

蛋白質構造解析に特化した量子アニーラーに関する要素技術の検討

Investigation of Crucial Components of the Quantum Annealer Specified for the Protein Folding

産総研¹, 東京女子医大², 大阪市大³ ○才田大輔¹, 岩藤和広², 山根健史³, 丸山耕司³

AIST.¹, TWUMU², Osaka-CU³ ○D. Saida¹, K. Iwadoh², T. Yamane³ and K. Maruyama³

E-mail: saida.daisuke@aist.go.jp

人生 100 年時代の到来に向けて、医療の領域では身体の異常を未病時に診断できることや、病氣と診断された患者に現れる細胞の発生メカニズムを解明すること、ならびに新たな治療薬の創生が求められている。そこで、医療の領域で実応用に適う姿からバックキャストして、将来的にスーパーコンピューターや機械学習に替わる技術を描き、細胞の構造解析を得意とする新しい量子コンピューター(QC)を実現することを目指すことにした。QC と実応用の間へ架け橋をかけながら、段階的に解析規模を発展させつつ早期の社会実装を実現するため、量子アニーリング方式に着目した。従来の量子アニーラーは計算精度が低いという本質的な課題がある。この課題故に、量子ビット数が今後スケーリングしたとしても、従来の量子 chip の構成のままでは計算精度を信頼して実応用と結びつけることは難しいと考えられる。この原因は、回路と合うように問題ハミルトニアンを変形して実装していることに起因すると想定し[1]、本研究では「解くべき問題のモデル表現」と「超伝導回路の構成」の双方を変更して量子 chip へ実装することとした。

Figure 1(a)は、従来回路と本研究におけるハミルトニアンの実装方法の違いを比較したものである。従来は、ハミルトニアンを回路へ実装するために 2 体問題の関係に変形する必要がある、元と異なるエネルギー状態を解くことを行っている。本研究では、問題ハミルトニアンを直接実装できるようにすべく、多ビット結合器を作製した。Figure 1(b)は、病氣と診断された時に見つかる細胞が発生する過程をたどることに相当する解析を行う新規手法を整理した図である。量子アニーラーを用いる利点は、最小値以外のエネルギーの解も発生確率と共に求めることができることである。非安定状態の蛋白質がその後の病的な変化に影響しているとしたら、病氣になるメカニズムを考察したり、未病状態で早期発見する手がかりが得られる可能性があると考えられる。

References [1] D. Saida et al., arXiv : 2106.08681. **謝辞** 本研究に使用されたデバイスは、(国研)産業技術総合研究所の超伝導クリーンルーム CRAVITY において作製されたものである。

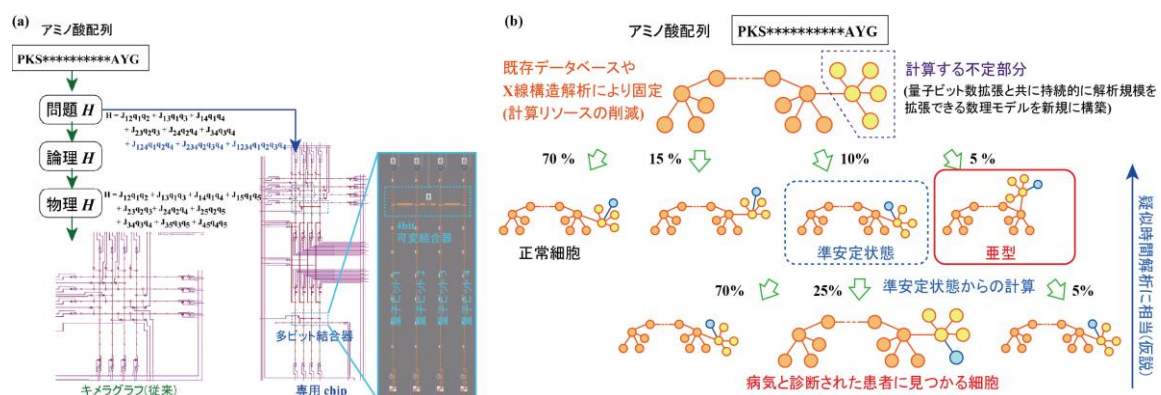


Figure 1(a) 問題ハミルトニアン(問題 H)を物理 H に変換して従来のキメラグラフへ実装する流れと、本研究で検討する直接回路実装する流れの比較。従来技術では、多体問題である J_{1234} を直接回路へ実装できない。(b) 量子アニーラーの解の準安定状態を使って、病氣と診断される時に見つかる細胞が発生する過程をたどることに相当する解析を行う新規手法。