

Masterarbeit: Quantum Boltzmann Machines für die Simulation von Molekülen

Betreuer: David Kreplin, Fraunhofer IPA
david.kreplin@ipa.fraunhofer.de

Themenbeschreibung

Quantencomputer haben ein enormes Potenzial für die quantenmechanische Simulation von Molekülen. Der Quantencomputer wird dabei für die Approximation der Wellenfunktion der Elektronen im Molekül verwendet. Der Ansatz wird variationell optimiert und die Energie des Moleküls dabei minimiert. Ein möglicher Ansatz für die Wellenfunktion sind sogenannte *Restricted Boltzmann Machines* (RBMs), eine Art künstliches neuronales Netzwerk für die Generierung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Für RBMs existiert eine analoge Implementierung für den Quantencomputer, die bereits erfolgreich für die Simulation von Molekülen eingesetzt wurde.^{1,2}

In dieser Masterarbeit soll untersucht werden, wie gut sich diese *Quantum Boltzmann Machines* (QBMs) für die quantenmechanische Simulation von Molekülen eignen und welchen Einfluss die unterschiedlichen Konstruktionen der QBMs auf die Ergebnisse und die Optimierung haben. Der Beginn der Arbeit besteht aus einer eigenen Implementierung und Optimierung einer QBM für den Quantencomputer. Dabei sollen verschiedene Ansätze für den Aufbau untersucht werden. Anschließend wird getestet, wie gut die verschiedenen Ansätze die exakte Lösung der molekularen Schrödingergleichung approximieren können. Zum Abschluss der Arbeit soll die Quantum Boltzmann Maschine auf aktuellen Quantencomputern ausgeführt werden und Erfahrung mit dem noch signifikanten Messrauschen der aktuellen Hardware gemacht werden.

Die Arbeit bietet eine spannende Möglichkeit, sich mit den aktuellen Herausforderungen im Bereich des Quantencomputing auseinanderzusetzen. Vorkenntnisse im Bereich Molekularer Quantenphysik sind von großem Vorteil sowie das Interesse sich selbständig in komplexe Themen einzuarbeiten.

Forschungsfragen

- Wie lässt sich eine Restricted Boltzmann Machine auf den Quantencomputer übertragen und welche unterschiedlichen Ansätze gibt es?
- Wie gut lässt sich eine Quantum Boltzmann Machine trainieren?
- Wie genau ist die Approximation der Quantum Boltzmann Machine an die exakte Lösung?
- Wie stark ist der Einfluss von Rauschen der echten Quanten Hardware?

Voraussetzungen

- Studiengänge: Physik, Theoretische Chemie oder ähnliche Fachrichtung
- Erfahrung in molekulare Quantenphysik oder Elektronenstruktur Theorie

¹ Xia, Rongxin, and Sabre Kais. "Quantum machine learning for electronic structure calculations." *Nature communications* 9.1 (2018): 4195.

² Sureshbabu, Shree Hari, et al. "Implementation of quantum machine learning for electronic structure calculations of periodic systems on quantum computing devices." *Journal of Chemical Information and Modeling* 61.6 (2021): 2667-2674.