量子コンピューティング ユースケース集

大規模分子・固体向け 高精度エネルギー計算

三菱ケミカル・慶応大・IBM



国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

三菱ケミカル・慶応大・IBM：大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算【2024/06】 1／2

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

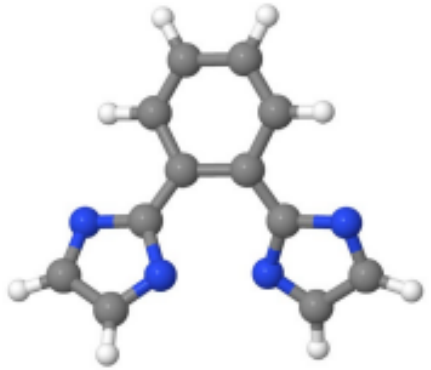
- 分子や固体の物性は、物質に含まれる電子の状態を計算することで知ることができる
- しかし、電子状態の計算は**電子の数に応じて指数的にコストが増加**するため、現状は**近似を利用して計算**を行っている
- 最もエネルギーの低い状態である電子の基底状態の計算では、**電子相関を近似した DFT（密度汎関数）**が広く用いられるが、**クーロン反発が強い複雑な電子構造を持つ物質の場合、十分な精度が得ることが困難**である

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピューターを活用することによって、**複雑な電子構造を持つ物質における、電子の基底状態計算の精度向上が期待**されている
- 現在の量子コンピューターは量子ビット数とゲート数に制限がある中、**量子コンピューター単体の性能を超える大規模・高精度な計算が求められていたため、三菱ケミカルと慶応大とIBMは共同でその計算手法の開発**を行った

期待されるビジネス効果

- 開発した 2 つの計算手法である「**HTN＋QMC**」と「**疑似アダマールテスト**」**を組み合わせて、フォトクロミックモデル分子であるモノアリルジイミダゾール**[*1]**を計算**した結果、**高精度で基底状態を算出**することができた
  - ✓ 具体的には、0.042±2.0 milli-Hartree[*2]という精度で、**一般的な化学現象を理解するための精度（1.6 milli- Hartree）よりも高精度**で計算できた



今回計算したモノアリルジイミダゾールの構造
グレーは炭素、白は水素、青は窒素を表している

参考：慶應義塾「「量子コンピューターを用いた大規模な分子・固体向け高精度エネルギー計算手法」がNature Research 出版社の専門誌に掲載」（https://www.keio.ac.jp/ja/press-releases/files/2024/6/10/240610-1.pdf）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

*1：1つのアリル基と2つのイミダゾールからなる化合物。イミダゾールは医薬品から日用品まで様々な用途に利用される
*2：原子や電子のスケールを扱う量子化学等で用いられる原子単位系

三菱ケミカル・慶応大・IBM ：大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算【2024/06】 2／2

検証

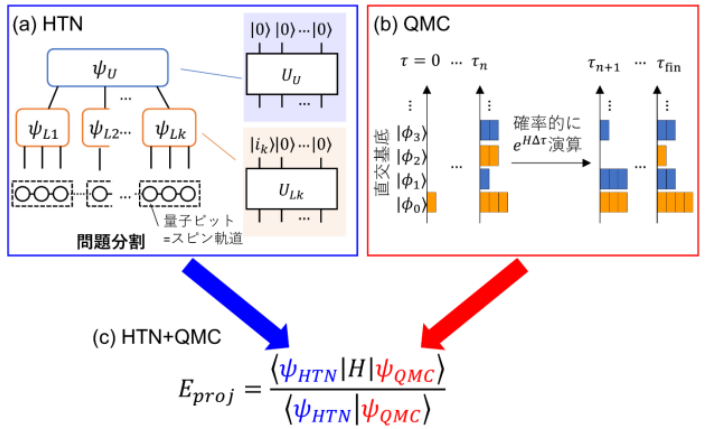
産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

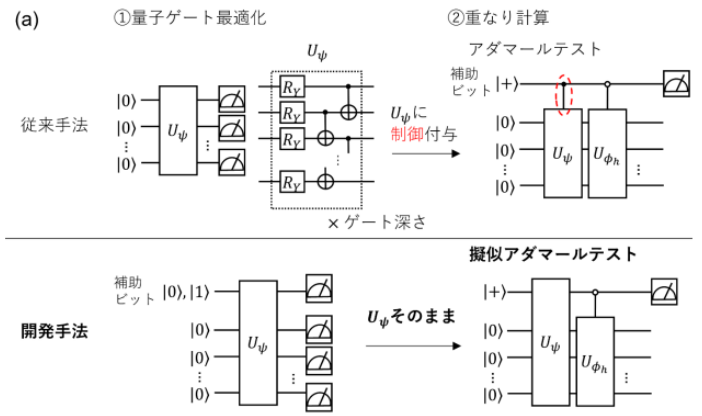
- **大規模な分子・固体のエネルギーを高精度で求めるために、2つの計算手法を開発**した
  - ✓ 量子コンピューターのサイズより大きな量子状態を小さなテンソル（ブロック）に分割し、テンソルは量子コンピューター・テンソル間接続は古典コンピューターを用いる「ハイブリッドテンソルネットワーク（HTN）」と、高精度なエネルギー計算手法である「量子モンテカルロ（QMC）」を組み合わせた「**HTN+QMC**」**を開発**
  - ✓ 量子状態同士の重なりを量子回路上で効率的に計算する「**疑似アダマールテスト**」**を開発**
- この計算手法を用いて、**フォトクロミックモデル分子*のエネルギー計算**を行った

*：光の強度変化に応じて色が変わる材料の性質

- 実際に活用したマシンは、**IBM のゲート方式の商用量子コンピューター「IBM Quantum System One」**である



HTN＋QMCの手法



疑似アダマールテスト

参考：慶應義塾「「量子コンピューターを用いた大規模な分子・固体向け高精度エネルギー計算手法」がNature Research 出版社の専門誌に掲載」（ https://www.keio.ac.jp/ja/press-releases/files/2024/6/10/240610-1.pdf）

*ゲート（gate-based） = 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。