
1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

将来の量子コンピューティングへの期待が高まっている。しかしながら、長期的には高エラー耐性のための材料、デバイス構造などの探索が必要であり、またアルゴリズムやエラー訂正技術開発のための大規模な量子回路シミュレーションも必要である。本利用ではそれらのシミュレーションを実施する。

2) 利用意義(産業利用の観点から)

各国の量子コンピュータの実現に向けた競争が激しさを増している。一方で、まだ多くの中・長期の課題があり、その実現は数10年先となるものと考えられている。このような状況の中、材料・デバイス構造探索のための第一原理計算や大規模な量子回路シミュレーションに必要な計算機リソースを社内で利用することは非常に困難である。

3) スーパーコンピューターを利用する必要

第一原理シミュレーションによる原子スケールからの材料探索では、多様で複雑な原子配置を取り扱う必要があり、その場合の数は数万にも及ぶ場合がある。また、第一原理計算手法を用いる高精度なデバイスシミュレーションでは、数00から数1000原子を取り扱う必要があり、これらには数0ノードの計算機の利用が必要となる。

2. 成果の概要

1) 本利用で得られた成果(成果が得られなかった場合はその理由)

※内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

(1. 計算科学、2. コンピュータ・サイエンス、3. プログラムチューニング、4. その他)

a

1. 計算科学

Type I・サブシステムを用い、本利用の主たる目的のひとつである第一原理デバイスシミュレーションを実施した。具体的には、トポロジカル材料および周辺材料からなるデバイス構造を仮定し、第一原理計算に基づく非平衡グリーン関数法により伝導特性を予測した。計算の高速性、大規模なノード数の利用クラスでも長時間の計算が可能であることから、比較的容易に計算が収束可能であることを確認した。一方で、非常に大きなメモリが必要な計算であり、[ノード当たりのコア数を小さくする必要があった。

量子回路シミュレーションについては、プログラム開発からはじめ、1量子ビットを用いたエラー訂正シミュレーションまでが高速に実施可能であることを確認した。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

c

有力な高エラー耐性コンピュータ向けの材料やそのデバイス構造、または有力なエラー訂正手法を見出すことができれば、将来の量子コンピュータ分野において優位な立場を得ることが可能である。

3) その他の成果
