


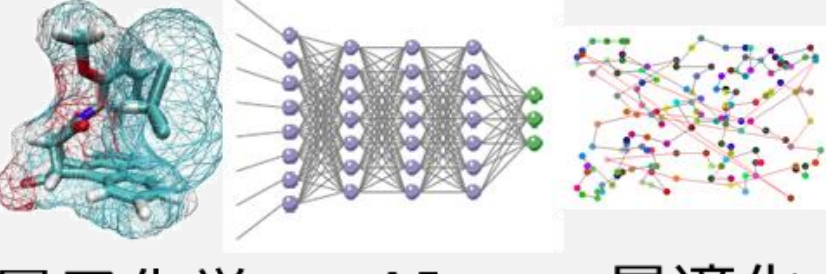
IBM Q Hub 化学チームの活動紹介

概要

慶應義塾大学は2018年5月にIBMの量子コンピュータを使いつつ、産学共同で実用問題を研究する「IBM Q Hub」をオープンした。JSRと三菱ケミカルは、Q Hubに参画し、IBMや慶應義塾大学の研究者たちと共同で量子コンピュータの化学分野への応用研究を開始した。本ポスターではQ Hubでの化学チームの活動内容を紹介します。

背景

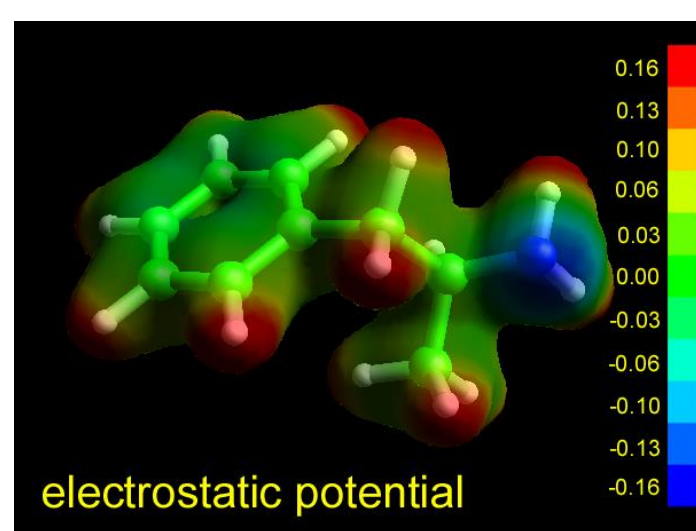
- 量子コンピュータの開発状況
 - ハード：現状は小規模(65量子ビット)で実験機の位置づけ
2023年には1000量子ビットを超える見込み
 - ソフト：量子化学・AI・最適化を中心にソフトウェアを開発
- Q Hubへの期待
 - 最先端のアルゴリズムを実用レベルまでに発展させる
 - 材料開発への応用を検討し、道筋を定める

Qubit	計算	応用分野
 0でも1でもある “重ね合わせ状態”	n 個Qubit $\rightarrow 2^n$ 並列計算 全ての“重ね合わせ状態” を同時に利用する	 量子化学 AI 最適化

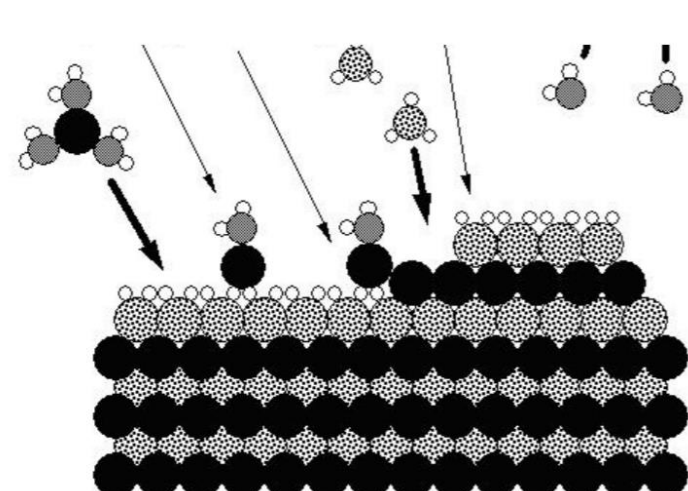
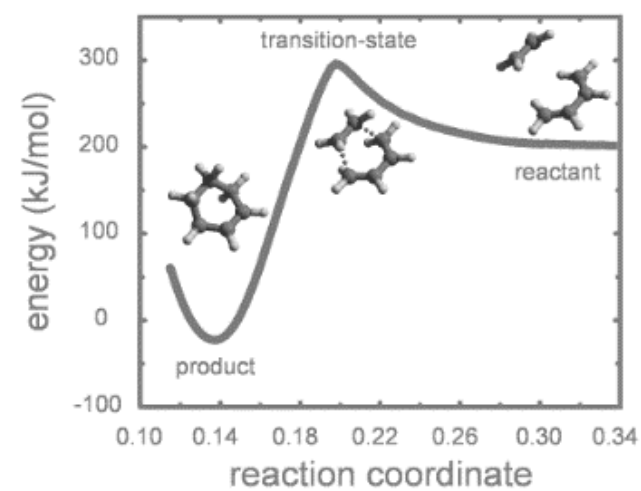
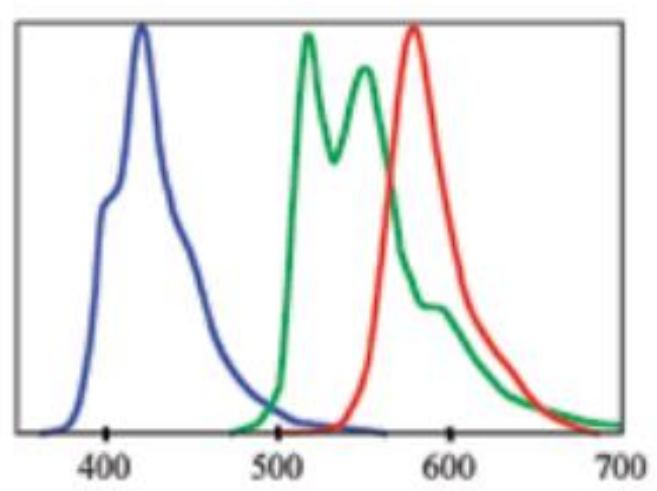
Quantum Computation for Quantum Chemistry

● 量子化学シミュレーション

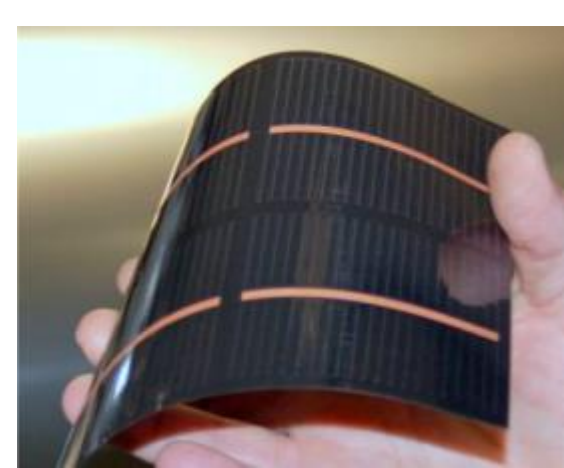
- 量子化学計算



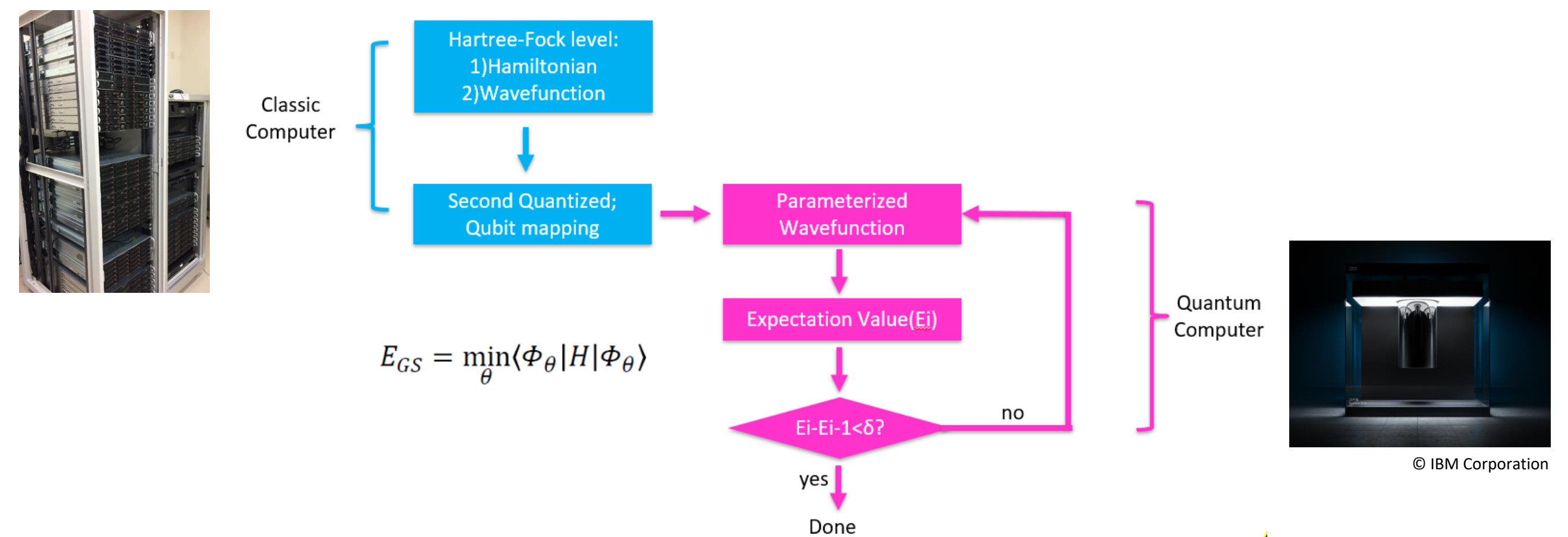
- 解析



- 製品開発

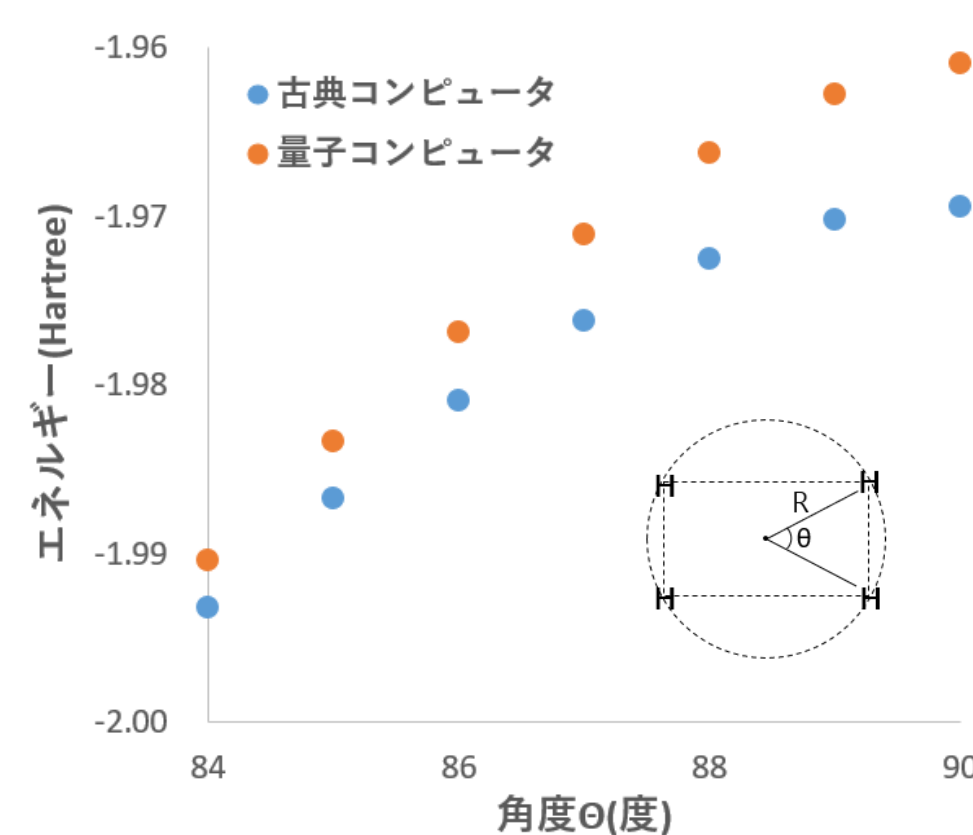


● 量子コンピュータで量子化学計算

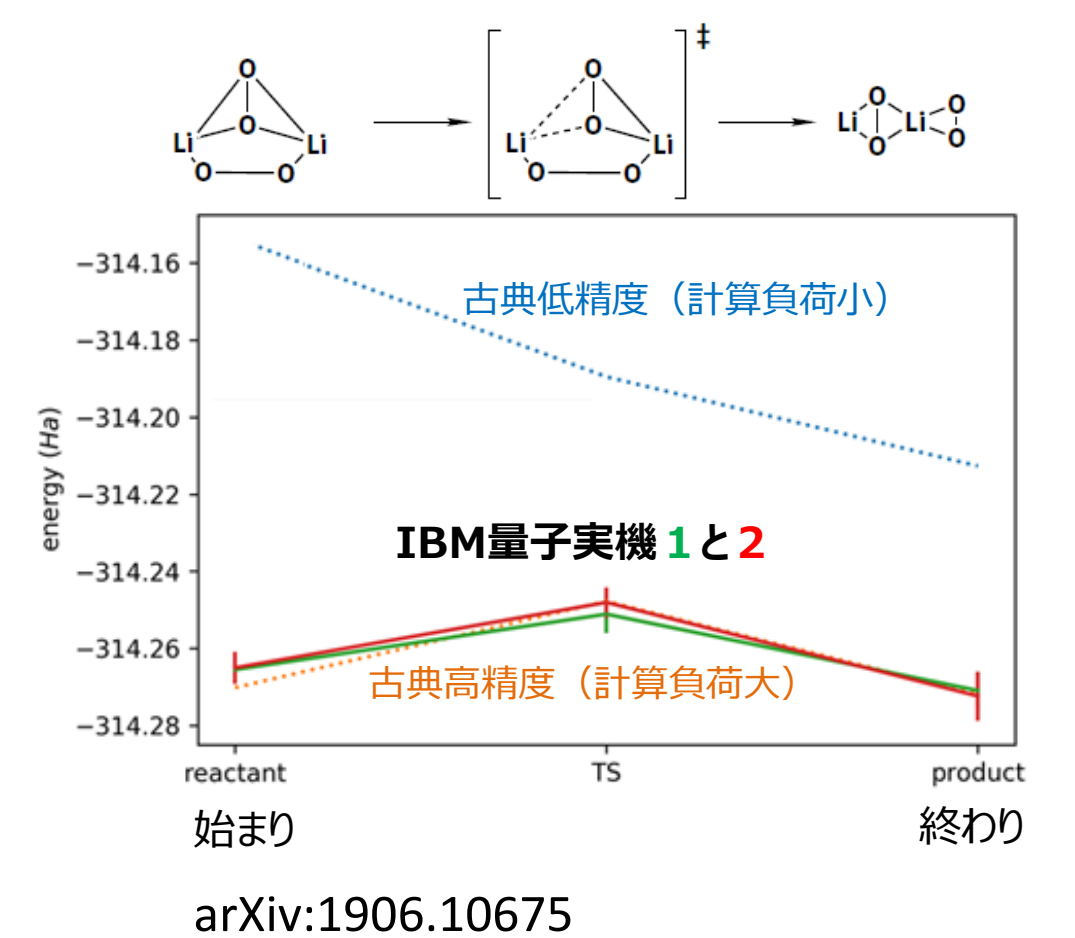


● Q Hubでの検証結果

- H₂ 二分子の電子状態



- リチウム空気電池の反応



Quantum Artificial Intelligence

● 量子加速による機械学習の応用研究

慶應義塾大学、企業メンバー

慶應義塾大学、IBM、
企業メンバー

企業メンバー

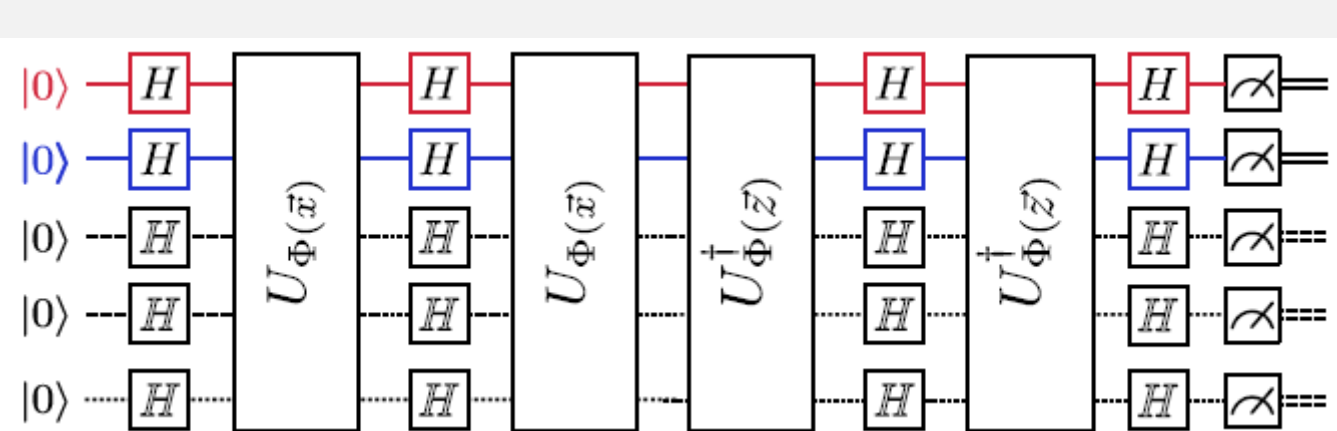
データ整理

モデル開発

材料探索

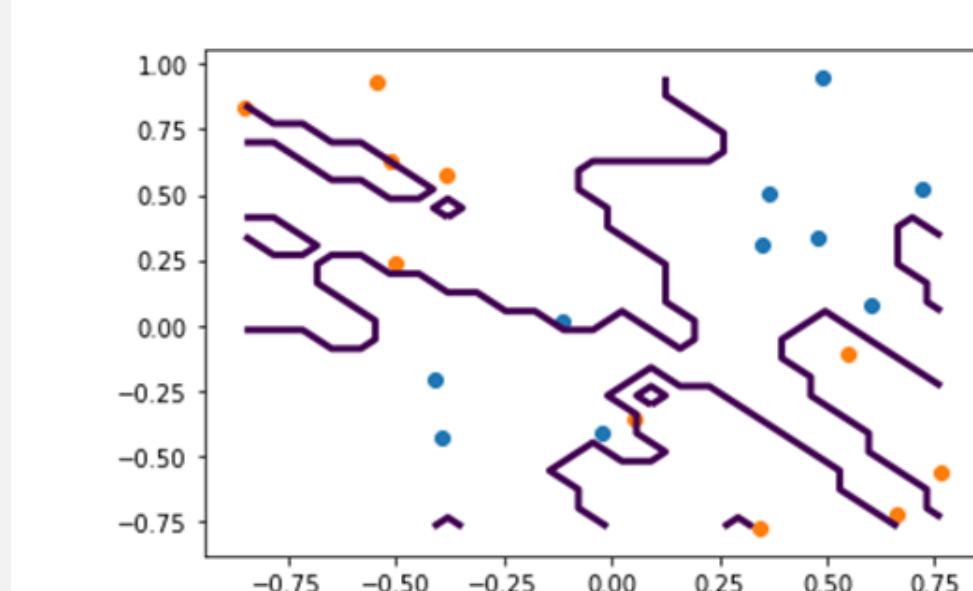
● Q Hubでの検討結果

- Quantum Kernel Estimator

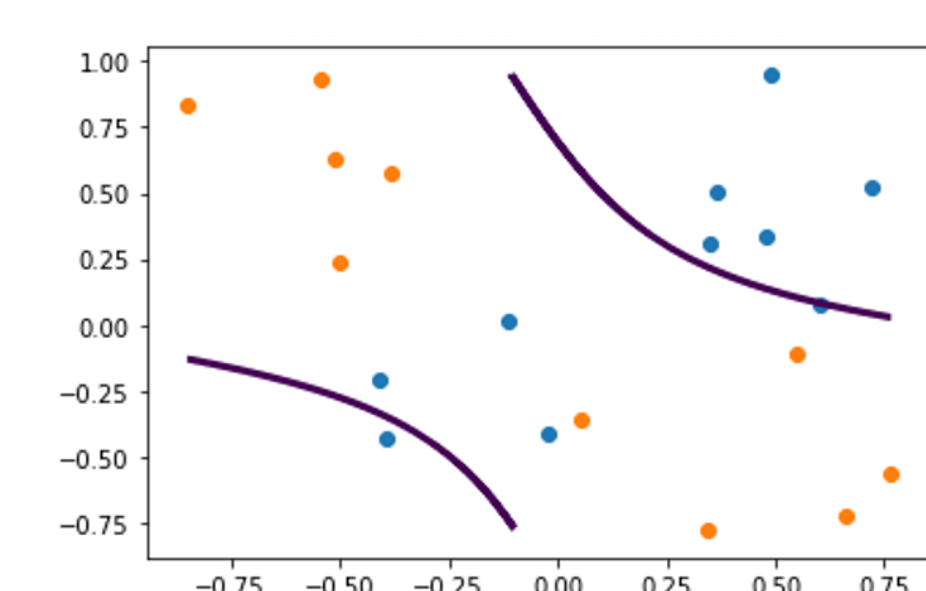


arXiv:1804.11326

量子コンピュータ：正解率0.8



古典コンピュータ：正解率0.8



まとめ

● 化学分野での活用に備えて

- Quantum Chemistry
 1. 計算アルゴリズムの学習
 2. IBMQのプログラミング活用方法の習得
 3. 解決すべき問題の探索：複雑系の電子状態、化学反応
- Quantum AI
 1. 量子加速が期待されるアルゴリズムの習得
 2. 量子機械学習のモデル開発
 3. 実課題解決への取り組み：データ分類