

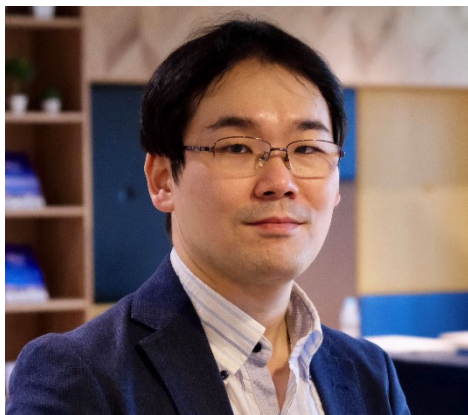


北海道大学

2022年度 第1回計算科学フォーラム
2022.10.4



大規模量子化学計算法 divide-and-conquer法の 現在と展望



小林 正人

北海道大学大学院理学研究院

北海道大学WPI-ICReDD

本日の講演内容

■ イントロダクション

- 量子化学計算とは
- なぜ大規模系を計算したいのか？

■ 分割統治(Divide-and-Conquer)法

- DC法とその他の大規模量子化学計算法
- DC法の理論とバッファ領域の自動決定
- (DC法の応用)

■ 量子計算・新概念計算による量子化学計算

- Annealing + Bayesian-optimization CI (ABCI)法

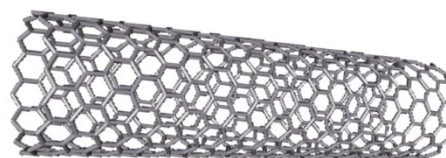
■ まとめ



量子化学計算とは

■ 化学(物質科学)の対象 = 分子(集団)・固体

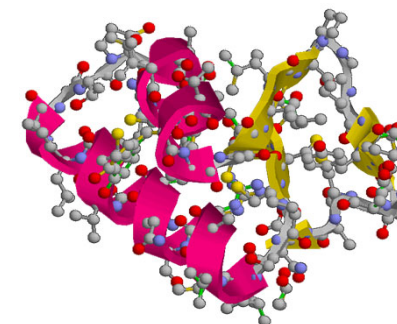
➤ 構成要素 { 原子核
電子



(原子核と)電子の
量子論的な振舞い



物質の
あらゆる性質



数値的に求める =

量子化学計算

■ 典型的量子化学計算(*ab initio*)

- 入力: 原子の座標、電子数、計算手法・基底関数
- 出力: 分子のエネルギー、電子分布(分子軌道)、プロパティ、エネルギー微分(場合によって)



量子化学計算のジレンマと近似計算法

■ 量子化学計算のジレンマ

ディラック(1929)^[1]

『化学を支配する法則は完全にわかった。しかし、
複雑すぎて解けない方程式に行き着くのが問題だ』



➤ 解くべき方程式: Full CI (完全にわかっている)

$$|\Psi\rangle = \sum c_{n_1 n_2 \dots n_M} |n_1 n_2 \dots n_M\rangle$$

- $|n_1 n_2 \dots n_M\rangle$: 電子配置【 $n_i=1$ (占有) or 0(非占有)】
✓ $\sum n_i = N_e$

➤ 古典計算機を利用した計算: $O(N_e!)$

様々な近似計算法の開発により超克
= 量子化学計算の歴史

[1] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A **123**, 714 (1929).



様々な量子化学計算手法と計算時間・精度

■ 量子化学計算にかかる計算時間と精度

分子の大きさの3乗に比例して計算時間増大

方法	Hartree-Fock (HF)法	密度汎関数理論(DFT)	MP2法 (摂動法)	CCSD法	CCSD(T)法
計算時間	$O(N^3)$	$O(N^3)$	$O(N^5)$	$O(N^6)$	$O(N^7)$
計算精度	定性的				正確

計算時間は

- ✓ 精度の低い理論でも $O(N^3)$
- ✓ 精度が上がるにつれて莫大に



量子化学計算にかかる時間と精度

■ 様々な量子化学計算手法と精度

分子の大きさの3乗に比例して計算時間増大

方法	Hartree-Fock (HF)法	密度汎関数理論(DFT)	MP2法 (摂動法)	CCSD法	CCSD(T)法
計算時間	$O(N^3)$	$O(N^3)$	$O(N^5)$	$O(N^6)$	$O(N^7)$
計算精度	定性的				正確
1000倍性能の計算機で	×10	×10	×4.0	×3.2	×2.7

計算時間は

- ✓ 精度の低い理論でも $O(N^3)$
- ✓ 精度が上がるにつれて莫大に

『富岳』をただ使うだけでは
大きな分子を扱えない

最先端の分子理論も不可欠



量子化学計算の種類

■ 波動関数理論: N 電子波動関数 $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{N_e})$

- Schrödinger方程式に依拠
- Hartree-Fock (HF)法による1電子の波動関数から構築
 - 平均的なポテンシャル中の1電子描像
- HF波動関数を系統的に改善する電子相関計算法
 - 摂動論: MP2, MP3, MP4, ...
 - 結合クラスター(CC)法: CCSD, CCSD(T), CCSDT, ...

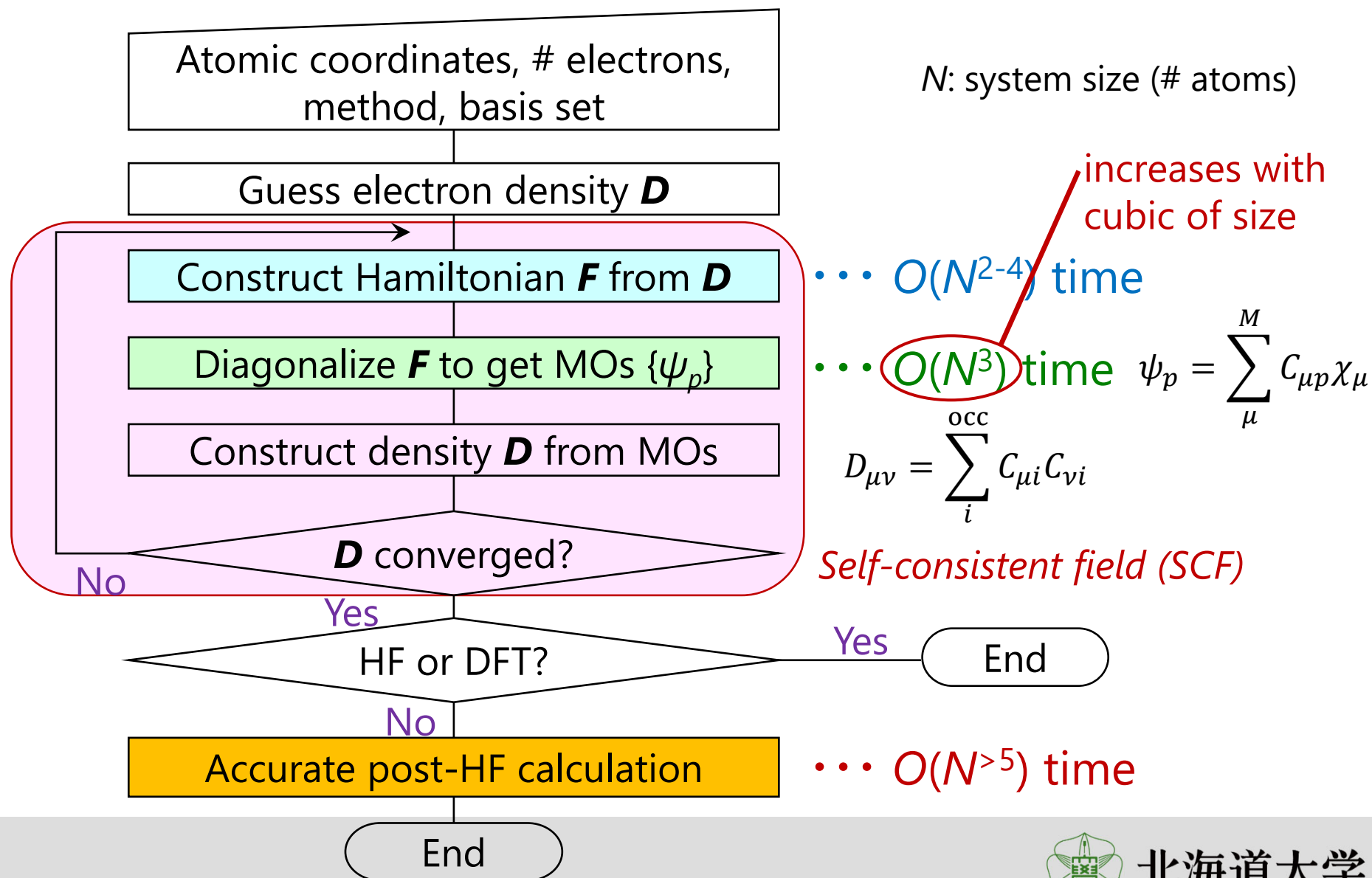
■ 密度汎関数理論: 電子密度の空間分布 $\rho(\mathbf{r})$

- Hohenberg-Kohnの定理に依拠
 - 厳密なエネルギーは電子密度分布関数 $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数
 - HF法とほぼ同じ手続きで電子相関を考慮可能
 - 厳密なエネルギー汎関数は今のところ不明
 - ✓ 様々な近似汎関数: e.g.) B3LYP, M06, ω B97X-D, ...



量子化学計算の手続き

9



北海道大学

大規模量子化学計算手法

- 並列化とプログラムの工夫で頑張る
 - ProteinDF (タンパク質密度汎関数プログラム)
 - RSDFT (実空間密度汎関数理論)
- 密度行列を近似計算
 - CONQUEST
- 数学・アルゴリズムにより高速化
 - 積分のRI計算, Laplace変換MP2法



『方法序説』に学べ

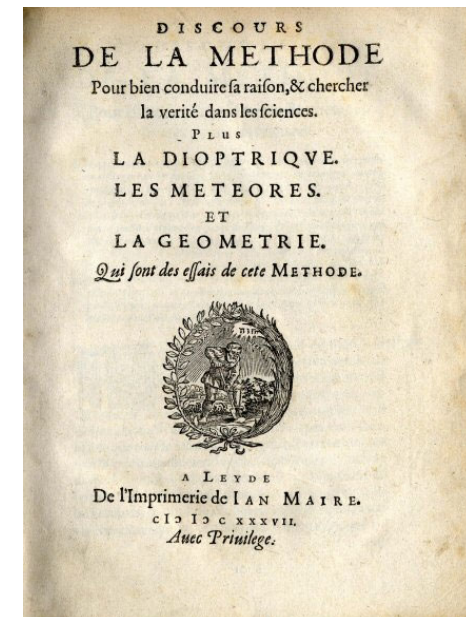
■ ルネ・デカルトの名著 (1637)

- 「近代哲学の父」
- *Cogito ergo sum* (我思う、故に我あり)
- デカルト座標系の提案

■ 物事を考える4つの原則のひとつ

- 「検討する困難(**大きな問題**)を問題をよりよく解くために必要な小部分(**小さな問題**)に分割せよ。」

世界で最初の「分割統治」という考え方



大規模量子化学計算手法

■ 並列化とプログラムの工夫で頑張る

- ProteinDF (タンパク質密度汎関数プログラム)
- RSDFT (実空間密度汎関数理論)

■ 密度行列を近似計算

- CONQUEST

■ 数学・アルゴリズムにより高速化

- 積分のRI計算, Laplace変換MP2法

■ 系を分割して計算を簡略化 $O(N) \wedge$

- フラグメント分子軌道(FMO)法^[1]
- エロンゲーション法^[2]
- 分割統治(DC)法

[1] D.G. Fedorov and K. Kitaura eds., *The Fragment Molecular Orbital Method* (CRC Press, 2009);

[2] A. Imamura, Y. Aoki, and K. Maekawa, *J. Chem. Phys.* 95, 5419 (1991).



フラグメント分子軌道(FMO)法

■ 分子を(単結合で)切断

- 結合に使われる電子は混成軌道を使って一方に寄せる(HOP)

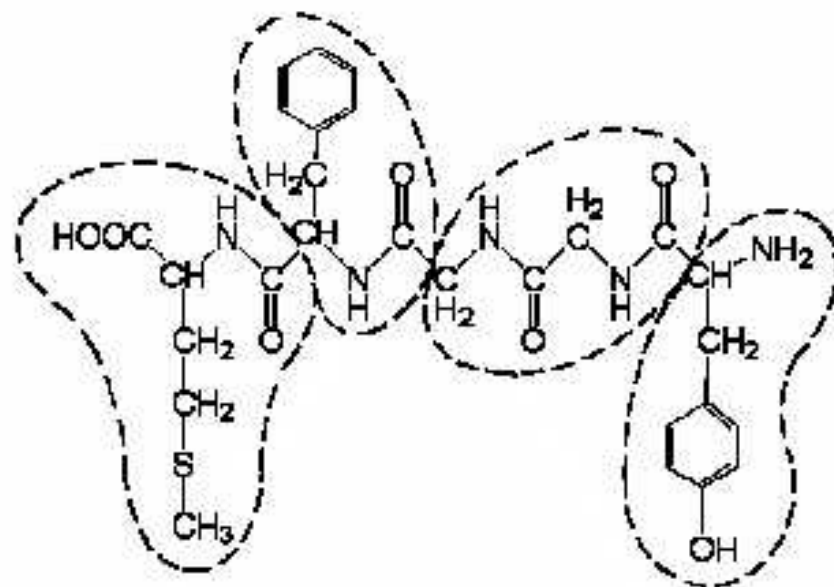
■ エネルギー等のプロパティは**多体展開**で求める

$$E_{\text{FMO1}} = \sum_I E_I \quad (\text{FMO1})$$

$$E_{\text{FMO2}} = \sum_I E_I + \sum_{I>J} (E_{IJ} - E_I - E_J) \quad (\text{FMO2})$$

$$E_{\text{FMO3}} = E_{\text{FMO2}} + \sum_{I>J>K} (E_{IJK} - E_{IJ} - E_{JK} - E_{IK} + E_I + E_J + E_K) \quad (\text{FMO3})$$

- 多体展開を打ち切り ➡ 計算の大幅な高速化



E_i : モノマーのエネルギー
 E_{ij} : ダイマーのエネルギー
 E_{ijk} : トリマーのエネルギー

分割統治(DC)量子化学計算

- 部分系に分けて計算するのはFMO法と同じ
- 部分系の周辺を**バッファ領域**として計算に含め、環境とのあらわな相互作用を考慮
- 部分系の電子数は**フェルミ準位**を導入して自動決定(予め指定する必要なし)

SCFと電子相関計算で取り扱いが大きく異なる

■ 分割統治SCF法

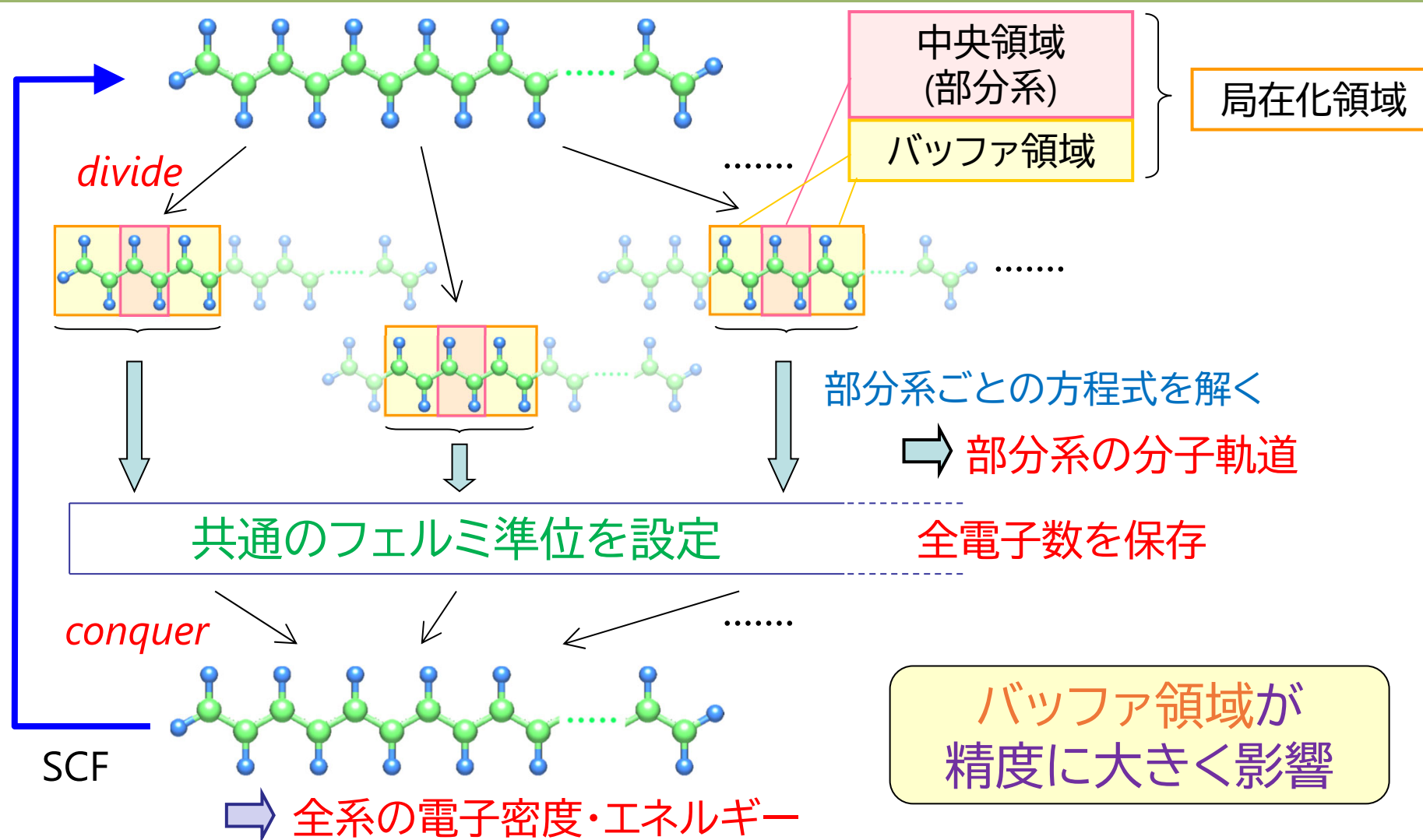
- **全系の密度行列**を部分系の寄与の和で表現
- 分割行列を導入

■ 分割統治post-HF電子相関計算

- **部分系の相関エネルギー**を部分系の分子軌道で表現



分割統治量子化学計算のスキーム^[1,2]



[1] **MK** and H. Nakai, in *Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics* (2011), pp.97-127.

[2] W. Yang and T.-S. Lee, *J. Chem. Phys.* **103**, 5674 (1995).



北海道大学

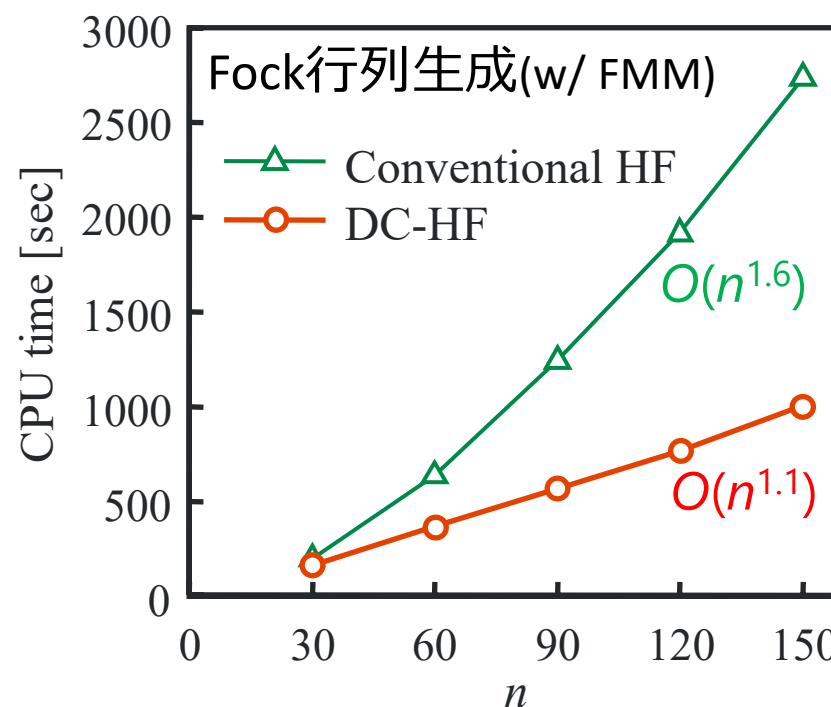
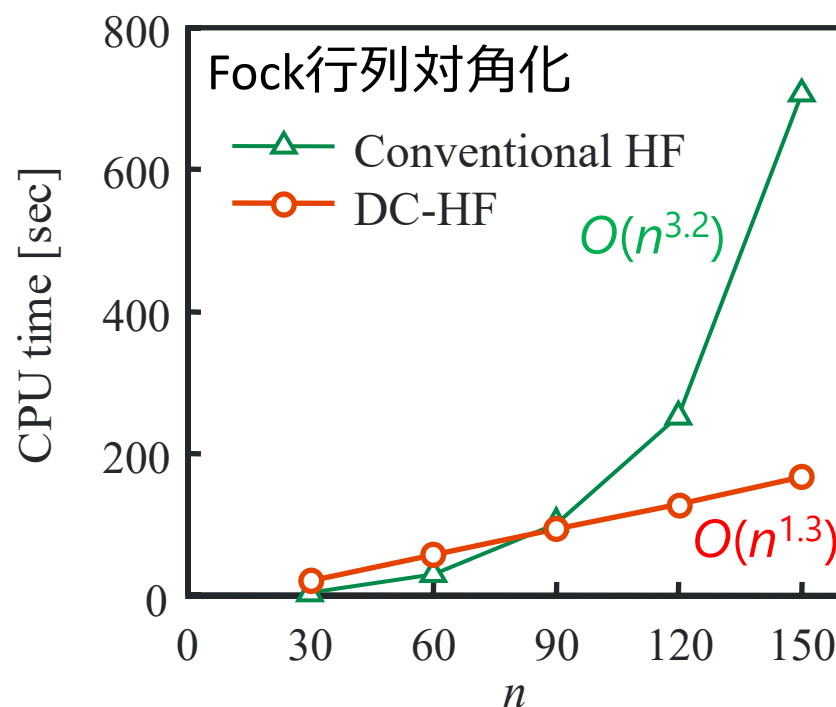
DC-HF計算: CPU時間

■ 最初のSCF cycleにかかるCPU時間^[1]

➤ ポリエン鎖 C_nH_{n+2}



基底関数: 6-31G**
中央領域: $C_2H_{2(3)}$ (1 unit)
バッファ: 6 units
Pentium4 / 3.20 GHz



DC法によりほぼリニアスケーリングを達成

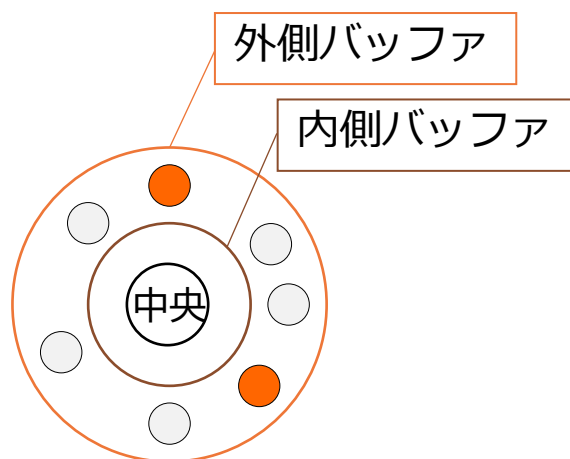
[1] MK and H. Nakai, in *Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics* (2011), pp.97-127.



DC-SCF計算に対するバッファ領域自動決定法

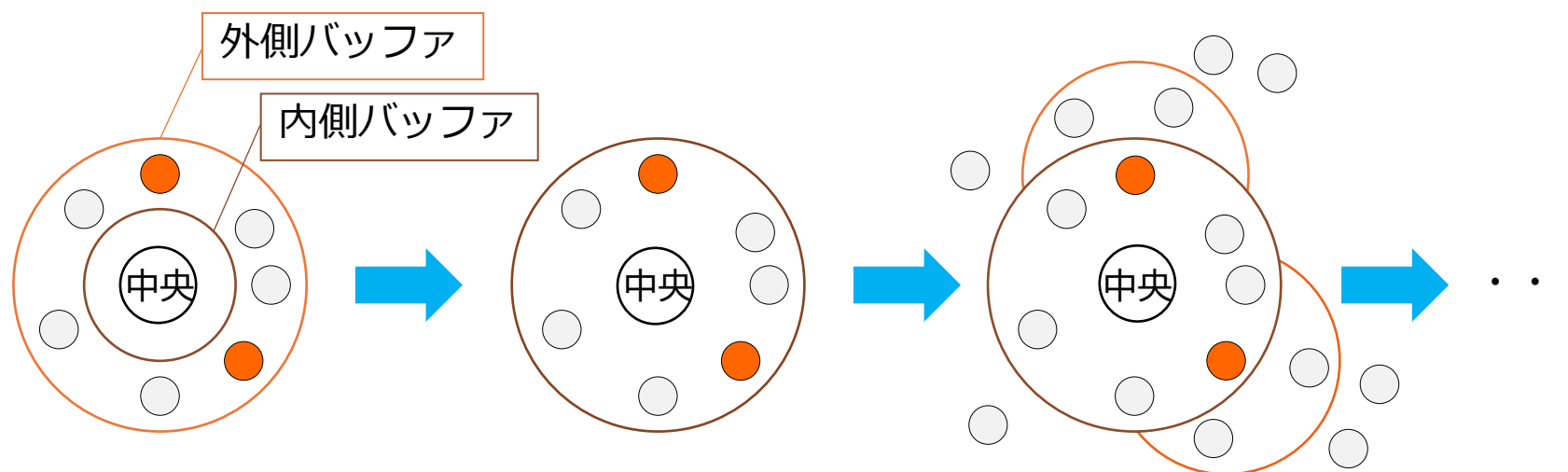
- 2 layerのバッファ領域を利用して、DC法の精度の力ギとなるバッファ領域を自動決定する方法を開発
 - i. 外側バッファ領域に属する原子が与えているエネルギー誤差 ΔE_A^α を摂動的に見積もり

$$\Delta E_A^\alpha = 2 \sum_{\mu \in A} \sum_{\nu \in S(\alpha)} \Delta D_{\mu\nu}^\alpha F_{\nu\mu}^\alpha$$



DC-SCF計算に対するバッファ領域自動決定法

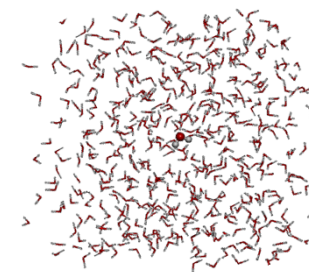
- 2 layerのバッファ領域を利用して、DC法の精度の力ギとなるバッファ領域を自動決定する方法を開発
 - i. 外側バッファ領域に属する原子が与えているエネルギー誤差 ΔE_A^α を摂動的に見積もり
 - ii. 外側バッファ領域に属する原子を内側バッファ領域へ
 - iii. ΔE_A^α の大きい原子を基準に外側バッファ領域を再構築



バッファ領域自動制御DC法の精度と計算時間

■ 誤差と計算時間の初期バッファサイズ依存性

- 系: 水分子1000個の箱形モデル系
- 計算レベル: PM3



閾値: $0.1 \mu E_h$

$r_b^{\text{in}} / \text{\AA}$	$r_b^{\text{out}} / \text{\AA}$	Energy/ E_h	(Diff./ $\mu E_h \cdot \text{atom}^{-1}$)	Time/s
3.5	4.5	-11945.190938	(+0.48)	250
4.0	5.0	-11945.190942	(+0.48)	246
4.5	5.5	-11945.190837	(+0.51)	233
5.0	6.0	-11945.190719	(+0.55)	209
5.5	6.5	-11945.190414	(+0.65)	209
Standard PM3		-11945.192376		2443

- ✓ 1原子当たりのエネルギー誤差を約 $0.5 \mu E_h$ 程度に制御
- ✓ 計算時間を大幅に低減



■ DC-HF計算 → 部分系MO

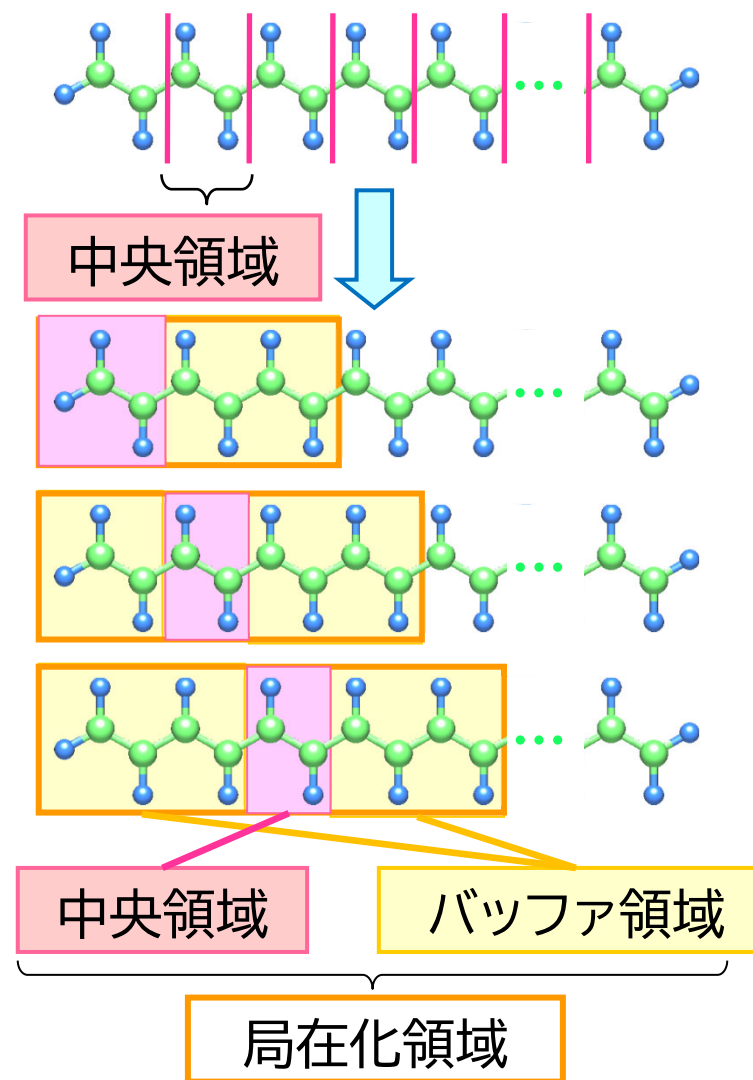
- Local canonical MO
- 占有・非占有軌道ともバッファ領域に広がっている

■ 部分系の相関エネルギー

- 部分系のMOから相関エネルギーを計算
- 中央領域の相関エネルギーのみが必要

↓

エネルギー密度解析
(EDA)^[2]の利用



[1] **MK**, Y. Imamura, and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* 127, 074103 (2007).

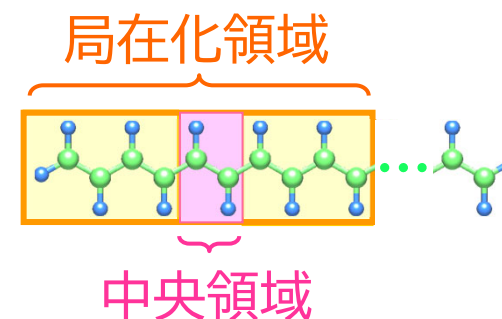
[2] H. Nakai, *Chem. Phys. Lett.* 363, 73 (2002).



分割統治post-HF電子相関計算

■ 相関エネルギー (Nesbetの定理)

$$\Delta E = \sum_{i,j}^{\text{occ}} \sum_{a,b}^{\text{vir}} (ia | jb) [2\tilde{t}_{ia,jb} - \tilde{t}_{ib,ja}]$$



■ 部分系の ΔE を部分系の軌道から計算

$$\Delta E^\alpha = \sum_{i,j}^{\text{occ}(\alpha)} \sum_{a,b}^{\text{vir}(\alpha)} \sum_{\mu \in S(\alpha)} C_{\mu i}^\alpha (\mu a^\alpha | j^\alpha b^\alpha) [2\tilde{t}_{ia,jb}^\alpha - \tilde{t}_{ib,ja}^\alpha]$$

EDA

$S(\alpha)$: 部分系 α の中央領域のAO

➤ MP2の場合: $\tilde{t}_{ia,jb}^\alpha = -\frac{(i^\alpha a^\alpha | j^\alpha b^\alpha)}{\epsilon_a^\alpha + \epsilon_b^\alpha - \epsilon_i^\alpha - \epsilon_j^\alpha}$

➤ 全相関エネルギー = 部分系の相関エネルギーの和

$$\Delta E \approx \sum_{\alpha}^{\text{subsystem}} \Delta E^\alpha$$

DC-MP2法



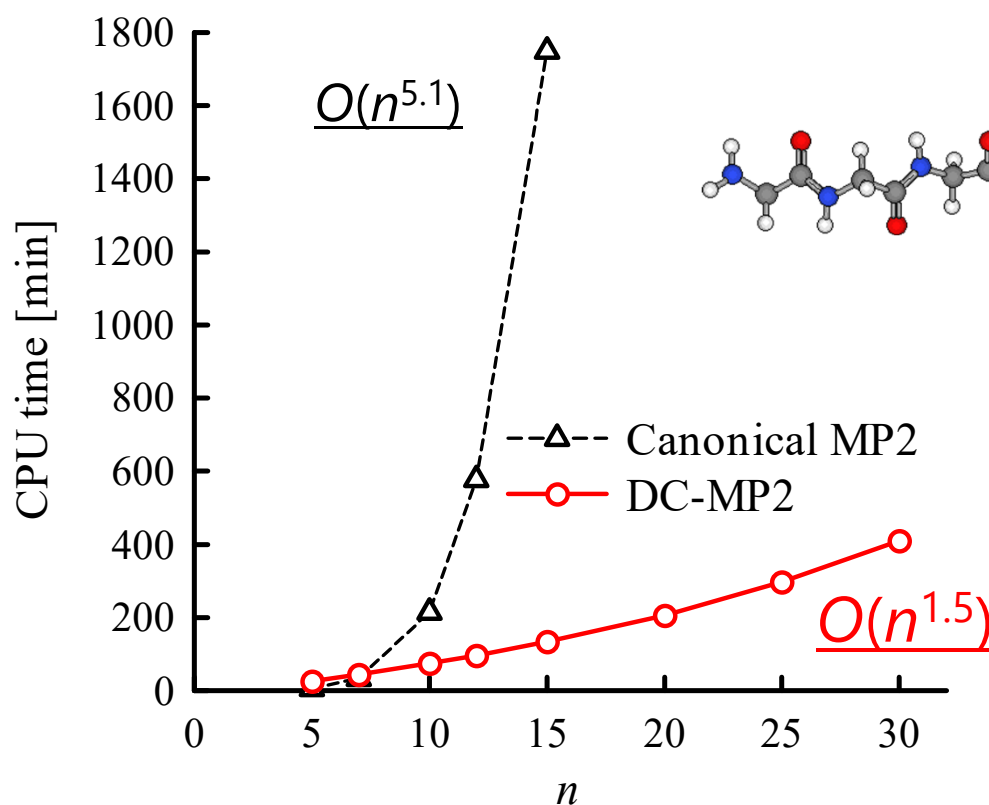
DC-MP2法の計算時間

■ MP2計算にかかる時間^[1]

➤ β ストランドグリシンペプチド (Gly)_n

$r_b = 6.0 \text{ \AA}$
部分系: 1原子
MP2/6-31G

Xeon (Paxville) 2.8 GHz (1CPU)



- ✓ 計算時間: 系の大きさに
対してほぼ線形
- ✓ 必要メモリ量: 系の
大きさにほぼ非依存
(最大部分系の大きさに依存)

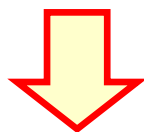
[1] **MK**, Y. Imamura, and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **127**, 074103 (2007).



DC-MP2計算に対するバッファ領域自動決定法

- MP2で取り込まれる動的電子相関エネルギーは、HFエネルギーよりも局所的

➤ SCFよりも小さなバッファ領域を用いてDC電子相関計算を効率化^[1]



- DC-SCF計算で自動決定したバッファ領域の各原子に対して、MP2相関エネルギーへの寄与を算定

➤ AO-Laplace MP2法^[2]の考え方を利用

$$\Delta E_B^{\alpha(2)} = \sum_{\gamma \in \mathcal{S}(\alpha)} \sum_{\delta \in B} \sum_{\mu\nu} |X_{\mu\gamma}^\alpha| |Y_{\delta\nu}^\alpha| A_{\gamma\delta} [2A_{\mu\nu} \max(\mathbf{A})] / \omega_1$$

$$A_{\mu\nu} = |(\mu\nu|\mu\nu)|^{1/2}$$

X, Y: エネルギー重み付き密度行列

[1] **MK** and H. Nakai, *Int. J. Quantum Chem.* **109**, 2227 (2009).

[2] M. Häser, *Theor. Chim. Acta* **87**, 147 (1993);

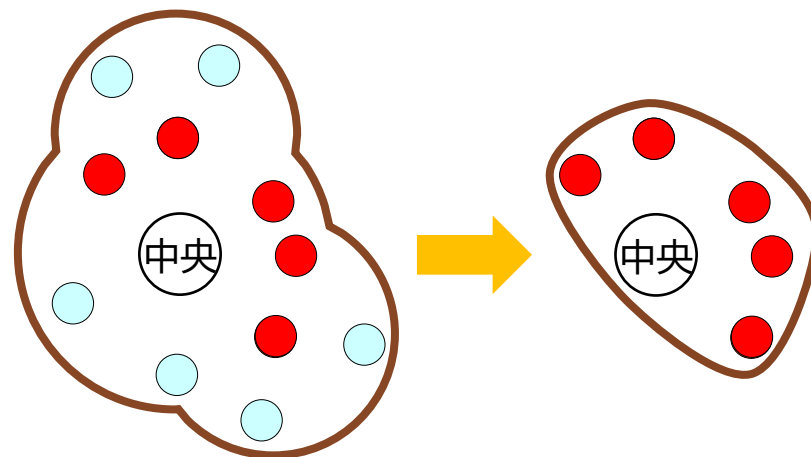
MK and H. Nakai, *Chem. Phys. Lett.* **420**, 250 (2006).



DC-MP2計算に対するバッファ領域自動決定法

■ 自動制御型DC-MP2計算の手続き^[1]

- i. バッファ領域自動制御型DC-HF計算を実行
- ii. バッファ領域に属する各原子の電子相関エネルギーのおよその寄与 $\Delta E_B^{\alpha(2)}$ を算定
- iii. $\Delta E_B^{\alpha(2)}$ が小さい原子をバッファ領域から削除



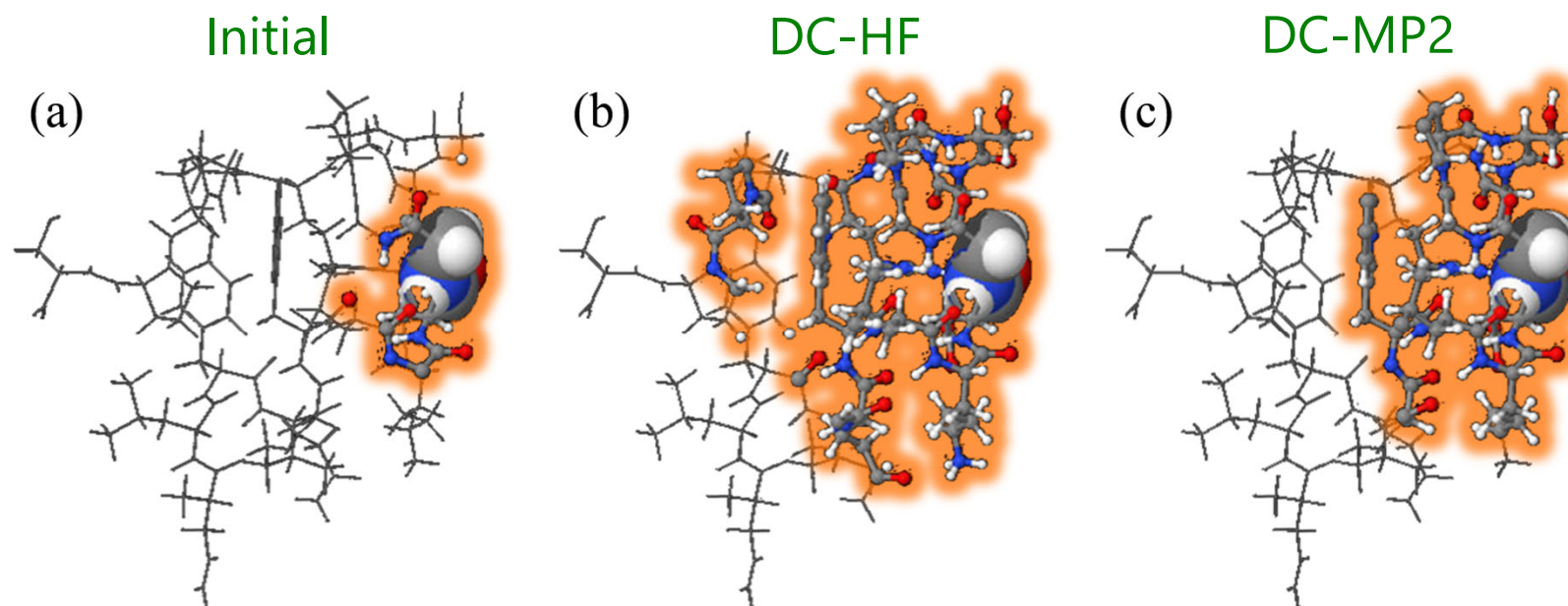
[1] T. Fujimori, **MK**, and T. Taketsugu, *J. Comput. Chem.* **42**, 620 (2021).



バッファ領域拡大の様子

■ 自動制御型DC法によるバッファ領域の変化^[1]

➤ Trp-cageのDC-HF/DC-MP2計算の場合



✓ 異方性を持って拡大

部分系が適切なバッファ領域を選択

[1] **MK**, T. Fujimori, and T. Taketsugu, *J. Comput. Chem. Jpn.* **20**, 48 (2021).

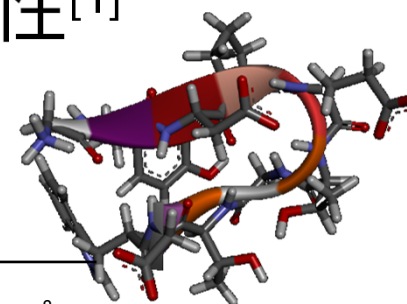


自動制御型DC-MP2計算の精度

■ 自動制御型DC-MP2計算の初期半径依存性^[1]

➤ 系: シニョリン

➤ 計算レベル: MP2/6-31G(d)



$r_b^{\text{in}} / \text{\AA}$	$r_b^{\text{out}} / \text{\AA}$	MP2 Energy $/E_h$	(Diff.) $/\mu E_h \text{ atom}^{-1}$	$\langle l_{\text{local}}^{\text{SCF},\alpha} \rangle$ $/\text{\AA}$	$\langle l_{\text{local}}^{\text{corr},\alpha} \rangle / \text{\AA}$
3.5	4.5	-11.194860	(+0.43)	8.248	7.606
4.0	5.0	-11.194810	(+0.79)	8.121	7.606
4.5	5.5	-11.194825	(+0.68)	8.174	7.582
5.0	6.0	-11.194820	(+0.71)	8.304	7.606
5.5	6.5	-11.194814	(+0.76)	8.151	7.606
Standard		-11.194919			

- ✓ 初期条件によらず、エネルギー誤差を一定に制御
- ✓ HF計算よりも小さい主軸半径を選択

[1] T. Fujimori, **MK**, and T. Taketsugu, *J. Comput. Chem.* **42**, 620 (2021).



Density functional tight binding (DFTB)法^[1]

■ DFTB法: DFTをベースとした半経験的計算法

➤ DFTエネルギー

$$E[\rho] = \sum_i n_i \langle \psi_i | -\frac{1}{2} \nabla^2 + v(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' | \psi_i \rangle + E_{xc}[\rho] + \sum_{A < B}^N \frac{Z_A Z_B}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|}$$

↓ Tight binding近似: $\rho = \rho_0 + \delta\rho$

↓ 交換相関項に対して2次のTaylor展開: $E_{xc}[\rho_0 + \delta\rho]$

↓ 密度に依存する項に対してモノポール近似: $\delta\rho_A \approx \Delta q_A F_{00} Y_{00}$

➤ DFTBエネルギー

DFT計算から決定するパラメータ

Mulliken charge

$$E_2^{\text{TB}} = \sum_i \langle \psi_i | \hat{H}_0 | \phi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{A,B} \Delta q_A \Delta q_B \gamma_{AB} + \sum_{A < B} E_{\text{rep}}(\mathbf{R}_{AB})$$

Charge independent Charge dependent Repulsive energy

2電子積分不要!

- Hamiltonian行列 $H_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}^0 + S_{\mu\nu} \sum_C \frac{1}{2} (\gamma_{AC} + \gamma_{BC}) \Delta Q_C \quad (\mu \in A, \nu \in B)$
- Mulliken電荷を自己無撞着に決定 (SCC)

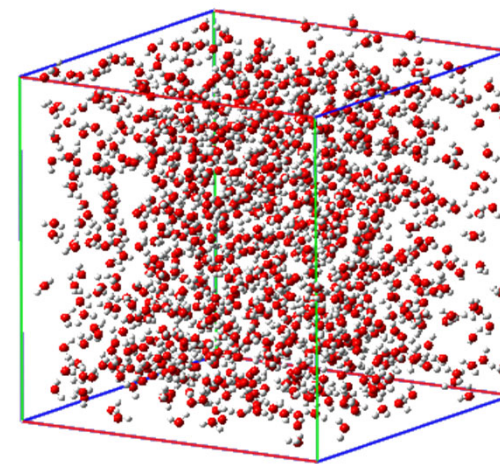
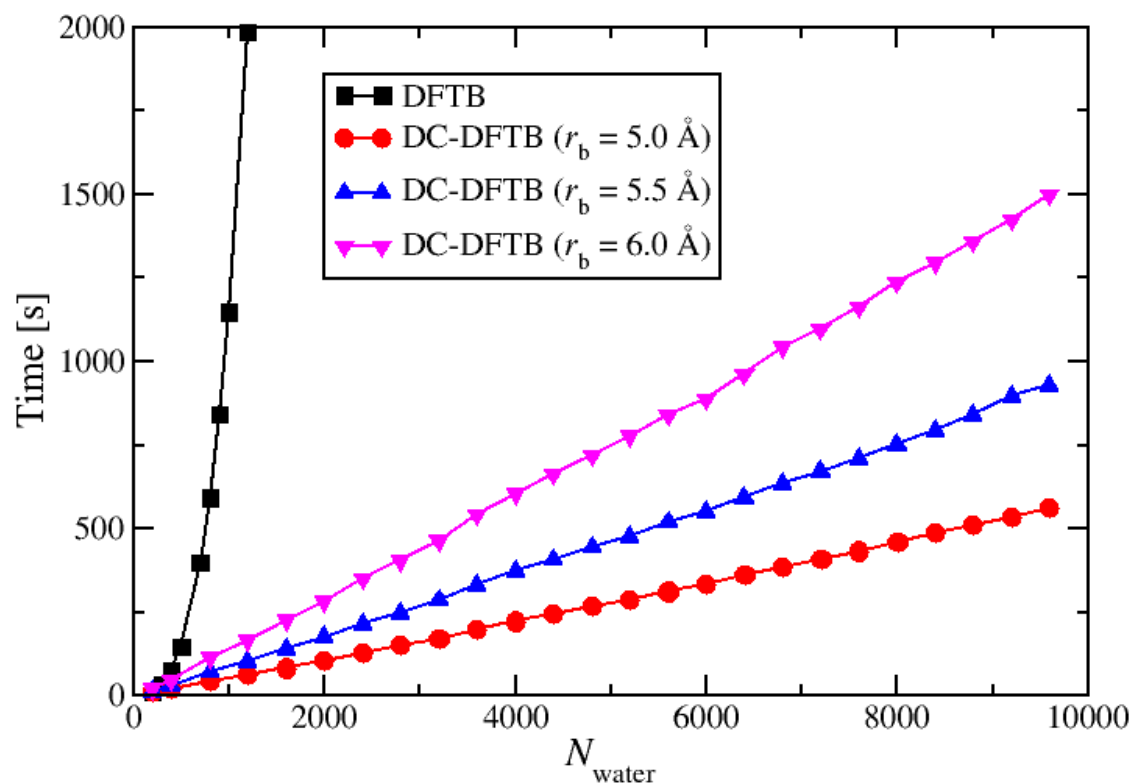
[1] D. Porezag, Th. Frauenheim, Th. Köhler, G. Seifert, and R. Kaschner, *Phys. Rev. B* **51**, 12947 (1995).



DC-DFTB計算のパフォーマンス

■ 計算時間のサイズ依存性^[1]

- 水 N_{water} 分子系
- 計算機: Intel Xeon **1ノード** (8コア)



- ✓ 1ノードでも十分に高速
(水2000分子が3分)
- ✓ 高並列化も達成

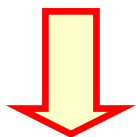
[1] H. Nishizawa, Y. Nishimura, **MK**, S. Irle, and H. Nakai, *J. Comput. Chem.* **37**, 1983 (2016).



量子化学計算と解析法

■ 量子化学計算で得られる結果

- **エネルギー**: 系全体で単一の量
 - 応答量(微分)もコストをかければ計算可
双極子モーメント、勾配、分極率...
- **波動関数**: 大きな系になるほど複雑化



■ 理解・予測・記述子開拓のためには**解析法**が重要

- 特に**ローカル(原子・残基・結合・成分)な量**への射影
 - 電子密度解析
 - **エネルギー解析**



大規模量子化学計算と解析法

■ フラグメント分割型大規模量子化学計算法

フラグメントに基づくローカルな量の算定が容易

➤ フラグメント分子軌道(FMO)法

- IFIE: フラグメント間相互作用エネルギー解析
- PIEDA: IFIE + 諸態エネルギー分解

➤ DC法

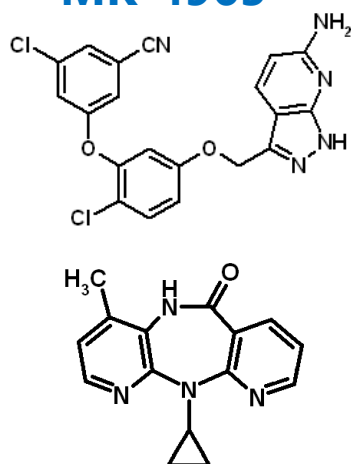
- 部分系エネルギー解析
 - ✓ 部分系の密度行列から部分系のエネルギーを算出
- 電子相関エネルギー: 部分系に対してadditiveな表式



HIV-1逆転写酵素(RT)

- ウィルスの一本鎖RNAを鋳型として二本鎖のプロウィルスDNAを合成する酵素(HIVの増殖に不可欠)
- 非核酸系逆転写酵素阻害剤(NNRTIs)
 - 低濃度で高選択的にHIV-1と結合
 - **MK-4965**: 野生(WT)および主要変異ウィルスに対して高い阻害活性を示す新奇NNRTI

MK-4965

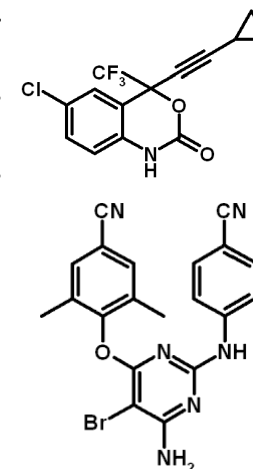


Nevirapine

WTおよび変異HIV-1 RTに対する阻害活性^[1]

Compound	IC ₅₀ (nM)		
	WT	K103N	Y181C
MK-4965	0.23 ± 0.09	0.40 ± 0.15	0.39 ± 0.16
Nevirapine	137 ± 5.8	9300 ± 500	8900 ± 1800
Efavirenz	0.42 ± 0.06	10.2 ± 6.6	0.31 ± 0.17
Etravirine	0.60 ± 0.12	1.3 ± 0.17	1.96 ± 0.9

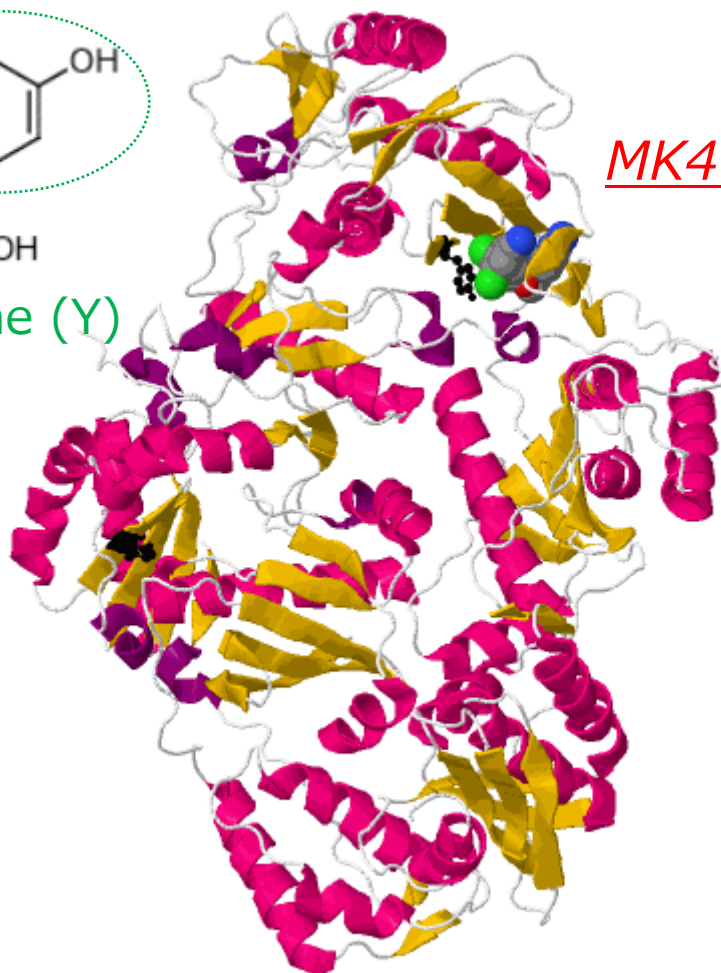
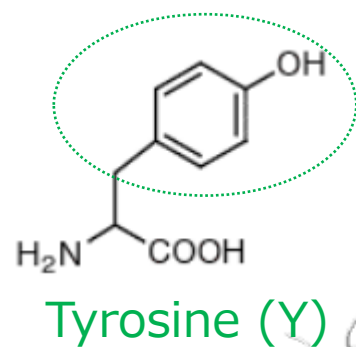
Efavirenz



Etravirine

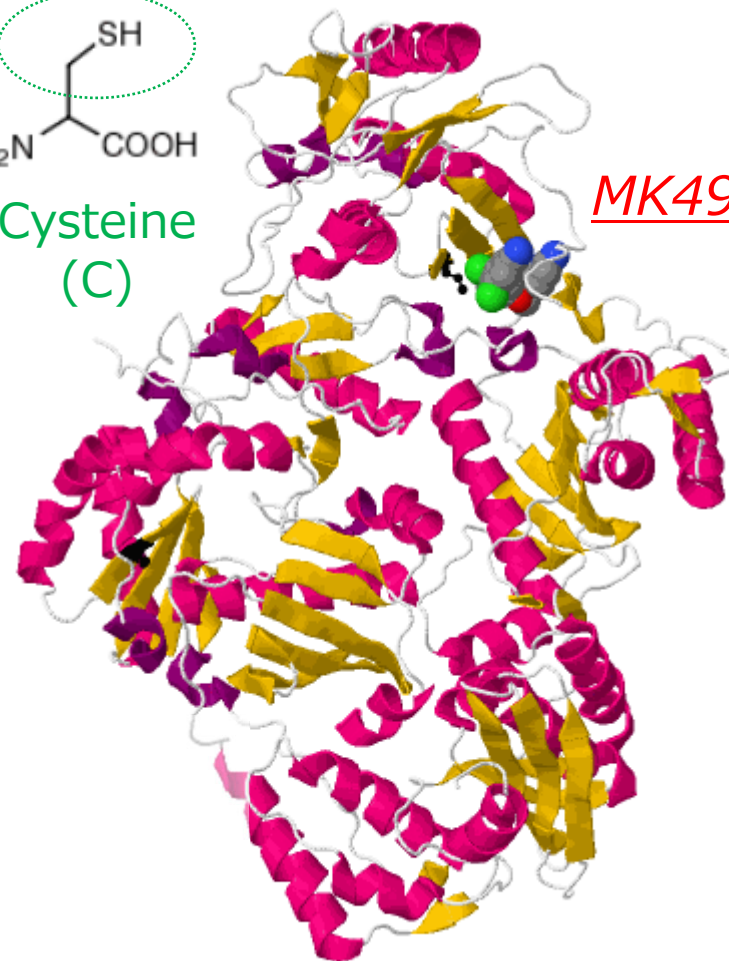
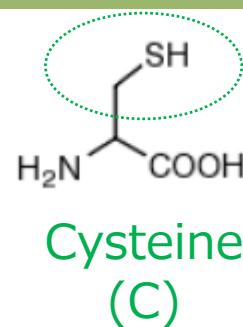


HIV-1 RTとMK-4965の複合体



野生型 (WT)

MK4965



Y181C

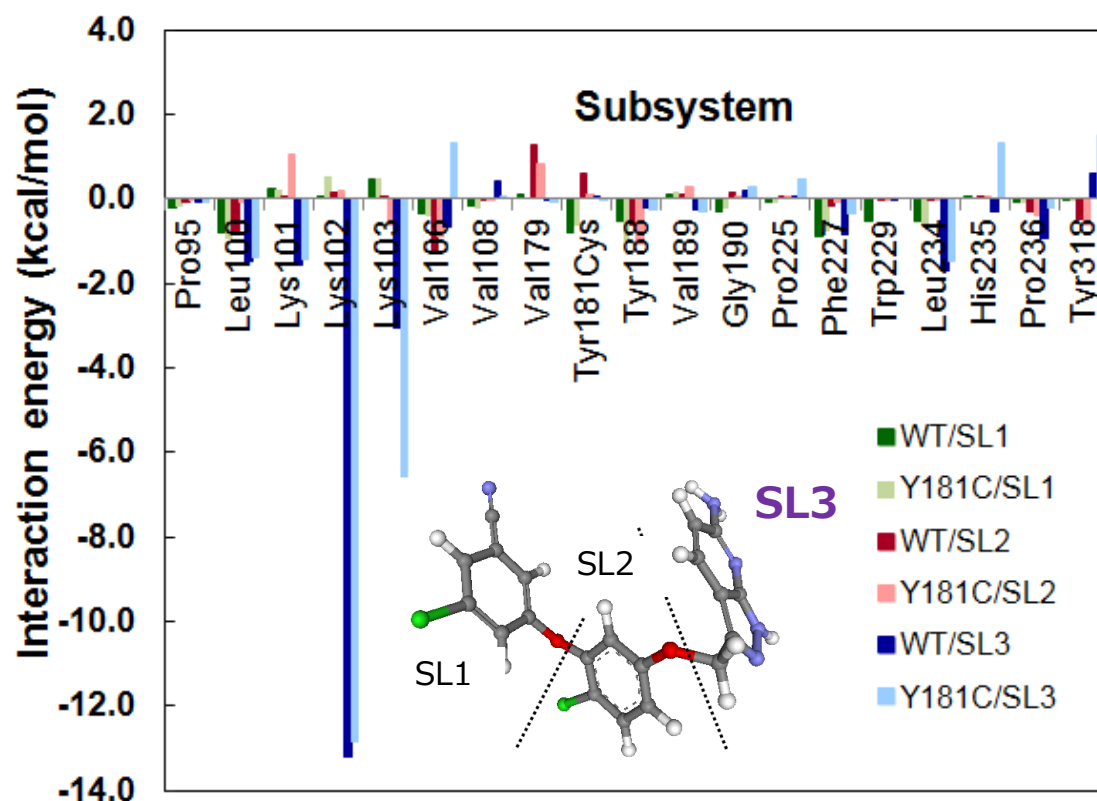
MK4965



DC計算によるMK-4965の相互作用解析

■ HIV-1 RT (WT/Y181C)とMK-4965の間にはたらく相互作用エネルギー

➤ 相互作用エネルギー: $E_{\text{int}} = E_{\text{complex}} - E_{\text{AA}} - E_{\text{MK-4965}}$



✓ Tyr/Cys181との相互作用は小

✓ Lys102及びLys103とSL3の間に大きな相互作用

データを高次元化して解析

本日の講演内容

■ イントロダクション

- 量子化学計算とは
- なぜ大規模系を計算したいのか？

■ 分割統治(Divide-and-Conquer)法

- DC法とその他の大規模量子化学計算法
- DC法の理論とバッファ領域の自動決定
- (DC法の応用)

■ 量子計算・新概念計算による量子化学計算

- Annealing + Bayesian-optimization CI (ABCI)法

■ まとめ



量子化学計算のジレンマと近似計算法

■ 量子化学計算のジレンマ

ディラック(1929)^[1]

『化学を支配する法則は完全にわかった。しかし、
複雑すぎて解けない方程式に行き着くのが問題だ』



➤ 解くべき方程式: Full CI (完全にわかっている)

$$|\Psi\rangle = \sum c_{n_1 n_2 \dots n_M} |n_1 n_2 \dots n_M\rangle$$

- $|n_1 n_2 \dots n_M\rangle$: 電子配置【 $n_i=1$ (占有) or 0(非占有)】
✓ $\sum n_i = N_e$

➤ 古典計算機を利用した計算: $O(N_e!)$

量子コンピュータや新概念計算機を
利用して解く！

[1] P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A **123**, 714 (1929).



XBK変換法^[1,2]

■ CIハミルトニアンをQUBOハミルトニアンに変換

➤ 第二量子化ハミルトニアン:

$$H = \sum_{ij} h_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l$$

➤ スピンハミルトニアンに変換(Jordan-Wigner or Bravyi-Kitaev)

➤ r 個のレプリカを使うことで、 σ_z だけのハミルトニアンに変換

$$H = \sum_{I=1}^M \sum_{i=1}^r h^{Ii} \sigma_z^{Ii} + \sum_{I,J=1}^M \sum_{i,j=1}^r h^{IiJj} \sigma_z^{Ii} \sigma_z^{Jj} + \sum_{I,J,K=1}^M \sum_{i,j,k=1}^r h^{IiJjKk} \sigma_z^{Ii} \sigma_z^{Jj} \sigma_z^{Kk} + \dots$$

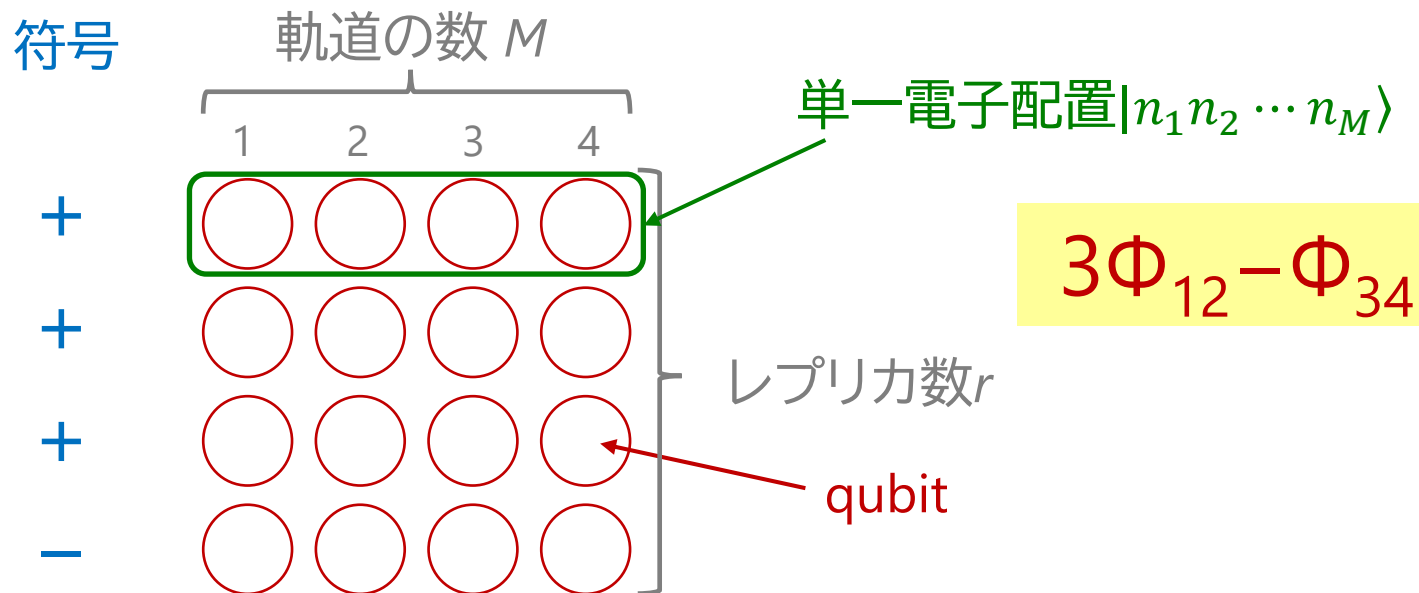
➤ 2次化 → QUBO

[1] R. Xia, T. Bian, and S. Kais, *J. Phys. Chem. B* **122**, 3384 (2018).

[2] M. Streif, F. Neukart, and M. Leib, *Lect. Notes Comput. Sci.* **111**, 11413 (2019).



■ CIハミルトニアン→QUBOハミルトニアン



全通りで試行 アニーリング計算で決定

➤ CI係数が大きい電子配置と小さい電子配置が混在

レプリカ数 $r \rightarrow$ 大

[1] R. Xia, T. Bian, and S. Kais, *J. Phys. Chem. B* **122**, 3384 (2018).

[2] M. Streif, F. Neukart, and M. Leib, *Lect. Notes Comput. Sci.* **111**, 11413 (2019).



ABCI(Annealing + Bayesian-opt. CI)法

■ 各電子配置に重みビットを付加



波動関数の自由度が拡大

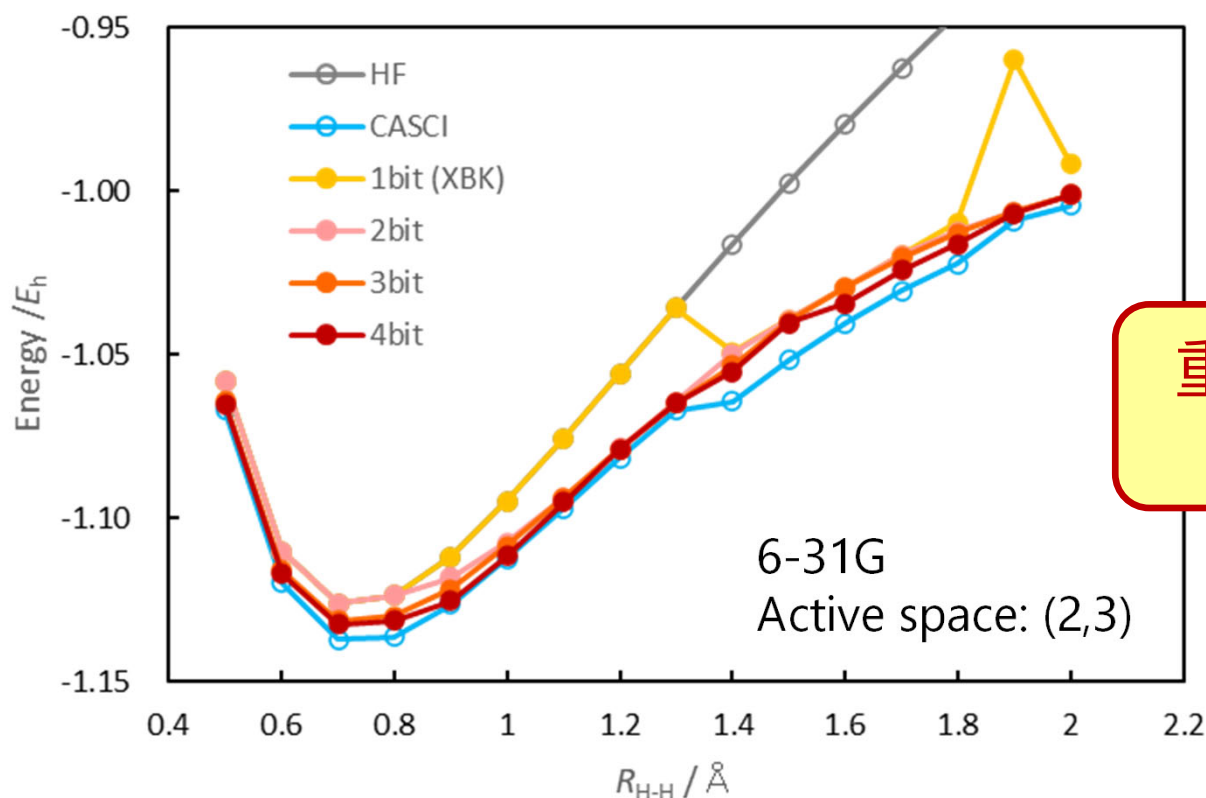
重みビットの組み合わせをベイズ最適化で決定



H₂のポテンシャルエネルギー曲線

■ 重みビット数を変化させたときのPECの変化

- レプリカ数: $r=4$ (固定=qubit数変化なし)
- 重みビット数: 1 (XBK法と同じ), 2, 3, 4



重みビット数増加
→精度向上



量子計算技術と大規模計算

■ 量子計算・新概念計算

- 複雑な電子状態を計算するポテンシャル
- 当面はqubit数に制限



困難は分割せよ

分割統治(DC)法のような
分割型計算との融合が必須



まとめ:量子化学計算の大規模系への展開

- 大規模系の量子化学計算を実現する
分割統治(DC)法を開発
 - バッファ領域を用いて全系を重なりながら分割
 - バッファ領域を自動決定する方法も開発
 - 電子相関計算(MP2, CCSD, CCSD(T))にも対応
 - DFTB法やxTB法と組み合わせた超大規模計算
- データ科学nativeの時代・量子計算の時代に向けて
 - 大規模計算からのデータ抽出が重要
 - 構造分類の自動化、相互作用解析
 - 量子計算機による量子化学計算にもDC法が必要



共同研究者と謝辞

■ 北海道大学

- 武次 徹也 先生
- 赤間 知子 先生
- 藤森 俊和 博士
- 田代 啓介 君
- 能條 小夜子 さん
- 米山 亮 君
- 藤原 孝太郎 君



■ 早稲田大学

- 中井 浩巳 先生
- P. Saparpakorn 先生 (Kasetsart大)
- 吉川 武司 先生 (東邦大)
- ほか、両研究室のみなさま

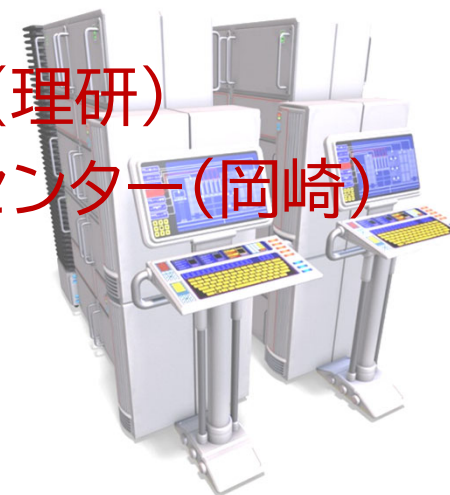
■ 研究費

- JSTさきがけ
- 京都大学ESICB
- 科研費
- ポスト京 重点課題5



■ 計算機

- 京コンピュータ(理研)
- 計算科学研究センター(岡崎)
- 九州大学



ご清聴ありがとうございました

