

MERIT インターンシップ（国内）報告書

工学系研究科 電気系工学専攻 岩本研究室

博士課程3年 MERIT 7期生

山口 拓人

1. インターンシップ概要

- ・ 実施期間
2021年9月13日から2021年10月14日（1ヶ月間）
- ・ 受入れ先
富士通株式会社 富士通研究所 量子コンピューティング研究センター
- ・ 研究課題名
VQE シミュレータを用いた分子の量子化学計算に関する検討

2. 研究背景・業務内容

量子コンピュータは多様な状態を量子ビットとして扱えるため、従来の古典コンピュータと比較して複雑な計算をより高速に実行できる可能性が指摘されている。現在はエラー訂正を行わない小中規模の量子コンピュータ（NISQ; Noisy Intermediate-Scale Quantum device）の実用化に向けた取り組みが主になされており、その応用先の一つとして原子や分子のエネルギーを導出する量子化学計算が注目されている[1]。NISQ デバイス上で動作する量子化学計算アルゴリズムとしては VQE（Variational Quantum Eigensolver）が代表的であるが、分子の規模が大きくなるにつれて計算に必要な量子ビット数が増大するため、計算時間や計算精度を改善するための検討が求められている。

今回のインターンシップではまず Python ベースの VQE シミュレータを用いて H_2 分子の量子化学計算を行い、計算条件の違いがもたらす計算時間および精度への影響について検討を行った。そこで得られた知見をもとに、より複雑な CH_4 分子の量子化学計算にも取り組み、最適な計算条件の探索や計算アルゴリズムの改良検討を実施した。

[1] Sam McArdle, Suguru Endo, Alán Aspuru-Guzik, Simon C. Benjamin, and Xiao Yuan, “Quantum computational chemistry,” *Rev. Mod. Phys.* **92**, 015003 (2020).

3. 進行方法

本インターンシップは全て Microsoft Teams のオンライン会議および電子メールでのやり取りを通して実施された。インターンシップ期間中は毎朝9時より30分～1時間程度にて進捗報告を行い、前日得られた結果に関する議論や当日の業務内容についての打合せを行った。その後実習を開始し、午後には当日の進捗

度合いの確認や質疑・雑談の場として適宜 Coffee Break の時間（30 分程度）を設けて頂いた。実習は毎日 8 時間程度にわたって行い、途中の 10 月 4 日には研究センターの研究員の方々と技術交流会として、大学院での研究内容について紹介する機会を頂いた。インターンシップ最終日には富士通研究所量子コンピューティング研究センター内の報告会にて成果報告を行った。

4. 所感

量子コンピュータに関する知識は嶋田義皓先生（科学技術振興機構）の MERIT 特別講義などを通して大局的な理解にとどまっていたが、今回のインターンシップではその応用先として期待されている量子化学計算について実際に取り組むことで量子コンピュータの長所と短所を肌で感じる事が出来ました。物理系の私にとって量子化学は初めて触れる研究分野であったため、インターンシップ開始前はやや不安に感じていましたが、量子力学との接続を把握することによって理解をスムーズに進められたと思います。

業務中にはコーディングや計算結果の解釈等で躓くことも何度かありましたが、担当者の方々による数多くのご助言と親切なご指導を頂き解決の糸口を見つけることが出来ました。Python は自らの研究でも作業の効率化等のために使う機会が多いのですが、今後にも活かせるような内容を業務の中で習得することが出来ました。今回取り組めた検討事項は膨大にありながらもインターンシップ期間は有限であったため、最終的にはやや消化不良で終わってしまった箇所もありますが、事前に予定していた内容については一通り取り組めたと思います。

惜しくも今回は完全にオンラインでの実施となりましたが、時には雑談などを交えつつも実際に対面している環境さながらに毎日議論させていただきました。とてもフレンドリーに受け入れて下さったので、充実したインターンシップ期間を過ごせたと思います。特に企業の研究所について以前から興味を持っていた私にとって、その雰囲気や環境を知る上でとても良い機会になりました。

5. 謝辞

新型コロナウイルス感染症の厳しい感染状況の下、本インターンシップを受け入れて下さった富士通研究所に感謝申し上げます。特に実習内容について直接ご指導ご鞭撻下さいました同研究所量子コンピューティング研究センターの大島弘敬様、高橋憲彦様、および同研究センターのセンター長を務めておられる佐藤信太郎様には貴重なお時間を割いて頂き、深く御礼申し上げます。また、初日のオリエンテーションでは、同研究所研究マネジメントセンター人事部の方々にもお世話になりました。インターンシップの技術交流会や成果報告会では量子コンピューティング研究センターの関係者の方々にもご参加いただき、議論を深める機会を設けて頂きました。1 ヶ月という短い期間ではありましたが、皆様大変ありがとうございました。

最後に、インターンシップの実施に際し、指導教官の岩本敏教授、MERIT 副指導教官の小形正男教授には本インターンシップへの参加をご快諾いただきました。本インターンシップの実施を承認していただいた東京大学 MERIT プログラムおよび事務局の方々にも感謝を申し上げます。