

量子コンピュータによる量子化学計算#7

- クラウド環境の教育利用事例 -

Quantum chemical calculations by the quantum computer

- Example of educational use of cloud environment -

blueqat (株)¹, 立教大理², 東大生産研³, 大阪市大理⁴, JST さきがけ⁵○加藤拓己¹, 齊藤瑠偉², 永井隆太郎¹, 奥脇弘次², 望月祐志^{2,3}, 杉崎研司^{4,5}, 湊雄一郎¹Blueqat Inc.¹, Rikkyo U.², U. Tokyo³, Osaka City U.⁴, JST PRESTO⁵°Takumi Kato¹, Rui Saito², Ryutaro Nagai¹, Koji Okuwaki², Yuji Mochizuki^{2,3}, Kenji Sugisaki^{4,5}, Yuichiro Minato¹

E-mail: kato@blueqat.com

【序】近年、量子技術に対する期待が高まっており、日本でも政府主導で「量子技術イノベーション戦略」[1,2]が策定されています。中でも人材戦略は、量子技術イノベーション戦略が掲げる「5つの戦略」のひとつで、量子技術を早期の段階から使いこなす「量子ネイティブ」人材の育成が必要とされています[1,2]。私たちは、量子コンピュータの教育現場での利用を意識し、本学会でも過去6回、量子コンピュータを用いた量子化学計算として、VQEアルゴリズムを用いた第一原理計算に関する発表を行っています。今回は、量子コンピュータのシミュレータを教育現場で活用した取り組み事例として、立教大学・望月研究室の卒業研究として行われた、タンパク質折りたたみ問題のQAOAでの求解について紹介いたします。

【タンパク質折りたたみ問題】タンパク質は、アミノ酸の鎖から構成され、また、アミノ酸の鎖が折りたたまれた構造を持っています。「タンパク質折りたたみ問題」とは、その構造を求める問題で、エネルギーを最小にする鎖の配置が解となります。

【手法および結果】本問題は、Aspuru-Guzikら[3]によって、QUBO問題として定式化、求解されました。QUBO問題はQAOA[4]によって量子ゲート型量子コンピュータで解が求まります。[5] また、QUBO問題では相互作用は2体のみを考慮するため、多体相互作用は2体問題への分解が必要ですが、QAOAでは多体相互作用のまま扱うことができ、定式化を簡略に行えます。今回、本問題を図1(a)のように量子ビットに対応付けてQAOAでの定式化し、初期状態とし図1(b)を用意し、量子ゲート型シミュレータを内部で用いたblueqat AutoQML [6,7]を用いて最適化計算を行いました。結果、図2のように、ビット列001が高い確率で得られ、これは図1(c)の折りたたみ状態に対応します。

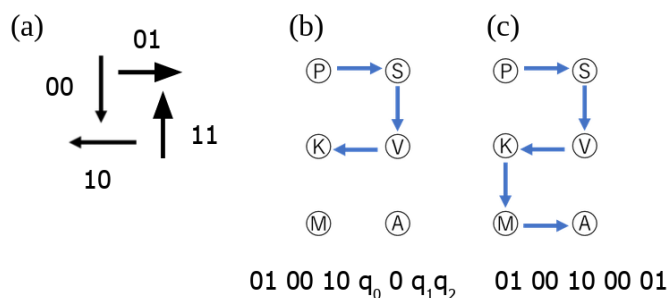


図1 (a) 量子ビットと折りたたみとの対応 (b) 事前にある程度折りたたまれたタンパク質 (c) 最適化計算の結果

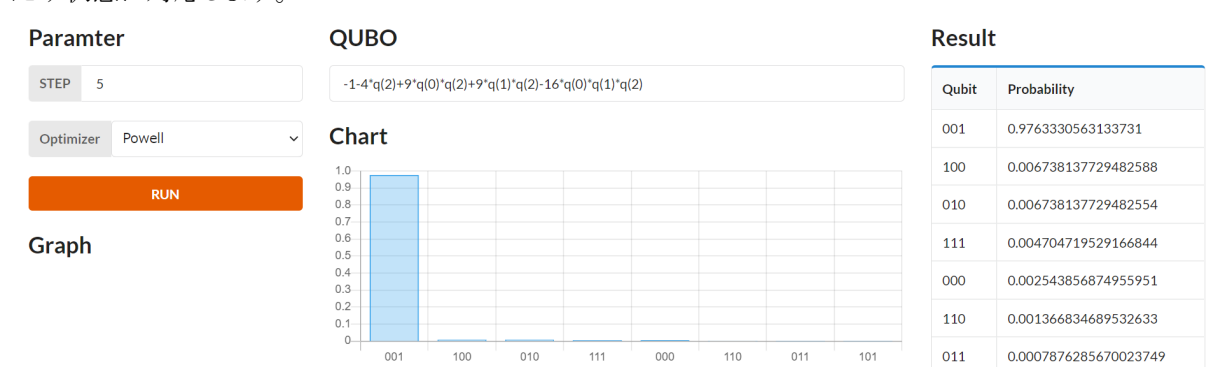


図2 blueqat AutoQMLによる最適化・可視化結果

【参考文献】[1] 文部科学省, 量子技術イノベーション戦略の取組状況について (2021) [2] 内閣府 統合イノベーション戦略推進会議, 量子技術イノベーション戦略 (最終報告) (2020) [3] Perdomo-Ortiz, A. et al, Sci Rep 2, 571 (2012). [4] Farhi et al., arXiv:1411.4028 (2014) [5] Fingerhuth et al., arXiv:1810.13411 (2018) [6] (<https://github.com/Blueqat/Blueqat>) [7] (<https://auto.blueqat.com>).