

量子回路学習を用いた有機分子の実測物性の予測検討

(早大理工) ○畠山 歓・小柳津 研一

Prediction of experimental properties of organic molecules by quantum circuit learning
(Department of Applied Chemistry, Waseda University)

○Kan Hatakeyama-Sato, Kenichi Oyaizu

Quantum circuit learning is a new algorithm for quantum computers. The regression model was employed to predict regular 1-dimensional functions and experimental molecular properties from their structures. We analyzed the basic characteristics of QCL by comparing it with regular regression models. Its extrapolating prediction performances could exceed conventional models under some conditions with small databases.

Keywords : Quantum circuit learning, Cheminformatics, Materials informatics

ゲート型量子コンピュータは次世代の計算マシンとして知られ、化学分野でも量子化学計算への適用を主眼に基礎研究が進んでいる。マシンを機械学習タスクに活用する試みも広がり、量子回路学習(Quantum circuit learning, QCL)などの古典・量子マシンを併用するアルゴリズムなどが知られる。

本報では有機分子の構造から実測物性を推定する回帰タスクを QCL で実装するとともに、一般的な回帰モデルと比較することでその性質を分析した¹。QCL は線形変換で記述される量子ゲート操作と非線形の観測操作で構成される(**Figure**)。回路パラメータ θ をうまく調節することで入力値 x に対して出力 y が定まる回帰モデル $y = f(x)$ が得られる。その回帰性能を標準的な 1 次関数や融点などの分子物性の予測タスクで評価した。適切な回路構成を設計することで、非線形性を持ちながらも、小規模なデータセットと適合性に優れたモデルが得られる場合があることが分かった。当日は QCL の詳しい原理や特徴について説明する。

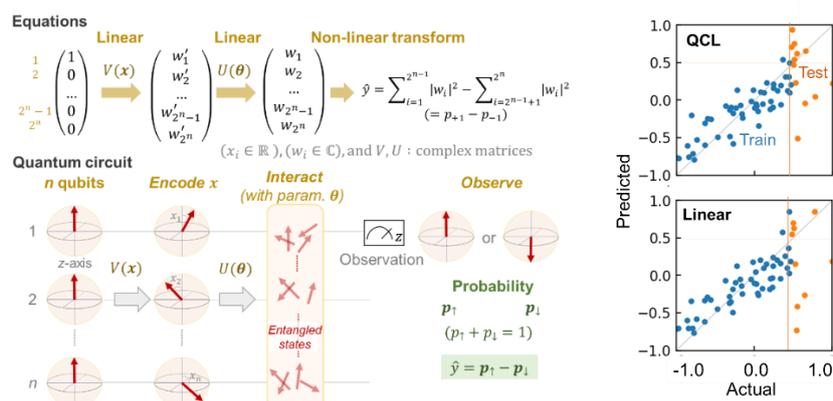


Figure Left: scheme of QCL. Right: typical prediction results of molecular properties.

Reprinted from ref¹ under a CC license.

(1) Hatakeyama-Sato, K.; Igarashi, Y.; Kashikawa, T.; Kimura, K.; Oyaizu, K. Quantum circuit learning as a potential algorithm to predict experimental chemical properties. *Digital Discovery* **2023**. DOI: 10.1039/d2dd00090c.