

量子コンピュータを用いた量子化学計算と マテリアルインフォマティクスのためのアルゴリズム開発

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 量子化学計算と量子機械学習の化学応用に向けた量子アルゴリズムとソフトウェアの開発をおこなった

内容 量子コンピュータを用いた量子化学計算の代表的アルゴリズムである変分量子固有値法 (VQE) をマルチGPUで効率的に計算する並列化アルゴリズムを開発・検証した。また、汎用ニューラルネットワークポテンシャルを用いて作成した記述子による量子機械学習を実施した。

結果 1node8GPUではVQEにおける期待計算で99.6%以上の並列化効率を実現した。また、NMR化学シフトを予測する量子機械学習モデルを作成し、通常の機械学習と同程度の精度を実現した。

利用した計算機:
SQUID GPUノード群

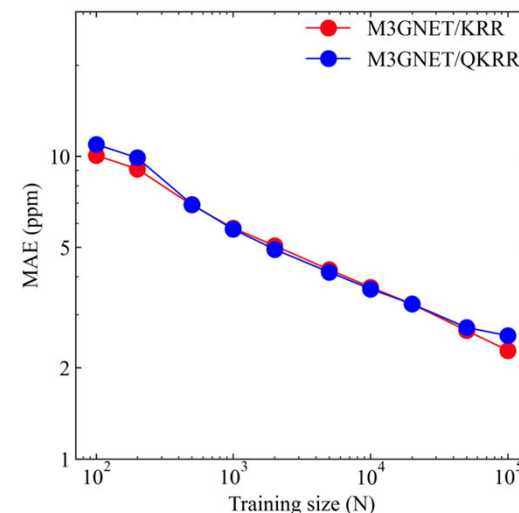


図: 量子機械学習 (QKRR)と通常の機械学習(KRR)を用いた
NMR化学シフト予測モデルとその精度