

JHPC-quantumテストユーザープログラム

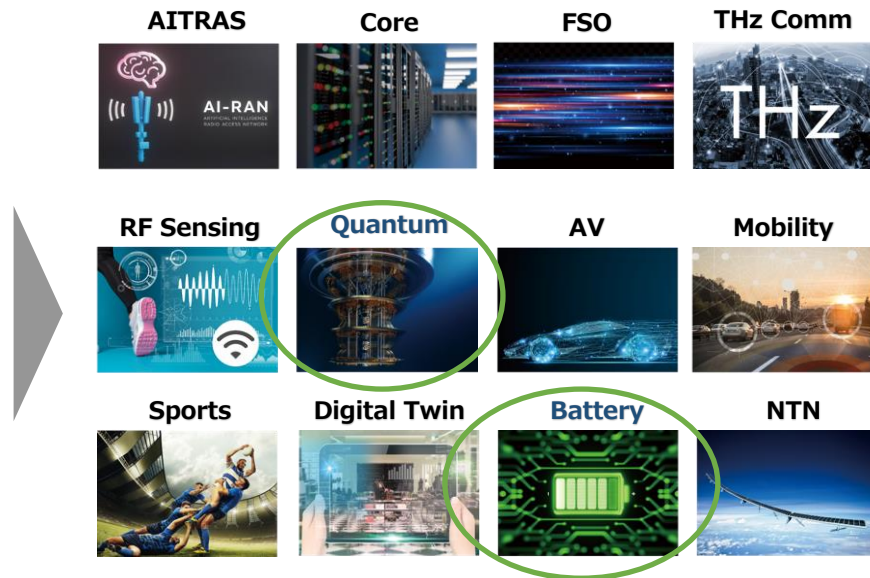
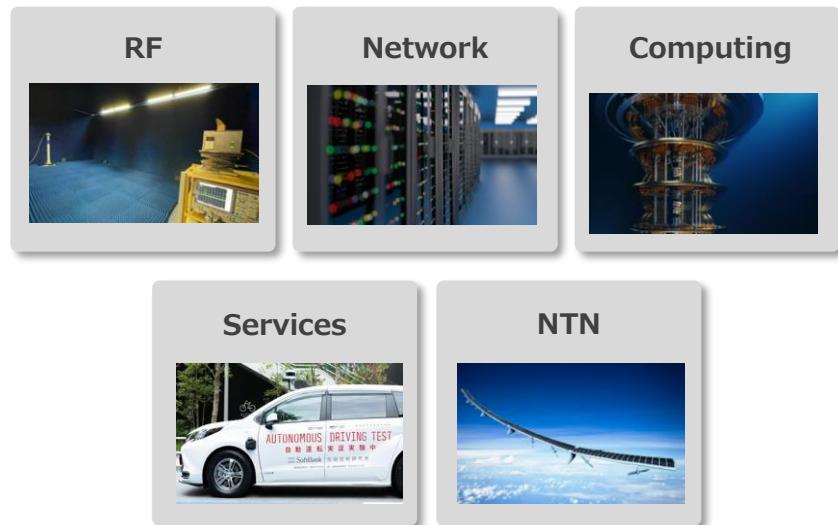
量子HPC連携対応 QSCI-AFQMCの実証と検証

ソフトバンク先端技術研究所 先端技術開発部 量子情報技術課

青木 俊紘

2025年12月12日

ソフトバンク先端技術研究所が描くミライ



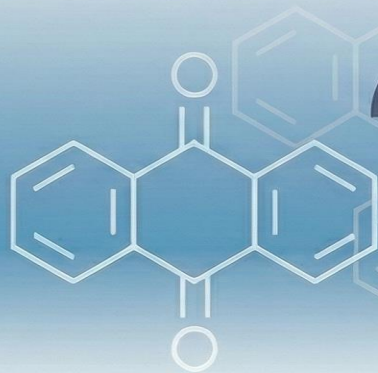
70 以上のプロジェクトを推進



HAPS

ドローン
タクシー

量子コンピュータを 用いた高精度な材料 探索



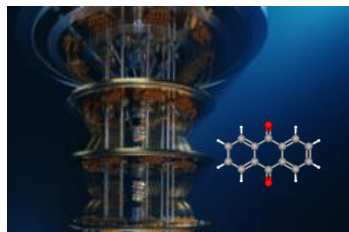
高重量
エネルギー
密度

軽くて
長時間使える
電池

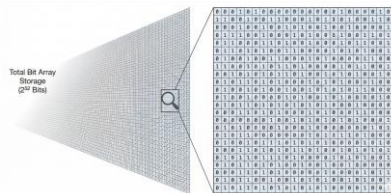
QSCI-AFQMCで繋ぐ量子・「富岳」・ソフトバンク AI DC

大阪大学との共同研究

IBM QPU



Bit Array



Fugaku(CPU)



SoftBank AI DC(GPU)



- ❖ HPC(CPUとGPU)を活用し、現行のQPUの制約下においても実用的な計算を早期に実現
- ❖ QPU単体、HPC単体で計算が困難な50量子ビット領域での材料探索の可能性を検証

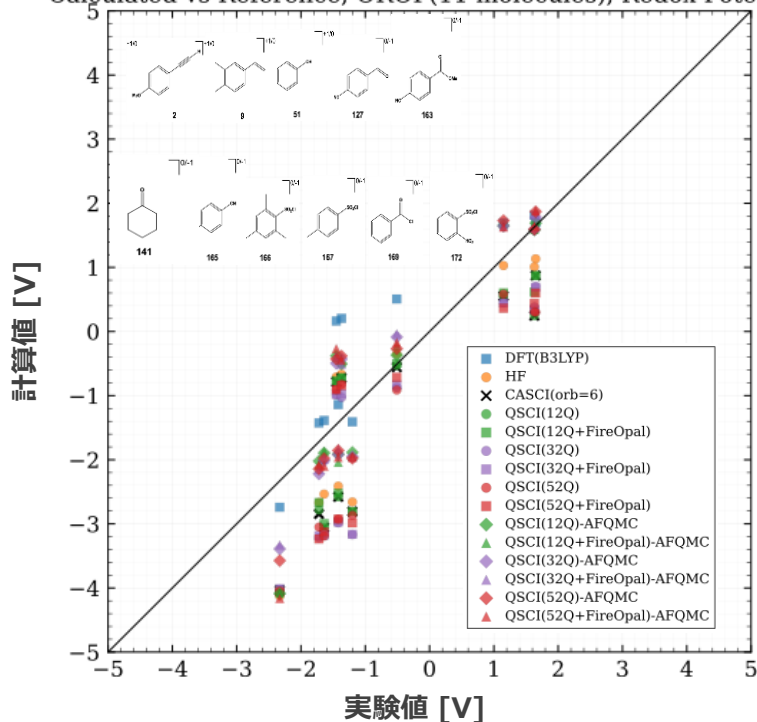
QSCI-AFQMC→ Y. Yoshida et al., Auxiliary-field quantum Monte Carlo method with quantum selected configuration interaction (2025).

本研究で用いた量子回路→ 宮腰祥平ほか, 密度行列繰り込み群を用いた新規量子回路最適化手法の開発(2024)

材料探索の鍵：酸化還元電位予測

52量子ビット (ibm_kawasaki) においても実験値との相関を達成

Calculated vs Reference, OROP(11 molecules), Redox Potential



計算手法		相関係数	MAE	MSE
スクリーニングの標準手法 DFT(B3LYP)		0.9021	0.5849	0.6276
量子HPC連携対応 QSCI	32Q	0.8815	1.1196	1.5611
	52Q	0.8679	1.1204	1.5187
量子HPC連携対応 QSCI-AFQMC	32Q	0.9346	0.5480	0.4016
	52Q	0.9301	0.5731	0.4632

52量子ビットからの試行波動関数を用いても優位な結果

QPUを用いた材料探索の可能性へ踏み出す

※詳細な計算はポスターにてご説明いたします
量子HPC連携対応QSCI-AFQMCの適用先を募集しております

スクリーニングの標準手法を超える実用レベルの予測精度を達成

