习时, 不断强调要充分认识推动量子科技发展的重要性和紧迫性, 加强量子科技发展战略谋划和系统布局, 提高量子科技理论研究成果向实用化、工程化转化的速度和效率, 积极开展量子科技基础研究和应用研发. 近年来, 不少高新技术企业也纷纷投入巨资进行量子计算研究, 如Google、IBM、华为、腾讯、阿里巴巴等. 这些高新技术企业的加入, 有助于加快量子科技落地转化为实用技术. 其中, 量子计算化学是量子科技走向实用化的重要应用场景之一, 需要不同的学科交叉融合

引用格式: Li Z, Liu J, Shen X, Gao F. Challenges and opportunities of quantum-computational chemistry. *Sci Sin Chim*, 2023, 53: 119–128, doi: 10.1360/SSC-2022-0222

© 2022 《中国科学》杂志社

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

和共同探究，从而推动量子计算化学从简单的数值求解到复杂的化学反应过程的模拟的转变，最终实现指导材料设计和药物开发等领域的发展与创新.

为了及时凝练量子计算化学领域的关键科学问题，2022年7月30日在国家自然科学基金委员会资助下, 中国科学技术大学举办了“量子计算机时代的理论化学”战略研讨会, 邀请了学术界和企业界40多位从事理论化学、量子信息、计算机等研究方向的专家学者参加. 此次战略研讨会讨论了量子计算化学发展现状和未来，并总结和凝练了几个关键科学问题，为促进该领域的协调发展，特别是未来5~10年的发展，提出了学科发展布局的资助建议.

2 量子计算化学特点

不同于经典计算机，量子计算机是一个利用量子力学原理建立的全新计算平台. 量子计算化学就是要借助量子计算机超强的计算能力来解决经典计算机在药物研发、材料设计、动力学模拟等方向算力不足的问题. 量子计算化学是基于量子力学原理建立, 结合量子计算平台设计其理论框架，最后通过数值计算程序进行化学和材料模拟的新生学科，充分体现了多学科交叉的特点. 也因为如此，量子计算化学从理论框架到数值算法再到最后的模拟软件都跟传统的理论化学有着本质的区别. 量子计算化学的特点具体体现在以下三个方面.

2.1 新理论框架

传统理论化学通常是在指定波函数拟设之后，通过对角化或者含时演化算法，近似求解电子结构问题. 量子计算化学则借助量子计算机，通过对量子态的直接操控来实现精确、有效的薛定谔方程求解，这是一种不同于传统理论化学的全新研究范式. 量子计算化学模拟通常包含量子态制备(初始态)，量子操控(酉变换)以及目标态测量(目标态)这三类操作. 初始态可以选择一种易于制备的量子态，例如Hartree–Fock态；目标态是通过初始态的酉变换来制备的；酉变换的形式会根据不同的量子算法进行调整. 这些酉变换通常在经典计算机上难以实现，而在量子计算机上能够通过它们有效地制备精确的基态或者激发态波函数. 例如，在绝热演化算法中，酉变换采用哈密顿量演化的形式[11]；在变分量子算法中，酉变换则经常采用酉耦合簇算符的形式[12]或者自适应的酉算符乘积的形式[13].

当目标量子态制备好后，最终还需要通过有效的测量才能将量子态信息转换成可观测的物理量. 在量子计算机上，信息的读取却并不是一件轻松的事情，尤其对于多电子化学与材料体系，波函数包含的信息将随体系的维度呈现指数性增长. 例如，采用变分量子算法时，算符的期望值通过多次测量的统计平均来估计. 具体点，像包含112个自旋轨道的Fe_2S_2复杂体系, 每次能量计算都需要~10^{13}次采样[3].

为了精确获得体系的基态和激发态乃至热力学统计性质等，发展量子对角化算法或者量子哈密顿量演化算法是关键，需要结合理论化学、量子计算以及计算机技术去探索各种可能性. 例如, 传统的Krylov子空间对角化方法并不能直接应用到量子计算化学中，因为这会导致量子算法失去指数加速的优越性，为此需要针对具体的问题发展相应的量子Krylov子空间对角化方法[14].

2.2 新计算平台

计算平台与理论化学的发展是紧密联系在一起的. 随着集成电路等电子技术的不断发展, 经典计算机在摩尔定律极限下不断有新突破. 理论化学方法也因此在不断地进步与完善. 量子计算平台是建立在量子计算机等硬件基础上的，目前处于快速发展时期. 其发展可以大致分为两个阶段：近期含噪中型量子计算机和通用容错量子计算机. 如果有一台通用容错量子计算机，QPE算法被认为是可用于实现化学和材料模拟优越性的量子算法[2,3]. QPE算法在求解一般电子结构问题时是否具有真正的指数加速还是一个值得探讨的问题，但是即使利用QPE算法仅能实现多项式的加速, 这对于理论化学来说仍然是一个重大进步.

目前，只有少数人认为容错量子计算机能够在2030年前出现，近期量子计算主要还是基于没有量子纠错的含噪量子计算机. 随着量子线路复杂度的增加，量子门操作引入的误差会不断累积，最终使得模拟结果并不可靠. 因此，近期的量子计算化学算法必须要考虑噪声对量子模拟的影响. 换言之，在量子算法中需要引入误差缓解的技术来提升量子计算化学模拟的稳定性[9]. 同时, 通过将量子计算和经典计算结合起来, 发展杂化的量子–经典算法来实现“量子加速”在这一

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

阶段尤为重要.

由于个人或移动量子计算在可预见的将来不太可能出现, 因此在更大的生态系统成熟之前, 云计算可能是早期用户体验量子计算技术的主要方式. 大多数云计算服务提供商现在都在其平台上提供了对量子计算机的访问, 允许潜在用户体验该技术. 因此, 当前设计量子计算化学程序需要考虑对接量子云计算平台以实现真实的量子模拟.

2.3　新计算边界

量子计算机受到广泛关注的主要原因是它有可能突破当前经典计算机的算力极限, 有望解决一些经典计算机难以解决的问题. 量子计算化学的理论和计算平台都是基于量子力学原理设计的, 这使得它在电子结构问题求解时具有天然的优势. 首先, 量子计算化学有望在多项式时间内实现精确的电子结构计算, 用于分子和材料性质的准确模拟, 例如生物固氮酶反应机理预测[15]; 其次, 基于量子计算机的强大算力有望实现复杂体系的高精度模拟, 例如药物分子和蛋白质的结构和结合能的预测[16]以及光合作用体系的光捕获过程模拟[17]. 另外, 通过量子计算与人工智能的结合, 人类或许真的有机会“理解”自然. 因此, 量子计算化学的重要目标就是希望能借助量子计算机在模拟精度和尺度上突破经典计算的边界.

3　量子计算化学的重要挑战

1929年著名物理学家狄拉克曾提出: “大部分物理和所有化学中的数学理论背后所涉及的基本物理定律都已经知道, 困难的是这些定律导致的方程太复杂而无法精确求解”[18]. 近百年来, 人们为了高效、精确地求解这一基本物理方程一直进行着不懈的努力. 量子计算化学的产生为解决这一问题提供了新的契机. 然而, 当前量子计算化学面临着一些重要挑战. 首先, 随着量子比特数目的增加以及量子线路变深, 误差累积问题变得十分严重, 如何引入误差缓解技术来修正计算结果, 从而得到更真实可靠的数据; 其次, 如何在近期内实现对实际体系的量子计算化学模拟; 最后, 如何基于算法的发展和量子计算机硬件本身的进步在能源消耗、计算精度和计算体系规模等方面形成对经典计算的优势.

3.1　含噪的量子计算化学新算法

实现容错量子计算是量子计算机发展的长远目标. 但是近期目标是在含噪中型量子计算机上实现实用的量子优越性. 为此, 当前研究的热点是发展误差缓解的量子计算化学新算法. 这就需要在发展算法时考虑量子门操作和测量误差对结果的影响[19]. 外插方法是目前最简单实用的误差缓解技术, 通过运行不同错误率的电路来外插得到准确的结果. 准概率方法是另一种误差缓解技术, 其主要思想是对于任何噪声过程, 可以通过实现其逆过程来抵消它的影响. 很多物理化学体系都具有内禀的对称性, 通过对称性的验证也可以抑制误差的影响. 此外, 通过建立真实测量和理想测量几率之间的模型, 实现测量误差缓解技术, 可以进一步抑制读出过程中量子位之间的串扰误差. 同时, 可以通过对误差的学习来自动修正测量的结果. 不同的误差缓解技术可以结合起来一起使用, 进一步降低量子算法的错误率. 再者, 采用变分量子算法也可以有效抑制噪声误差. 通过对测量结果的后处理, 例如微扰修正, 可以降低浅线路误差和引入静态关联效应[2,3].

实现误差缓解量子算法的难点在于如何通过算法的设计来降低量子线路的大小和深度以及抑制噪声带来的影响. 这需要针对现有的量子计算平台设计全新的算法或者对现有的经典算法进行重构来实现量子–经典混合算法.

3.2　量子计算化学模拟的体系规模

目前阶段, 量子计算化学的一个重要目标是通过理论与算法发展实现对实际化学体系的模拟. 首先, 为了得到跟实验上能够比拟的结果, 量子计算必须要达到1 kcal mol^{-1}的化学精度, 这要求模拟中使用的离散化方法得足够精确. 目前, 量子计算化学模拟主要基于较小的原子轨道基函数, 并与经典理论计算结果作对比. 后续更精确的数值模拟可考虑采用平面波、实空间格点、小波等基函数. 其次, 实际科学问题关心的体系规模通常是一个复杂且庞大的体系, 而目前的量子计算化学模拟却局限于简单分子和模型材料体系. 如何通过构建合适的算法框架来描述环境的影响和作用是当前量子算法发展面临的一个挑战[20]. 最后, 为了得到实验可观测量, 需要针对现有的量子计算平台设计精确的对角化算法来得到体系的本征态和本征

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

特征等. 以上三点难点在于需要在新的计算框架内探索数学、物理以及计算机理论在化学模拟中的应用, 在提升精度的同时降低算法复杂度.

3.3 量子计算化学优越性

量子优越性一直是量子计算领域最关心的核心问题之一. 但是, 量子计算机的提出并不是为了完全取代经典计算机. 同样, 量子计算化学的发展也不是为了取代经典计算化学. 基于经典计算机设计的理论化学方法已经取得了巨大的成功, 计算模拟已经成为了化学和材料科学领域不可或缺的研究手段. 为量子计算化学寻找合适的应用场景, 进而划分量子与经典计算的边界, 确定在特定领域量子计算化学的优越性是非常重要也是非常有挑战性的一个问题. 其研究难点是当前最先进的理论化学方法与高性能计算结合之后不断更新经典计算的极限, 而现有的量子计算平台由于自身的一些局限性很难对这些极限问题提出挑战. 同时, 这一问题也与量子计算机的性能, 包括量子比特的数目以及量子器件的相干时间等参数有关. 例如, Google实现的最大的材料体系的模拟使用了16个量子比特, 其中包含160个量子比特门和65层的线路深度[21]. 但是对于有实际应用价值的化学模拟可能需要更多的量子资源[22].

4 我国当前研究现状及机遇

为了迎接量子计算化学的重要挑战, 需要结合当前我国量子信息发展现状, 并充分发挥我国理论化学领域的研究特色和优势, 建立新的理论框架, 融合计算机理论, 最终推动量子计算化学的发展, 服务于化学、材料和医药等行业. 例如, 为了提升中国量子计算编程的整体水平, 旨在团结、联合、组织量子计算相关领域的专家学者与科研人才, 吸引更多人才加入到国产量子计算机的研制和应用中, 中国计算机学会(CCF)量子计算专业组举办了 “司南杯”量子计算编程挑战赛, 其中量子生物化工赛道旨在借助量子计算优势解决当下基因组学、神经科学以及生物制药模拟计算等.

4.1 量子计算化学理论方面

随着我国量子信息技术的飞速发展, 量子计算化学理论也在近几年开始发展起来. 针对量子计算化学中的几大重要挑战, 我国学者对部分科学问题进行了系统的研究, 并取得了一系列重要进展:

4.1.1 量子态的制备

首先, 量子计算化学中常用的波函数拟设方法是酉耦合簇方法(UCC), 其中激发算符通常截断到二阶(UCCSD). 在UCCSD方法中, 它的激发算符数目和体系大小的四次方成正比. 这导致在十几个量子比特的量子模拟中, 量子线路包含的量子比特门数目可能达到几千甚至上万个. 最近, 华为团队发现可以利用点群对称性来有效减少UCCSD中非零激发算符的数目, 从而压缩量子线路的深度, 并在经典计算机上实现了28 量子比特的分子模拟[23]. 其次, 精确地求解电子结构问题主要是准确计算电子关联能. 而对于包含多个过渡金属原子的催化体系, 例如生物固氮酶中铁硫团簇具有非常强的电子关联作用. 为了精确地描述强电子关联体系, 通常需要一个表达能力更强的波函数拟设来计算电子关联能, 这会导致量子模拟对应的线路太深. 理论化学中通过引入有效哈密顿量的方法, 将一部分电子关联能放在波函数拟设中, 而剩下的一部分则包含在有效哈密顿量中. 例如, 杨金龙、李震宇团队基于这一方法开发了用来构建浅层量子线路的量子算法[24]. 最后, 常用的波函数拟设都是基于平均场参考态, 为了提升波函数的精度需要包含更高阶的激发算符. 基于拓展的价键理论方法引入多组态波函数作为参考态可以有效地改善波函数拟设的精度, 同时可能降低量子比特的数目和线路深度[25,26]. 量子蒙特卡洛方法也可以应用到量子计算中, 用来减少量子门的数量和消除计算中的错误. 此外, 经典计算中的随机量子态可以被在有噪声量子计算机上利用较少量子门制备和处理的量子态所替换. 这样, 可以利用有限的量子计算资源实现更丰富的量子态, 同时避免严重的符号问题[27~29].

4.1.2 物理量的测量

相比较于酉耦合簇方法, 自适应的变分量子算法能够更精确地描述电子关联, 同时构建更紧致的波函数. 但是, 计算复杂度太高是自适应的变分量子算法的严重缺陷. 针对现有的自适应变分量子算法复杂度太高的问题, 杨金龙、李震宇团队[30]基于约化密度矩阵方法, 重新定义了自适应的变分量子算法, 并引入

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

Valdemoro重构方法用于近似高阶约化密度矩阵, 从而将测量复杂度从原来的八次方降低到现在的四次方. 在此基础上, 将此方法与线路有效的QUBIT激发算符结合, 实现了低复杂度的量子计算化学模拟. 测量方法是实现量子计算化学算法的重要一环, 目前国内对这一领域的研究还相对较少.

4.1.3　对角化方法

对角化算法是现代计算化学模拟的核心. 高效的对角化能够显著地提升计算模拟的效率. 对于量子计算化学来说, 经典的对角化算法虽然有一定的借鉴作用, 但从原理上却有着很大的区别. 因此, 发展新的量子对角化算法是提升量子算法效率的基石. 龙桂鲁课题组[31,32]利用基于酉算子线性组合方法构造了全量子本征求解器求解分子基态能量, 有望在量子计算机的硬件发展到一定程度后进行具有量子优越性的大型化学计算. 受经典虚时演化算法的启发, 袁骁课题组[33]提出了基于变分原理的虚时演化算法, 可以用来有效地求解体系的本征态. 王鹤峰课题组[34~36]提出了基于量子共振跃迁(Quantum Resonant Transitions, 简称QRT)的量子算法. 把一个探测量子比特和量子体系进行耦合, 通过连续变化探测量子比特的频率并让整个体系演化, 可以获取从参考态到体系能级之间的跃迁频率, 得到体系激发态的本征能级并引导体系演化到相应能级的本征态. 曾进峰课题组[37]从热态的角度来研究本征谱, 并提出了哈密顿量对角化的变分量子算法. 通过量子虚时演化来制备热态, 然后用变分量子本征态求解算法来对角化热态, 从而得到原哈密顿量的本征态, 并将其延申到有限温度下量子系统连续变量的模拟.

4.1.4　模拟化学和材料性质

杨金龙、李震宇团队[38]基于周期性边界条件提出了计算材料体系周期性性质的量子算法, 并在此基础上利用运动方程的自适应变分量子算法提出了计算固体能带的量子算法[39]. 方维海、李振东团队[40]利用量子线性方程算法求解线性响应方程, 提出了计算响应性质的量子算法, 并证明其计算复杂度随体系的增大仅呈现多项式增长. 该团队还针对现阶段中等规模有噪音(Noisy Intermediate-Scale Quantum, 简称NISQ)的量子器件, 在同一理论框架下提出了一种量子–经典杂化算法, 更适合于在近期的量子器件上实现响应函数的计算[41]. 帅志刚课题组提出了基于玻色采样[42]的组合量子算法处理分子振动光谱, 可以考虑复杂分子体系末态势能面的非谐性和Duschinsky转动效应[43].

4.1.5　结合人工智能技术的量子算法

利用人工智能技术来精确求解薛定谔方程, 有望实现量子算法颠覆性的创新. 人工智能技术是功能强大的工具, 在压缩高维数据方面获得了显著的成功. 特别是机器学习在量子化学中的应用范围不断拓宽, 机器学习模型的高度灵活性赋予其解决复杂问题的能力. 杨金龙、李震宇团队[44]将机器学习应用于量子算法用来确定精确的势能面. 利用量子计算机强大算力和机器学习数据处理能力来快速地构建高维势能面. 腾讯量子团队将机器学习与量子变分算法耦合, 作为量子线路输出端的后处理方法, 利用机器学习强大的表达能力改善浅层量子线路计算能量的精度[45]. 这些方法已应用于科学和工程学的各个领域, 包括激子动力学, 光收集系统中的能量转移, 分子电子性质, 表面反应网络, 学习密度功能模型, 对物质相进行分类, 以及模拟经典和复杂的量子系统等.

4.2　量子计算化学实现方面

随着量子技术的进步, 近十几年来量子计算得到了飞速的发展. 首先, 量子计算机的研制方面取得了重大进展. 2017年, Google在53个量子比特的超导计算机Sycamore上进行了随机量子线路模拟[46]. 2020年, 潘建伟团队[47]在光量子计算机“九章”上进行了大规模高斯玻色采样. 2021年, 潘建伟团队[48]成功研制出全球超导量子比特数量最多的量子计算原型机“祖冲之号”, 实现了可编程二维62比特量子处理器上的量子行走. 可以看出, 经过多年的量子信息技术发展, 量子计算机已经从一个模型机向着含噪中型量子计算机稳步前进, 尤其在光量子计算机、超导量子平台、离子阱和冷原子操纵等量子硬件方面.

其次, 借助量子计算机, 量子计算化学也得到了很大的进展. 2010年, 杜江峰课题组[6]首次基于NMR技术实现了氢分子基态能量的模拟. 随后, 又实现了H_2O分子的共振跃迁能量的计算, 但是相关哈密顿量的构建是基于经典计算化学的组态实现的[35]. 2016年, Kim Kihwan和翁文康课题组[49]用离子阱系统对HeH^+分子

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

离子进行了酉耦合簇线路模拟, 计算了基态、激发态能量, 并用非微扰的方法研究了断键过程. 近期, 北京师范大学方维海、李振东团队与中国科学院物理所范桁课题组[41]在超导量子计算平台上实现了多并苯的光谱模拟.

最后, 云计算可能是早期用户体验该技术的主要方式. 云计算服务平台可能会成为量子计算生态系统中最有价值的部分. 大多数云计算服务提供商现在都在其平台上提供了对量子计算机的访问, 这允许潜在用户试验该技术. 因此, 如何开发量子云计算的潜力也是当前需要探讨的问题.

4.3 量子计算化学优越性方面

计算化学在材料与药物的设计等方面具有明显优势, 大大降低了新材料与新药物的实验研发成本, 体现出基于经典计算的巨大作用. 例如, 国外的薛定谔公司、国内的晶泰公司等. 但是, 大规模和高精度经典计算仍需大力发展. 量子计算化学为实现精确的化学和材料模拟提供了新的解决方案. 通过操纵物质的量子态并利用它们的量子叠加与纠缠等特性, 量子计算机有望大大提高化学和材料计算的效率, 尤其在金属催化剂设计、蛋白质环境中药物小分子筛选等[50].

然而, 对量子计算机是否能解决经典计算机难以解决的电子结构问题的讨论目前还停留在理论阶段. 例如, 李振东和Chan等人[51]通过发展密度矩阵重整化群的方法对固氮酶铁硫团簇进行了高精度的研究, 并通过对这类强关联体系的讨论试图定义出一些经典计算难以解决的电子结构问题, 探讨量子计算和经典计算在处理基态问题时的优势和劣势. 近年来, 随机量子线路的采样问题也被用来展示量子优越性. 2019年, 谷歌公司量子计算团队利用所发布的包含53个量子比特的悬铃木量子线路展示了在200秒时间内获得一百万样本的采样, 预期线性交叉熵保真度(XEB)约为0.002[46]. 谷歌预测使用超级计算机进行经典模拟需要一万年, 因此宣称其量子硬件具有量子优越性. 张潘课题组[52~54]基于张量网络发展了大批振幅采样量子线路模拟方法. 此方法可以获取大量关联样本, XEB远高于谷歌硬件样本, 因此可以通过谷歌的XEB测试. 基于上述张量网络的工作不断改进经典的理论化学方法, 提高经典计算的边界, 同时探索量子计算优势仍是当前最具挑战的问题.

4.4 量子计算化学软件平台开发方面

在传统的计算化学领域, 计算化学的主流软件都来自于国外, 化学和材料模拟存在被“卡脖子”的风险. 发展具有自主知识产权的计算化学软件迫在眉睫. 量子计算化学模拟平台还处于起步阶段, 发展优秀的国产软件平台十分必要. 当前, 量子模拟器平台发展方面取得了相当大的进展. 具体点, 除了国外Google、IBM等高新技术企业已经率先布局外, 国内的华为公司依托MindSpore的AI平台, 推出了名为MindSpore Quantum的通用量子计算框架, 能高效地实现变分量子线路的优化与训练, 完成包括量子化学模拟、量子近似优化算法和量子机器学习等任务. 源量子发布了国内首款量子计算机操作系统本源司南, 还提供了QPanda量子模拟平台和基于自主研发的超导量子计算机本源悟源的量子计算云平台. 腾讯量子实验室开发的名为TensorCircuit的开源量子软件框架旨在模拟大型复杂的量子电路. 其他量子模拟器平台还包括百度的Paddle Quantum以及阿里巴巴的ACQDP.

国内的高校和科研院所也在迅速跟进, 并根据课题组的研究方向发展专用的量子模拟器. 例如, 中国科学技术大学杨金龙、李震宇团队[55]发展的量子平方软件(Q^2Chemistry)是一个使用量子算法或者量子启发的经典算法进行化学体系研究的平台. 量子平方提供了常见的态矢量模拟, 同时结合先进的矩阵乘积态的模拟方法大大提升了现有模拟器的模拟范围, 可以在一台笔记本电脑上高效完成约40量子比特线路的模拟. 结合国产高性能计算机, 量子平方实现了200量子比特的模拟[56]. 中国科学院物理研究所王磊和中国科学院理论物理研究所张潘课题组[57]开发的幺(Yao)是一个用于量子算法设计的可扩展、高效的开源程序. 幺以量子电路的通用和可微编程为特色, 结合GPU加速实现有效的量子模拟. 清华大学龙桂鲁课题组发展了化学模拟全量子本征求解器(Full Quantum Eigensolver, 简称FQE)软件用于在实际的量子计算机或经典计算机上的仿真量子模拟器上进行量子计算, 解决量子化学问题.

5 拟解决的关键科学问题

在量子计算化学领域需要着力解决的关键科学问题包括: 如何在算法设计中充分利用量子计算机的特

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

点, 如何实现高效地误差缓解, 以及最终如何实现量子计算化学的优越性.

5.1　发展充分利用量子优势的新算法

结合量子计算机的特点设计量子计算化学新理论与新算法, 充分利用量子计算的潜力, 与人工智能相结合, 研究解决化学与材料科学中富有挑战性的典型科学问题, 最终实现量子计算在理论化学领域中的应用.

5.2　发展误差缓解的量子算法

针对当前含噪的中型量子计算平台, 设计误差缓解的量子计算化学算法, 降低量子线路的深度, 同时结合分块的理念降低量子线路的规模, 压制噪声对量子模拟的影响, 使其能够用来解决现实中实际体系的化学问题.

5.3　实现化学量子优越性

通过引入先进的数学物理方法结合高性能计算提升量子模拟器的计算能力, 同时发展新算法提升经典计算的能力边界, 研究容错量子计算机在解决理论化学问题时的潜在优越性.

6　强化科学基金资助的发展建议

量子计算化学利用量子计算机在精确求解电子结构问题领域的天然优势, 未来能够被广泛地用于提升药物开发、催化剂设计、太阳能捕获、新能源电池等方向的研发效率, 反映着当前国际上非常活跃的重要前沿方向, 也涉及到许多我国发展迫切需求的“卡脖子”材料中的基础科学问题, 是具有重大科学意义和战略带动作用的学科前沿领域. “十四五”期间国家信息化发展规划中, 强调了超前布局量子计算技术研究, 推动量子计算应用探索与产业生态体系建设. 量子计算化学借助量子计算的强大算力, 有望打破现有半导体器件算力的桎梏, 精确研究真实材料的结构物性, 理解和调控各种化学反应的机理, 为高精度的计算模拟提供关键基础和新技术支撑, 对于推进理论化学、量子信息和计算机科学的发展起到重要作用.

目前, 量子计算化学通常表现为将量子计算和经典计算结合起来, 通过发展杂化的量子–经典算法实现“量子加速”. 发展高效、高精度的新算法, 不断提升经典计算的能力边界, 仍然是近期电子结构发展的重要方向. 另一方面, 机器学习快速崛起, 已经成为当下大数据时代的技术基石. 特别地, 机器学习与电子结构方法的结合, 如构造显含机器学习模型的新密度泛函[58], 是电子结构方法发展的新兴方向之一, 最近已引起了广泛关注. 可以预期量子计算与人工智能的结合, 也将会对“量子计算机时代的理论化学”产生革命性的影响.

为此, 我们建议在量子计算化学新理论与新算法发展、量子计算化学软件与平台开发、量子计算化学优越性探索、量子启发经典理论化学算法发展部署重点类项目进行布局. 同时, 建议对面向智能和量子计算时代的电子结构新方法及应用进行重大类项目进行布局, 通过人工智能与量子计算结合、经典与量子算法结合, 实现高精度且高效率的电子结构的高效开发平台的搭建, 实现对复杂化学体系特别是含过渡金属原子的强关联电子体系的精准描述、对量子相干和纠缠动力学的精准描述、对体系与环境相互作用的精准描述、对实验光谱的精准仿真模拟, 以及设计能和理论方法相互促进的实验检测新方案, 推动理论与计算化学整个学科领域的变革性发展.

量子计算化学所呈现出来的一种全新的计算模拟研究范式以及潜在的计算能力, 开辟了一条探索化学理论与机制的新道路. 其与经典计算和人工智能的结合, 是当下应该优先发展的方向. 优先发展这些研究方向将聚焦跨学科领域重大科学问题, 集成学科优势方向, 培养优秀人才队伍, 凝练可望取得重大原始创新的研究方向, 着力推动我国基础研究在拓展新前沿、创造新知识、形成新理论、发展新方法上取得重大突破, 进一步提升我国化学学科的国际地位, 提高科学技术满足国家重大需求的能力.

致谢　感谢北京师范大学方维海院士、中国科学技术大学杨金龙院士、清华大学龙桂鲁教授、南京大学黎书华教授、清华大学邓东灵教授、中国科学院物理研究所王磊研究员、中国科学院计算技术研究所孙晓明研究员、北京大学袁骁教授、中山大学李绿周教授、中国工程物理研究院李颖研究员、中国科学技术大学朱晓波教授、中国科学院理论物理研究所张潘研究员、河南省量子信息与量子密码重点实验室郭楚教授、字节跳动吕定顺博士、中国科学技

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

术大学赵博教授、清华大学帅志刚教授、南方科技大学翁文康教授、北京师范大学李振东教授、华南师范大学张旦波教授、西安交通大学王鹤峰教授、宇节跳动曹常粟博士、中国科学技术大学王尧博士和北京量子信息研究院曾进峰博士等在“量子计算机时代的理论化学”战略研讨会的精彩报告和提供的相关素材.

参考文献

1 Preskill J. *Quantum*, 2018, 2: 79

2 Cao Y, Romero J, Olson JP, Degroote M, Johnson PD, Kieferová M, Kivlichan ID, Menke T, Peropadre B, Sawaya NPD, Sim S, Veis L, Aspuru-Guzik A. *Chem Rev*, 2019, 119: 10856–10915

3 McArdle S, Endo S, Aspuru-Guzik A, Benjamin SC, Yuan X. *Rev Mod Phys*, 2020, 92: 015003

4 Aspuru-Guzik A, Dutoi AD, Love PJ, Head-Gordon M. *Science*, 2005, 309: 1704–1707

5 Lanyon BP, Whitfield JD, Gillett GG, Goggin ME, Almeida MP, Kassal I, Biamonte JD, Mohseni M, Powell BJ, Barbieri M, Aspuru-Guzik A, White AG. *Nat Chem*, 2010, 2: 106–111

6 Du J, Xu N, Peng X, Wang P, Wu S, Lu D. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 030502

7 Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, Yung MH, Zhou XQ, Love PJ, Aspuru-Guzik A, O’Brien JL. *Nat Commun*, 2014, 5: 4213

8 Kandala A, Mezzacapo A, Temme K, Takita M, Brink M, Chow JM, Gambetta JM. *Nature*, 2017, 549: 242–246

9 Arute F, Arya K, Babbush R, Bacon D, Bardin JC, Barends R, Boixo S, Broughton M, Buckley BB, Buell DA, Burkett B, Bushnell N, Chen Y, Chen Z, Chiaro B, Collins R, Courtney W, Demura S, Dunsworth A, Eppens D, Farhi E, Fowler A, Foxen B, Gidney C, Giustina M, Graff R, Habegger S, Harrigan MP, Ho A, Hong S, Huang T, Huggins WJ, Ioffe L, Isakov SV, Jeffrey E, Jiang Z, Jones C, Kafri D, Kechedzhi K, Kelly J, Kim S, Klimov PV, Korotkov A, Kostritsa F, Landhuis D, Laptev P, Lindmark M, Lucero E, Martin O, Martinis JM, McClean JR, McEwen M, Megrant A, Mi X, Mohseni M, Mruczkiewicz W, Mutus J, Naaman O, Neeley M, Neill C, Neven H, Yuezhen Niu M, O′Brien TE, Ostby E, Petukhov A, Putterman H, Quintana C, Roushan P, Rubin NC, Sank D, Satzinger KJ, Smelyanskiy V, Strain D, Sung KJ, Szalay M, Takeshita TY, Vainsencher A, White T, Wiebe N, Yao ZJ, Yeh P, Zalcman A. *Science*, 2020, 369: 1084–1089

10 Biondi M, Heid A, Henke N, Mohr N, Pautasso L, Ostojic I, Wester L, Zemmel R. *McKinsey & Company*, 2021. https://www.mckinsey.com/capabilities/mckinsey-digital/our-insights/quantum-computing-use-cases-are-getting-real-what-you-need-to-know

11 Albash T, Lidar DA. *Rev Mod Phys*, 2018, 90: 015002

12 Hoffmann MR, Simons J. *J Chem Phys*, 1988, 88: 993–1002

13 Grimsley HR, Economou SE, Barnes E, Mayhall NJ. *Nat Commun*, 2019, 10: 3007

14 Cortes CL, Gray SK. *Phys Rev A*, 2022, 105: 022417

15 Reiher M, Wiebe N, Svore KM, Wecker D, Troyer M. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2017, 114: 7555–7560

16 Kirsopp JJM, Di Paola C, Manrique DZ, Krompiec M, Greene-Diniz G, Guba W, Meyder A, Wolf D, Strahm M, Muñoz Ramo D. *Int J Quantum Chem*, 2022, 122: e26975

17 Parrish RM, Hohenstein EG, McMahon PL, Martínez TJ. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 230401

18 Dirac PAM. *Proc R Soc Lond A*, 1929, 123: 714–733

19 Endo S, Cai Z, Benjamin SC, Yuan X. *J Phys Soc Jpn*, 2021, 90: 032001

20 Liu J, Fan Y, Li Z, Yang J. *Chem Soc Rev*, 2022, 51: 3263–3279

21 Huggins WJ, O′Gorman BA, Rubin NC, Reichman DR, Babbush R, Lee J. *Nature*, 2022, 603: 416–420

22 Elfving VE, Broer BW, Webber M, Gavartin J, Halls MD, Lorton KP, Bochevarov A. 2020, preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2009.12472

23 Cao C, Hu J, Zhang W, Xu X, Chen D, Yu F, Li J, Hu HS, Lv D, Yung MH. *Phys Rev A*, 2022, 105: 062452

24 Liu J, Li Z, Yang J. *J Chem Theor Comput*, 2022, 18: 4795–4805

25 Wang Q, Zou J, Xu E, Pulay P, Li S. *J Chem Theor Comput*, 2019, 15: 141–153

26 Wang Q, Duan M, Xu E, Zou J, Li S. *J Phys Chem Lett*, 2020, 11: 7536–7543

27 Yang Y, Lu BN, Li Y. *PRX Quantum*, 2021, 2: 040361

28 Huo M, Li Y. 2021, preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2109.07807

29 Endo S, Benjamin SC, Li Y. *Phys Rev X*, 2018, 8: 031027

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

30 Liu J, Li Z, Yang J. *J Chem Phys*, 2021, 154: 244112
31 Long GL. *Commun Theor Phys*, 2006, 45: 825–844
32 Wei S, Li H, Long GL. *Research*, 2020, 2020: 1486935
33 Yuan X, Endo S, Zhao Q, Li Y, Benjamin SC. *Quantum*, 2019, 3: 191
34 Wang H. *Phys Rev A*, 2016, 93: 052334
35 Li Z, Liu X, Wang H, Ashhab S, Cui J, Chen H, Peng X, Du J. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 090504
36 Wang H, Yu S. *Quantum Inf Process*, 2021, 20: 40
37 Zeng J, Cao C, Zhang C, Xu P, Zeng B. *Quantum Sci Technol*, 2021, 6: 045009
38 Liu J, Wan L, Li Z, Yang J. *J Chem Theor Comput*, 2020, 16: 6904–6914
39 Fan Y, Liu J, Li Z, Yang J. *J Phys Chem Lett*, 2021, 12: 8833–8840
40 Cai X, Fang WH, Fan H, Li Z. *Phys Rev Res*, 2020, 2: 033324
41 Huang K, Cai X, Li H, Ge ZY, Hou R, Li H, Liu T, Shi Y, Chen C, Zheng D, Xu K, Liu ZB, Li Z, Fan H, Fang WH. *J Phys Chem Lett*, 2022, 13: 9114–9121
42 Huh J, Guerreschi GG, Peropadre B, McClean JR, Aspuru-Guzik A. *Nat Photon*, 2015, 9: 615–620
43 Wang Y, Ren J, Li W, Shuai Z. *J Phys Chem Lett*, 2022, 13: 6391–6399
44 Tao Y, Zeng X, Fan Y, Liu J, Li Z, Yang J. *J Phys Chem Lett*, 2022, 13: 6420–6426
45 Zhang SX, Wan ZQ, Lee CK, Hsieh CY, Zhang S, Yao H. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 120502
46 Zhang J, Pagano G, Hess PW, Kyprianidis A, Becker P, Kaplan H, Gorshkov AV, Gong ZX, Monroe C. *Nature*, 2017, 551: 601–604
47 Zhong HS, Wang H, Deng YH, Chen MC, Peng LC, Luo YH, Qin J, Wu D, Ding X, Hu Y, Hu P, Yang XY, Zhang WJ, Li H, Li Y, Jiang X, Gan L, Yang G, You L, Wang Z, Li L, Liu NL, Lu CY, Pan JW. *Science*, 2020, 370: 1460–1463
48 Gong M, Wang S, Zha C, Chen MC, Huang HL, Wu Y, Zhu Q, Zhao Y, Li S, Guo S, Qian H, Ye Y, Chen F, Ying C, Yu J, Fan D, Wu D, Su H, Deng H, Rong H, Zhang K, Cao S, Lin J, Xu Y, Sun L, Guo C, Li N, Liang F, Bastidas VM, Nemoto K, Munro WJ, Huo YH, Lu CY, Peng CZ, Zhu X, Pan JW. *Science*, 2021, 372: 948–952
49 Shen Y, Zhang X, Zhang S, Zhang JN, Yung MH, Kim K. *Phys Rev A*, 2017, 95: 020501
50 Bauer B, Bravyi S, Motta M, Chan GKL. *Chem Rev*, 2020, 120: 12685–12717
51 Li Z, Guo S, Sun Q, Chan GKL. *Nat Chem*, 2019, 11: 1026–1033
52 Pan F, Zhang P. 2021, preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2103.03074
53 Pan F, Chen K, Zhang P. *Phys Rev Lett*, 2022, 129: 090502
54 Pan F, Zhang P. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 030501
55 Fan Y, Liu J, Zeng X, Xu Z, Shang H, Li Z, Yang J. 2022, preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2208,10978.
56 Shang H, Shen L, Fan Y, Xu Z, Guo C, Liu J, Zhou W, Ma H, Lin R, Yang Y, Li F, Wang Y, Li Z. 2022, preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2207.03711
57 Luo XZ, Liu JG, Zhang P, Wang L. *Quantum*, 2020, 4: 341
58 Kirkpatrick J, McMorrow B, Turban DHP, Gaunt AL, Spencer JS, Matthews AGDG, Obika A, Thiry L, Fortunato M, Pfau D, Castellanos LR, Petersen S, Nelson AWR, Kohli P, Mori-Sánchez P, Hassabis D, Cohen AJ. *Science*, 2021, 374: 1385–1389

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222

Challenges and opportunities of quantum-computational chemistry

Zhenyu Li[1], Jie Liu[1], Xiangjian Shen[2*], Feixue Gao[2]

[1]*Hefei National Research Center for Physical Sciences at the Microscale, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*
[2]*Department of Chemical Sciences, National Science Foundation of China, Beijing 100085, China*
**Corresponding author (email: shenxj@nsfc.gov.cn)*

Abstract: This article has summarized the main academic communications from the forum titled as "Theoretical Chemistry in the Age of Quantum Computational Chemistry" which has been granted by National Natural Science Foundation of China (NSFC) and held in Hefei on July 31, 2022. Firstly, the main characters of quantum-computational chemistry (QCC) have been introduced. And some current important challenges of the QCC are also pointed out. Secondly, we have mainly discussed the progress of the QCC in China and new research directions based on current noisy and future fault-tolerant quantum computing platforms. At the same time, in order to meet the major technical needs in future developments, some key scientific issues in this field are suggested in the next 5–10 years, and some strategic suggestions for strengthening the support of NSFC were proposed.

Keywords: quantum computation, quantum computer, theoretical chemistry, electronic structure, artificial intelligence

doi: 10.1360/SSC-2022-0222

https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2022-0222