

## 量子コンピュータによる量子化学計算#4 - 高速化 -

### Improvements of quantum chemical calculations with quantum computers

(株)MDR<sup>1</sup>, 立教大理<sup>2</sup>, 東大生産研<sup>3</sup>, 大阪市大理<sup>4</sup>, JST さきがけ<sup>5</sup>, NVIDIA NVAITC (Japan)<sup>6</sup>

○加藤拓己<sup>1</sup>, 奥脇弘次<sup>2</sup>, 望月祐志<sup>2,3</sup>, 杉崎研司<sup>4,5</sup>, 森野慎也<sup>6</sup>, 湊雄一郎<sup>1</sup>

MDR Inc.<sup>1</sup>, Rikkyo U.<sup>2</sup>, U. Tokyo<sup>3</sup>, Osaka City U.<sup>4</sup>, JST PRESTO<sup>5</sup>, NVIDIA NVAITC (Japan)<sup>6</sup>

°Takumi Kato<sup>1</sup>, Koji Okuwaki<sup>2</sup>, Yuji Mochizuki<sup>2,3</sup>, Kenji Sugisaki<sup>4,5</sup>,

Shinya Morino<sup>6</sup>, Yuichiro Minato<sup>1</sup>

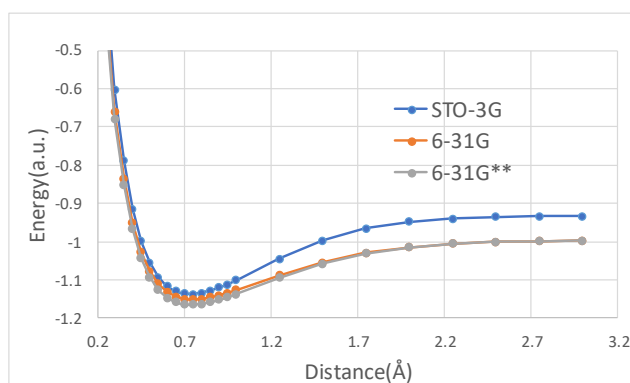
E-mail: kato@mdrft.com

**【序】** ここ数年、量子コンピュータ(シミュレータ含む)を用いた量子化学計算[1,2]に注目が集まり、arXiv などのプレプリントサーバが研究成果発表の「主戦場」になっている状況です。こうした中、私たちは教育現場での利用を意識したシステム開発を行ってきており、本学会でも過去 3 回発表しています。今回は、量子ゲートシミュレータ Blueqat [3]への対称性の導入、ならびに GPU ベースの加速ツール Qgate [4]の利用による高速化についてご紹介します。

**【求解フロー】** PySCF [5]を使って与えられた分子構造で HF 計算を行うと、分子軌道に添字変換された 1,2 電子積分の形で第二量子化ハミルトニアンが出力されます。これを、OpenFermion [6]によって Bravyi-Kitaev 変換してスピン系のハミルトニアンにします。次に、Blueqat [3]が UCCSD による VQE [1,2]を実行します。エネルギー面を得るには、構造を変えて一連の処理を反復します。

**【改良ポイント】** Blueqat [3]における励起行列式の生成に関してアーベル群の直積表を導入し、基底状態と同じ対称性を持つように制限しました。また、量子ゲート操作を Qgate [4]による加速が有効な疎行列乗算に変更しました。

**【H<sub>2</sub>の結果】** H<sub>2</sub>は D<sub>2h</sub> 対称性で扱いました。{STO-3G, 6-31G, 6-31G\*\*}基底による極小点付近のエネルギー曲線を右に示します。ここで、全軌道数は順に 2, 4, 10 です。計算時間は、CPU: AMD Ryzen 7 3800X、GPU: GeForce GTX 1080 の PC 環境で、6-31G が 1.5 秒、6-31G\*\*が 6 分です。改良前に比



すと、6-31G の計算は対称性導入と疎行列化で合せて 100 倍超の高速化です。6-31G\*\*の計算は前は不可でしたが、今回は Qgate の加速も有効に効いて解けるようになりました。

**【参考文献】** [1] Cao et al., Chem. Rev. 119 (2019) 10856. [2] McArdle et al., Rev. Mod. Phys., 92 (2020) 015003-1. [3] (<https://github.com/Blueqat/Blueqat>). [4] (<https://github.com/shinmorino/qgate>). [5] Sun et al., WIREs Comp. Mol. Sci. (2017) e1340, (<https://sunqm.github.io/pyscf/>). [6] (<https://github.com/quantumlib/OpenFermion>).