

化学応用に向けた（準）量子古典混合アルゴリズムのための 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 化学計算のための量子古典混合アルゴリズムと準量子アルゴリズムのためのソフトウェア開発をおこなった

内容 量子コンピュータを用いた量子化学計算のアルゴリズム開発と、量子インスパイアードアルゴリズムの化学応用の二つを軸に、両者を実施するソフトウェア開発をおこなった。後者に関しては、Tensor Train を使った最適化手法(TTOpt)を使い、合金表面への分子の最適な吸着配置探索に応用した。

結果 MACE-Osaka24という汎用機械学習力場を使い合金表面への分子吸着の3次のHUBO形式のモデルを構築した。構築したモデルをTTOptを使い最適化を実施し、HUBO形式では遺伝的アルゴリズムを上回るパフォーマンスを確認した。

利用した計算機:
SQUID GPUノード群
CPUノード群

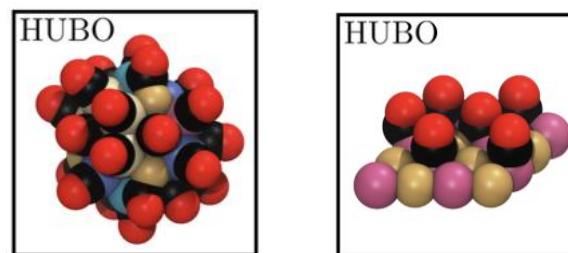


図: TTOptを用いて探索した合金表面へのCO分子の吸着配置の一部。
左はハイエントロピーナノ合金。右は2元系合金のスラブモデル。