

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から得られるデータを将来有効活用するために、異なるレベルの量子化学計算を融合させるアルゴリズムTEAを開発した。TEAを使い複数のデータベースを統合し、有機系と無機系の双方に有用な汎用ニューラルネットワークポテンシャルモデルMACE-Osaka24を作成公開した。

結果 MACE-Osaka24の学習には8node32GPUを使用した。最も小さいモデルの場合で、モデルの構築は1日強要した。作成したモデルは有機系と無機系双方で良好な性能を示した。

利用した計算機:
SQUID GPUノード群

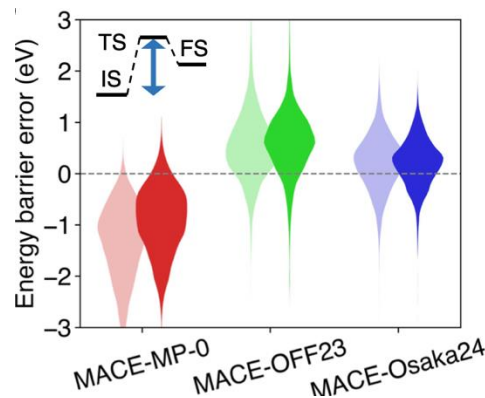


図: 有機分子の反応におけるMACE-Osaka24の精度
無機系や有機系特化のMACE-MP-0やMACE-OFF23より優れた結果を示した