

量子コンピュータによる微細構造分裂の直接計算法と GPUによる数値シミュレーションの高速化

Direct Computational Methods for Fine-structure Splitting by Quantum Computers and Accelerated Numerical Simulation by GPUs

大阪公大理¹, JST さきがけ², CQuERE(印)³, 九大情基研開せ⁴, 名大情基せ⁵,
立教大理⁶, 東大生研⁷, 物理研(印)⁸, 東工大理⁹

杉崎研司^{1,2,3}, V. S. Prasanna³, 大島聡史⁴, 片桐孝洋⁵,

○望月祐志^{6,7}, B. K. Sahoo⁸, B. P. Das^{3,9}

Osaka Metr. U.¹, JST-PRESTO², CQuERE(In.)³, Kyushu U.⁴, Nagoya U.⁵,

Rikkyo U.⁶, U. Tokyo⁷, PRL(In.)⁸, Tokyo Inst. Tech.⁹

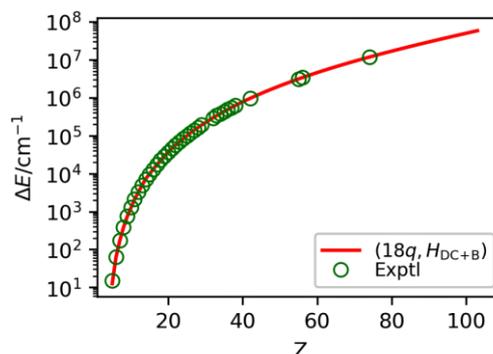
Kenji Sugisaki^{1,2,3}, V. S. Prasanna², Satoshi Ohshima⁴, Takahiro Katagiri⁵,

○Yuji Mochizuki^{6,7}, B. K. Sahoo⁸, B. P. Das^{3,9}

E-mail: fullmoon@rikkyo.ac.jp

【序】 ここ数年で量子コンピュータへの「過剰な期待」は次第に薄れ[1]、将来の FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computers)の実現を睨んで量子化学計算[2-4]など実用性が相対的に高い領域でアルゴリズム・ソフトウェア開発が地道に行われるようになってきました。こうした中、杉崎らはベイズ推定を援用する位相差推定アルゴリズム(BPDE)[5]によって注目する 2 状態間のエネルギー差を直接算定する手法を開発しました。今回の発表では、BPDE を 4 成分の相対論的な計算に拡張し、B 原子ならびに等電子系の原子イオン(Li⁹⁸⁺まで)の 2p_(1/2)–2p_(3/2)の微細構造分裂(スピン-軌道相互作用に由る)を高い精度で系統的に評価した事例[6]をご紹介します。

【計算の実行と結果】 核電荷の大きいアクチノイドのイオンまで扱うため、相対論的ハミルトニアンは Breit 補正まで含めています。ユニバーサル基底を動力学バランスの下で使い、主に{1s, 2s, 2p, 3s, 3p}の活性軌道空間の設定にて、18 量子ビットで計算しました。実行には、NVIDIA の cuQuantum [7]量子シミュレータを名古屋大学のスパコン「不老」 Type II の上で用いましたが、CPU に比べて GPU では 42.7 倍もの加速が得られました。計算結果を右図に示します。B では分裂値は僅か 15 cm⁻¹ ですが、電荷が大きくなると急速に大きくなります。BPDE による本計算では、全体を通じてきわめて良好な精度が保たれていることが分かります。



【参考文献】 [1] S. S. Gill et al., *Softw: Pract. Exper.* **52**, 66 (2022). [2] Y. Cao et al., *Chem. Rev.* **119**, 10856 (2019). [3] B. Bauer et al., *Chem. Rev.* **120**, 12685 (2020). [4] 杉崎ら, *映像情報メディア学会誌* **77**(1), 43 (2023). [5] K. Sugisaki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23**, 20152 (2021). [6] K. Sugisaki et al., arXiv:2212.02058v1. [7] <<https://developer.nvidia.com/cuquantum-sdk>>.