

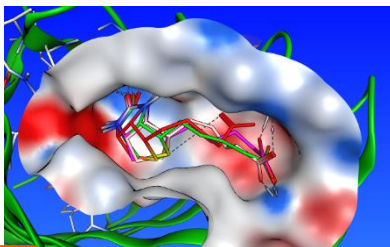
高精度量子化学計算のための ADAPT-QSCI法のHPC-QC実行に関する取組

JSR株式会社
リサーチフェロー
RDテクノロジー・デジタル変革センター
マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長
大西裕也

化学企業とコンピューテーション

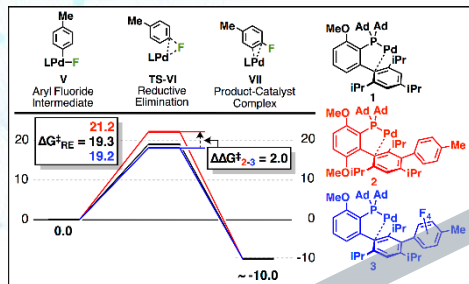
量子化学計算：
HPC x QCにより
計算可能領域を拡張したい
対象

Ligand-Protein Docking Simulation



From the website of MOLSIS Inc.

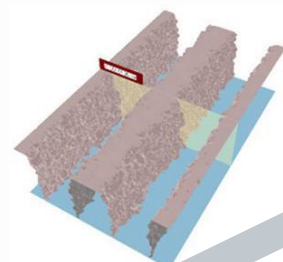
Mechanism of Catalytic Reaction



From the website of Schrödinger, Inc.

Molecular Size

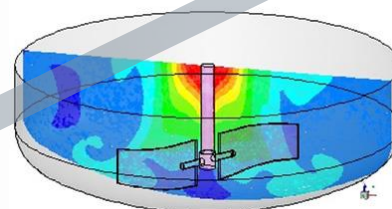
Lithography Simulation



From the website of Prolith

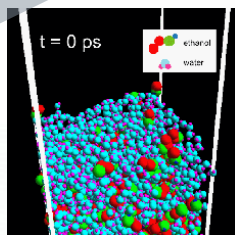
Plant Size

Fluid Simulation



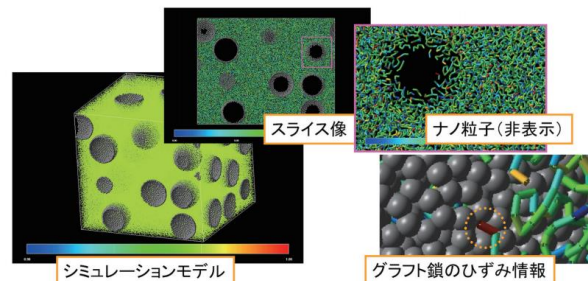
From the website of MicroWave Inc.

Adsorption Simulation



From the website of Yasuoka group in Keio Univ.

Structure Simulation of Elastomer



「ゴム中のナノ粒子ネットワーク構造のモデル構築による
高性能タイヤの開発」住友ゴム工業 地球シミュレータ報告書より

量子コンピュータでの量子化学計算で期待される領域

Accurate calculations of ...

light absorption

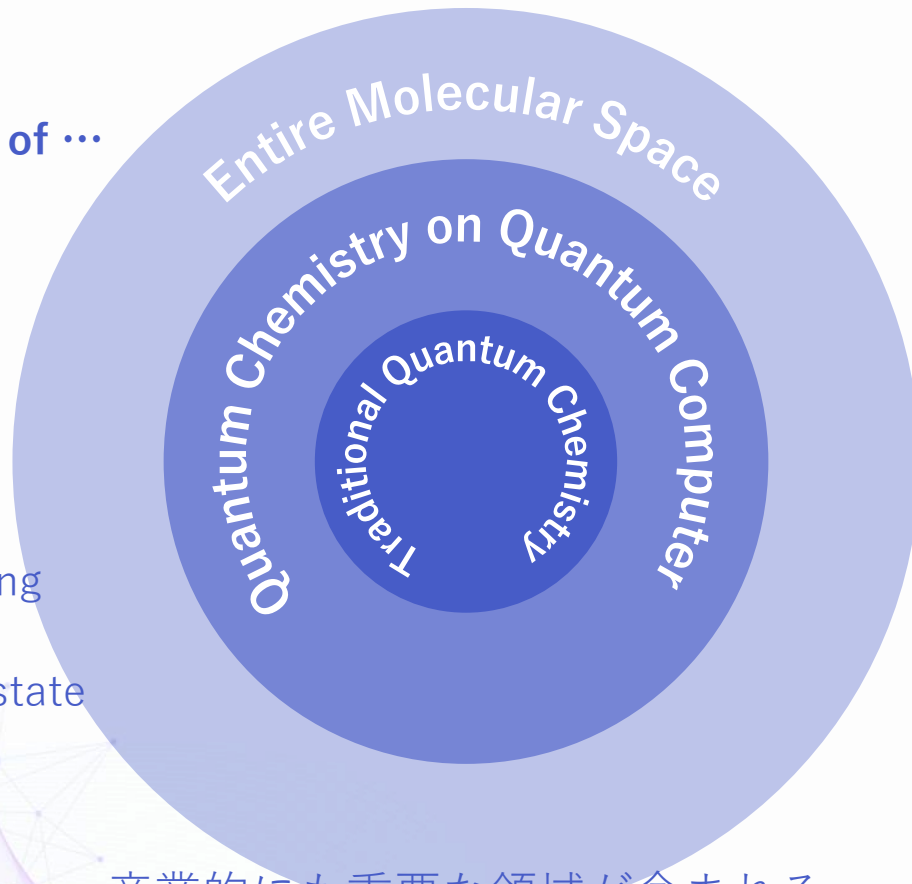
light emission

spin polarizability

multiple-bond breaking

complicated transition state

etc...



Applied to ...

solar energy conversion

light emitting devices

molecular magnets

metalloenzyme

oxidization

etc...

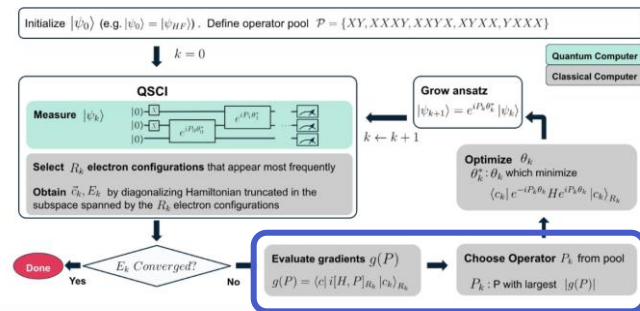
産業的にも重要な領域が含まれる

JHPC-quantum TUPで取り組んでいること

ADAPT-QSCI法のHPC-QC実行

- 利点: QSCIの入力量子状態として厳密な固有状態を必要としない
 - VQE、ADAPT-VQEと比べて、2 qubit ゲート数およびサンプリング回数が少なくて済む
- 課題: 勾配計算のための交換子の準備コストが大きい
 - qubit数 N に対して、 $O(N^8)$ のコスト
→ハミルトニアン項数: $O(N^4)$ x operator poolサイズ: $O(N^4)$
- 本プロジェクトの目標
 - 富岳を活用し準備コストの問題に対処
 - 勾配計算を並列化したい(今回はこちらに注目)
 - 大規模な部分空間Hamiltonianの対角化に対応したい
 - qubit数が大きな系でADAPT-QSCIを実行することを目指す
 - 大規模系に対するADAPT系アルゴリズム実験はこれまで行われてこなかった
 - 本研究は株式会社QunaSys様との共同研究として進めています

Adaptively construct ansatz to calculate the ground state and its energy using QSCI



ボトルネック