

量子古典混合アルゴリズムによる量子化学計算とその並列化

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 氏名 水上 渉

目的 近年、古典コンピュータと量子コンピュータがそれぞれ得意なところを担当する量子古典混合アルゴリズムが注目を集めている。本研究では、並列計算を用いることでこの量子古典混合アルゴリズムのシミュレーションの高速化を図った。

内容 量子古典混合アルゴリズムの代表格である変分量子固有値法 (VQE) のシミュレーションの並列化をおこなった。量子回路エミュレータにはQulacsを用い、量子回路パラメータ勾配をMPI並列を使いプロセスごとに独立に求める方法を採用した。

結果 20Qubitを使った水分子の基底状態エネルギーのVQE計算を使ってCPUノードとGPUノードをそれぞれに於いてベンチマークをとった。CPUノードを利用した場合では、1ノードの場合と64ノード利用時点で32%の並列性能が得られた。

利用した計算機 SQUID