

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 量子古典混合アルゴリズムによる量子化学計算の並列計算による高速化を図った。

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) をマルチGPUに対応させた。量子回路エミュレータには cuQuantumを用い、量子回路パラメータ勾配にはMPI並列を用いた。

結果 マルチGPUを使うことでGateFabric回路が35量子ビットまで動作することを確認した。さらに水分子のVQE計算において1ノード8GPUで75秒、2ノード16GPUで39秒と高速化が達成された。

利用した計算機:
SQUID

