量子コンピュータによる量子化学計算#3 - 性能の向上 -

Improvements of quantum chemical calculations with quantum computers

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

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

MDR Inc.[1], Rikkyo U.[2], U. Tokyo[3], Osaka City U.[4], JST PRESTO[5], NVIDIA NVAITC (Japan)[6]

°Takumi Kato[1], Koji Okuwaki[2], Yuji Mochizuki[2,3], Kenji Sugisaki[4,5],

Shinya Morino[6], Yuichiro Minato[1]

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】 近年、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、研究開発が盛んになっています。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進めており、本学会で過去 2 回発表を行っています[3,4]。[4]では内殻軌道の凍結[5]と仮想軌道の擬似自然軌道による削減[6]により、[3]での計算時間に比して LiH では 555 倍の高速化を達成しました[7]。今回の発表では、対称性の導入と GPU の利用による加速について報告します。

【求解フロー】 典型的なフローでは、与えられた分子構造で HF 計算を行い、得られた分子軌道と基底関数積分から分子積分を作成して第二量子化ハミルトニアンを構築し、BK 変換した後、VQE によって UCCSD 型の波動関数のパラメータを最適化して電子エネルギーを求めます[1,2]。発表[4,7]では、GAMESS[8]で基底関数積分の生成と HF 計算をした後、自作コードによる分子軌道の変換[5,6]と積分変換を施して第二量子化ハミルトニアンを構築し、これを OpenFermion[9]で BK 変換し、Blueqat[10]に入れて UCCSD/VQE のエネルギーを得ていました。

【性能の向上】 今回、UCCSD/VQE 段階で分子の対称性を利用することにしました。すなわち、各分子軌道に既約表現のラベルを付け、閉殻全対称条件を満たす励起のみを扱い、変数の数を減らすと共に回路深度も浅くしてコストを下げます。積分生成と HF のステップは、[3]と同じくモダンな PySCF[11]に戻します。さらに、軌道数・ビット数が増えた場合の加速のため、GPU アクセラレータ Qgate[12]を Blueqat のバックエンドで用います。これらの改善による性能の向上を当日にお示しします。今後は、開殻系分子のためにスピン対称性[13,14]の導入を図る予定です。

【参考文献】 [1] Cao et al., Chem. Rev. 119 (2019) 10856. [2] McArdle et al., Rev. Mod. Phys., in press, (https://arxiv.org/abs/1808.10402). [3] 渕ら, 応用物理学会 2019 年春季学術講演会, 12a-W833-5. [4] 加藤ら, 応用物理学会 2019 年秋季学術講演会, 18p-C206-5. [5] Hosteny et al., J. Chem. Phys. 62 (1975) 4764. [6] Jensen et al., J. Chem. Phys. 88 (1988) 3834 & (errata) J. Chem. Phys. 89 (1988) 5354. [7] Mochizuki et al., ChemRxiv, 2019/9/18, (https://bit.ly/2SnXfeV). [8] Schmidt et al. J. Comp. Chem. 14 (1993) 1347. [9] (https://github.com/quantumlib/OpenFermion). [10] (https://github.com/Blueqat/Blueqat). [11] Sun et al., WIREs Comp. Mol. Sci. (2017) e1340, (https://sunqm.github.io/pyscf/). [12] (https://github.com/shinmorino/qgate). [13] Sugisaki et al., Chem. Phys. Lett. X 1 (2019) 100002. [14] Sugisaki et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 21 (2019) 15356.

© 2020年 応用物理学会