

HQS Quantum Simulations liefert Simulationssoftware an DLR Institut

Karlsruhe; 05.12.2023: Die HQS Quantum Simulations GmbH ist stolz, die Auslieferung eines spezialisierten Softwarepakets zur Quantensimulation an das DLR Institut bekannt zu geben. Der Auftrag erfolgte im Rahmen der DLR Quantencomputing-Initiative. Insbesondere ist die Simulation von Materialeigenschaften und die Analyse der Materialdynamik auf Quantencomputern für die Industrie von großem Interesse. Dazu ist die Entwicklung maßgeschneiderter Kompilierungsstrategien und Quantenalgorithmen im Hardware-Software-Co-Design für aktuelle Quantencomputer der NISQ-Ära erforderlich. Die erfolgreiche Zusammenarbeit bei dieser Herausforderung bedeutet hinsichtlich des Nutzens von Quantentechnologie einen großen Fortschritt für industrielle Endanwender.

Im Zuge eines öffentlichen Ausschreibungsverfahrens im Rahmen der DLR Quantencomputing Initiative hat HQS Quantum Simulations dieses Jahr die Zuschläge für einige Projekte innerhalb der Anwendungsprojekte ALQU (Algorithmen für Quantencomputer-Entwicklung im Hardware-Software-Codesign) und BASIQ (Batteriematerial-Simulation mit Quantencomputern) erhalten. Anfang November erfolgte die erste Lieferung von HQS Software ans DLR.

Projekt BASIQ: Quantum Chemistry | NOISE

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung von Materialsimulationen für gatterbasierte Quantencomputer im Hinblick auf Batteriematerialien. Dazu stellt HQS insbesondere die Softwaretools HQS Spin Mapper und HQS Noise App zur Verfügung. Die HQS Noise App simuliert offene Quantensysteme und integriert das Rauschen von NISQ-Geräten in die Simulation. Sie ermöglicht hochpräzise Berechnungen von Materialeigenschaften über den Grundzustand hinaus. Der HQS Spin Mapper schafft die Grundlage für genaue und schnelle Quantensimulationen, zum Beispiel für die Simulation von Batteriematerialien und chemischen Prozessen auf atomistischer Ebene geht. HQS Spin Mapper identifiziert die Spin-Freiheitsgrade in Festkörpern und Molekülen, ermöglicht das Mapping auf Spin-Systeme und unterstützt Spin-basierte Simulationen für die detaillierte Erforschung quantenmechanischer Eigenschaften.

Die von HQS bereitgestellten Quanten-Algorithmen werden auf den eigenen QCI-Quantencomputern des DLR getestet. Die Übertragung von quantenchemischen Problemen auf Quantencomputer ist von großer Bedeutung für die deutsche Industrie, insbesondere für die Entwicklung leistungsfähigerer Batterien, die weitreichende Auswirkungen auf alle Forschungsbereiche des DLR Instituts haben: Energie, Verkehr, Luftfahrt, Raumfahrt, Sicherheit, Digitalisierung.

Projekt ALQU: Brückenschlag zwischen Forschung und Industrie

Das Ziel des ALQU-Projekts besteht darin, in Zusammenarbeit mit HQS Quantum Simulations und IQM Germany konkrete materialwissenschaftliche Anwendungen für Quantencomputer zu erforschen. Die Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten konzentrieren sich auf die Entwicklung industriell verwertbarer Algorithmen im Hardware/Software-Co-Design, insbesondere im Bereich Quantenmaterialien und dem Fermi-Hubbard-Modell zur Darstellung von Festkörpern und deren Wechselwirkungen. Der Fokus liegt dabei auf der Zusammenarbeit mit Quantencomputer Hardware

Providern, und die Kooperation soll innovative Materialien und Software zur Simulation von Materialeigenschaften auf Quantencomputern hervorbringen.

Im Rahmen des Projekts ALQU liefert HQS Quantum Simulations insbesondere das Softwaretool Lattice FCI, das die Erstellung, Simulation und Auswertung von Vielteilchensystemen wie Fermionen oder Spins in Python ermöglicht. Es trägt dazu bei, die Modellierung, Analyse und Entwicklung von Algorithmen für Vielteilchensysteme zu erleichtern. Es unterstützt die Anforderungen an ein Hardware-Software-Co-Design und dient als Ressource für die Entwicklung industriell verwertbarer Lösungen.

Innovation und Anwendungsorientierung: HQS Workflow-Integration

Die Workflow-Integration von HQS ermöglicht die flexible Nutzung der Simulationssoftware auf Cloud-basierten Rechnern und die Integration von externen Cloud-Nutzern sowie von High-Performance-Computing-Ressourcen. Eine Integration mit Quantenhardware ist ebenfalls möglich.

Die oben genannten Tools sind Teil der Workflow-Software von HQS. Sie bietet die Darstellung und Ausführung komplexer Prozesse, einschließlich Modellerstellung, Geometrieoptimierung, Quantensystemabbildung, Lösung des Systems und Ergebnisvisualisierung. Die Software kann lokal als einzelne Pakete verwendet oder auf Amazon Web Services (AWS) bereitgestellt werden, was eine flexible Bereitstellung von Hardwareressourcen ermöglicht. Im Jahr 2024 wird die Workflow-Lösung auch direkt auf Rechnern beim DLR zur Verfügung gestellt werden.

In einem ersten Workshop mit DLR Usern wurde das erste Softwarepaket erklärt und implementiert. Dabei konnten die Teilnehmer die Software erstmals durch Hands-On Übungen testen und bekamen eine Einführung in die theoretischen Hintergründe der Chemie und Physick, auf die die HQS Software basiert. „Es war ein gelungener Start in die Arbeit mit der Simulationssoftware von HQS. Die präsentierten Tools werden für unsere Forschung von großem Nutzen sein sowie schlussendlich den Weg für zukunftsweisende Anwendungen in der Industrie zu ebneten.“, sagt Peter Ken Schuhmacher, Leiter des Projekts ALQU am DLR-Institut für Softwaretechnologie.

English Version:

HQS Quantum Simulations supplies simulation software to DLR Institute

Karlsruhe, 05/12/2023: HQS Quantum Simulations GmbH is proud to announce the delivery of a specialized quantum simulation software package to the DLR Institute. The order was placed as part of the DLR Quantum Computing Initiative. In particular, the simulation of material properties and the analysis of material dynamics on quantum computers is of great interest to industry. This requires the development of customized compilation strategies and quantum algorithms in hardware-software co-design for current quantum computers of the NISQ era. Successful collaboration on this challenge represents a major advance in the benefits of quantum technology for industrial end users.

During a public tender procedure within the DLR Quantum Computing Initiative, HQS Quantum Simulations was awarded several projects within the application projects ALQU (Algorithms for Quantum Computer Development in Hardware/Software-Codesign) and BASIQ (Battery materials simulation using quantum computers) this year. The first delivery of HQS software to DLR took place at the beginning of November.

Project BASIQ: Quantum Chemistry | NOISE

The BASIQ project aims to develop material simulations for gate-based quantum computers regarding battery materials. HQS provides therefore the software tools HQS Spin Mapper and HQS Noise App. The HQS Noise App simulates open quantum systems and integrates the noise of NISQ devices into the simulation. It enables high-precision calculations of material properties beyond the ground state. The HQS Spin Mapper creates the basis for accurate and fast quantum simulations, for example for the simulation of battery materials and chemical processes at the atomistic level. HQS Spin Mapper identifies the spin degrees of freedom in solids and molecules, enables mapping to spin systems, and supports spin-based simulations for the detailed exploration of quantum mechanical properties.

The quantum algorithms provided by HQS are tested on DLR's own QCI quantum computers. The transfer of quantum chemistry problems to quantum computers is of great importance for German industry, especially for the development of more powerful batteries, which have far-reaching implications for all research areas of the DLR Institute: Energy, Transport, Aeronautics, Space, Security, Digitalization.

ALQU project: Bridging the gap between research and industry

The ALQU project aims to research specific material science applications for quantum computers in collaboration with HQS Quantum Simulations and IQM Germany. The research and development activities concentrate on the development of industrially usable algorithms in hardware/software co-design, especially in the field of quantum materials and the Fermi Hubbard model for the representation of solids and their interactions. The focus is on collaboration with quantum computer hardware providers, and the cooperation is intended to produce innovative materials and software for the simulation of material properties on quantum computers.

As part of the ALQU project, HQS Quantum Simulations is supplying the Lattice FCI software tool, which enables the creation, simulation, and evaluation of many-body systems such as fermions or spins in Python. It helps to facilitate the modeling, analysis, and development of algorithms for many-body systems. It supports the requirements for hardware-software co-design and serves as a resource for the development of industrially usable solutions.

Innovation and application orientation: HQS workflow integration

The workflow integration of HQS enables the flexible use of the simulation software on cloud-based computers and the integration of external cloud users and high-performance computing resources. Integration with quantum hardware is also possible.

The above tools are part of HQS's workflow software. It provides the representation and execution of complex processes, including model creation, geometry optimization, quantum system mapping, solution of the system, and result in visualization. The software can be used locally as individual packages or

deployed on Amazon Web Services (AWS), allowing flexible provisioning of hardware resources. In 2024, the workflow solution will also be made available directly on computers at DLR.

The first software package was explained and implemented in an initial workshop with DLR users. The participants were able to test the software for the first time through hands-on exercises and were introduced to the theoretical background of the chemistry and physics on which the HQS software is based. "It was a successful start to working with the HQS simulation software. The tools presented will be of great benefit to our research and ultimately pave the way for future-oriented applications in industry," says Peter Ken Schuhmacher, head of the ALQU project at the DLR Institute of Software Technology.

About HQS Quantum Simulations

HQS Quantum Simulations was founded in 2017 as a Karlsruhe Institute of Technology (KIT) spin-off and develops software to simulate quantum systems. The start-up's software works on regular computers but can be easily transferred to quantum computers. HQS Quantum Simulations intends this approach to allow companies and researchers to transition their simulation workflow quickly and efficiently to quantum computing as soon as it becomes available.

Press Contact:

Dr. Michael Marthaler

press@quantumsimulations.de

HQS Quantum Simulations GmbH

Rintheimer Straße 23

76131 Karlsruhe

Germany

www.quantumsimulations.de

info@quantumsimulations.de