



Title	Developing Quantum-Classical Hybrid Interfaces for Solving Realistic Atomic Scale Chemical Problems
Author(s)	塩田, 知弥
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/103163
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論文内容の要旨

氏 名 (塩 田 知 弥)	
論文題名	Developing Quantum-Classical Hybrid Interfaces for Solving Realistic Atomic Scale Chemical Problems (現実的な原子スケール化学問題の解決に向けた量子古典ハイブリッドインターフェースの開発)
<p>論文内容の要旨</p> <p>量子コンピュータは、量子化学計算や機械学習を効率化・高度化し、原子・電子スケールのミクロな化学反応や材料特性を根源的に理解・予測するための強力な計算手段となることが期待されている。しかし、量子ビット数やゲート精度など現行の量子ハードウェアには制約があり、またノイズに耐性を持つ量子コンピュータが実現した場合においても、量子アルゴリズムを実用的な問題へ展開するためには、前処理や後処理、データ統合・解析といった古典コンピュータ側での高度なアルゴリズム設計や効率的な計算資源活用が不可欠である。言い換えれば、量子コンピュータの潜在能力を引き出し、現実的な化学の原子スケール問題解決へとつなげるには、量子計算と古典計算基盤を有機的に接続する「量子古典ハイブリッドインタフェース」の構築が求められる。</p> <p>本研究は、この量子古典連携のためのインタフェース群を構築し、(i) 量子計算による量子化学計算のための前後処理の効率化、(ii) 量子コンピューティングの高精度計算活用基盤の構築、(iii) 量子計算を用いた機械学習による原子レベルの化学特性予測の実現を目指すものである。</p> <p>(i) 第三章では、高い並列性能を持つ古典量子化学計算ソフトウェアと、量子位相推定法や変分量子固有値法を用いる量子コンピュータ・シミュレータとをインタフェースし、分子系および周期系の第二量子化ハミルトニアン構築や原子にかかる力の効率的な評価をおこなう。これにより、従来は古典計算機側の計算でさえ困難であった液体系、表面系、生体系などの広範な凝集系に対する原子レベル反応解析における古典計算機側のオーバーヘッドを低減し、量子計算の性能を活用する基盤を整える。</p> <p>(ii) 第四章では、量子計算により得られた量子化学計算を活用すべく、機械学習原子間ポテンシャル (MLIP) へ統合する技術の提案をおこなう。概念検証として、本技術を用いて実際に異種計算条件や精度水準で得られた量子化学データを統合し、分子・結晶両分野で高精度な予測を行える汎用MLIPを学習する。そして、得られた汎用MLIPを特化型のMLIPと比較することでデータ統合による影響やその利点などを考察する。</p> <p>(iii) 第五、六章では、汎用MLIPが内部で構築する中間表現を後続の機械学習のための低次元記述子として抽出し、量子古典ハイブリッド機械学習による高精度かつ高速な原子レベルの化学特性予測に向けた性能検証をおこなう。第五章では、分子のNMR化学シフト予測のための量子機械学習モデルの構築および従来の記述子との精度検証をおこなう。第六章では、多元系ナノ粒子触媒の触媒特性予測モデルおよび量子古典ハイブリッド機械学習による補正モデルを構築し、古典機械学習モデルとの精度比較をおこなう。</p> <p>本論文は、量子アルゴリズムの潜在能力を最大限に引き出す「量子古典ハイブリッドインタフェース」を構築することで、量子コンピューティングと計算化学、機械学習技術を有機的に結びつけ、量子コンピューティングによる現実的な原子レベルの化学問題への応用の早期化・高度化に寄与するものである。加えて、本研究で得られた汎用MLIPは、特化型のMLIPの精度に匹敵することから、古典計算による計算化学と機械学習の融合分野の発展にも寄与するものである。</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (塩 田 知 弥)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	藤井 啓祐
	副 査	教 授	北河 康隆
	副 査	教 授	山本 俊
	副 査	教 授	水上 渉 (量子情報・量子生命研究センター)
	副 査	准教授	御手洗 光祐

論文審査の結果の要旨

本論文は、量子コンピュータを現実的な問題に適用する上で必要不可欠な古典計算と量子計算との連携部分に着目し、両者を橋渡しする高度な「量子古典ハイブリッドインタフェース」の構築を提案するものである。量子コンピュータは量子化学計算やマテリアルインフォマティクスへの応用が期待されているが、実際の化学の問題を量子計算のみで考慮すべき自由度を全て取り扱うことは難しい。将来、誤り耐性量子コンピュータ (FTQC) が完成したとしても、FTQCのクロック数が古典コンピュータよりも低速になるであろうことから、古典計算機との効果的な連携が量子コンピュータを実践的な化学の問題へ応用する上では不可避となっている。本論文は、この重要な課題に対して体系的なアプローチを提示している。

最初のアプローチとして、まず本論文では、高並列性能を持つ古典量子化学計算ソフトウェアと量子回路エミュレータとのインタフェースを構築している。このインタフェースにより、分子系および周期系の第二量子化ハミルトニアン構築や原子にかかる力の効率的評価を実現した。さらに、このインタフェースを用いて、これまで困難であった液体系、表面系、生体系などの広範な凝集系に対する変分量子固有値法の計算も達成している。

次に本論文では、量子計算により得られた量子化学計算結果を機械学習原子間ポテンシャル (MLIP) へ統合するための基盤技術を提案している。従来、量子化学計算は細かな計算手法や計算設定が異なるデータを混ぜて取り扱うことができなかった。この壁を取り除く技術を開発し、その実証研究として異種計算条件や精度水準で得られた量子化学データを統合することで、分子・結晶両分野において高精度な予測を可能とする汎用MLIPの学習を実現した。

続く、第三のアプローチとして本論文では、汎用MLIPが構築する中間表現を低次元記述子として抽出し、量子古典ハイブリッド機械学習による高精度かつ高速な物性予測をおこなっている。具体的には、分子のNMR化学シフト予測のための量子機械学習モデルの構築をおこない、問題サイズの恣意的な次元削減削減などをおこなうことなく、実際の化学の問題に対して既存の古典機械学習にひけを取らない性能を達成している。さらに、多元素ナノ合金表面への分子の吸着エネルギーを高速にスクリーニングする量子機械学習モデルも作成している。

このように本論文は、量子コンピューティングの潜在能力を最大限に引き出すための量子計算と古典計算の連携の包括的な枠組みを提示し、1) 量子化学計算における第二量子化ハミルトニアン構築と微分計算の効率化、2) 異種量子化学データの統合技術の開発、3) よりコンパクトな原子レベルの記述子の開発とそれによる量子古典ハイブリッド機械学習を用いた物性予測の実現、という三つの重要な成果を達成している。これらの成果は、量子コンピュータの化学分野への実応用化に向けた重要な技術的基盤を提供するだけでなく、古典計算の文脈においても計算化学と機械学習の融合分野の発展に寄与するものである。以上の理由から博士 (理学) の学位論文として価値があるものと認める。