



Verbundprojekt MANIQU

Industrieller Einsatz von NISQ Quantencomputern in der Materialentwicklung

Motivation

Die Eigenschaften stark korrelierter Elektronensysteme, wie z. B. Übergangsmetallhaltiger Oxide, können auf konventionellen Hochleistungsrechnern nicht mit hinreichender Genauigkeit berechnet werden. Auf einem Quantencomputer hingegen können fundamental neue Methoden verwendet werden, die eine hochgenaue Simulation erlauben. Derartige Simulationen können die Entwicklungsprozesse neuer Materialien revolutionär beschleunigen. Allerdings muss davon ausgegangen werden, dass in den kommenden Jahren ausschließlich „noisy intermediate scale“ Quantencomputer (NISQ) ohne Fehlerkorrektur und mit moderater Anzahl von Qubits (~100) zur Verfügung stehen. Dennoch ist bereits auf diesen NISQ Quantencomputern im Bereich der Materialsimulation und Quantenchemie ein signifikanter Vorteil hinsichtlich Geschwindigkeit und Genauigkeit gegenüber konventionellen Hochleistungsrechnern zu erwarten.

Ziele und Vorgehen

Ziel des Verbundvorhabens ist die Entwicklung von hocheffizienten Algorithmen und Workflows, welche den industriellen Einsatz von NISQ Quantencomputern im Bereich der Materialentwicklung und Quantenchemie ermöglichen und diese in Form von Softwarepaketen umzusetzen. Aufgrund der Fehleranfälligkeit aktueller NISQ Quantencomputer wird der Fokus des Projekts auf die Implementierung von sogenannten hybriden Algorithmen gelegt. Hier werden Quanten- und klassische Computer in einem engen Zusammenspiel eingesetzt, um die beschränkten Ressourcen und Fähigkeiten zeitnaher Quantencomputer optimal zu nutzen.

Innovation und Perspektiven

Sobald geeignete NISQ Quantencomputer zur Verfügung stehen, können mit den hier entwickelten hochgenauen Simulationsmethoden sowohl neuartige, hochgradig industrierelevante, Übergangsmetallhaltige Materialien entwickelt, als auch assoziierte chemische Prozesse verständnisbasiert optimiert werden, so dass ein signifikanter Wettbewerbsvorteil für zukünftige Hightech-Produkte „Made in Germany“ entsteht.

Projekttitel:

Effiziente Materialsimulation auf NISQ-Quantencomputern (MANIQU)

Programm:

Quantentechnologien – von den Grundlagen zum Markt

Fördermaßnahme:

Quanteninformatik – Algorithmen, Software, Anwendungen

Projektvolumen:

3,4 Mio. Euro (zu 62,7 % durch das BMBF gefördert)

Projektlaufzeit:

01.03.2021 – 29.02.2024

Projektpartner:

- Robert Bosch GmbH, Renningen
- BASF SE, Ludwigshafen am Rhein
- HQS Quantum Simulations GmbH, Karlsruhe
- Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen
- Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf – Quantum Technology, Düsseldorf

Projektkoordination:

Robert Bosch GmbH
Dr. Thomas Eckl
E-Mail: thomas.eckl@de.bosch.com