

TSUBAME 共同利用 令和7年度 産業利用 成果報告書

利用課題名: 有機高分子材料の量子化学的研究  
英文: Quantum Chemical Studies of Organic Polymeric Materials

利用課題責任者: 川内 進  
First name Surname: Susumu Kawauchi

所属: 株式会社 Quemix  
Affiliation: Quemix Inc.  
URL: <https://www.quemix.com/>

邦文抄録(300 字程度)

我々は量子計算効率を飛躍的に高める適応補間量子変換(AIQT)等の独自アルゴリズムの開発に成功したため、本研究ではこれらを中核とした材料計算・機械学習の統合的な高度化研究へと展開した。本研究では、量子計算、材料科学、機械学習の各分野における計算手法の高度化を達成した。量子計算領域では、データ適応型の量子変換フレームワーク「AIQT」を提案し、従来の量子フーリエ変換を凌駕する表現力を少数のパラメータで実現した。これを振幅エンコーディングに応用し、再構成誤差を最大 50%低減することに成功した。材料科学領域では、第一原理計算により半導体中の水素-欠陥相互作用を解明し、N型ドーピング活性化の新たな物理指針を提示した。さらに、古典機械学習における適応的変換「General Transform」を構築し、画像認識等での有効性を実証した。これら量子・古典の両面における基盤技術の創出は、次世代の高性能計算基盤の実現に大きく寄与するものである。

英文抄録(100 words 程度)

Having successfully developed proprietary algorithms such as the Adaptive Interpolating Quantum Transform (AIQT) that drastically enhance quantum computing efficiency, we have expanded this research to focus on the integrated advancement of materials science and machine learning centered around these core technologies. This research advances computational methodologies across quantum computing, materials science, and machine learning. We proposed AIQT, a quantum-native framework that enhances representation learning with minimal parameters. Applying AIQT to amplitude encoding reduced reconstruction errors by up to 50% compared to conventional methods. In materials science, first-principles calculations elucidated hydrogen-defect interactions, providing a new strategy for activating N-type doping in semiconductors. Additionally, we developed the General Transform (GT) for classical machine learning, demonstrating superior performance in various tasks. These integrated developments in quantum and classical algorithms establish a robust foundation for next-generation high-performance computing and materials discovery.

Keywords: 5つ程度

Quantum Algorithms, Adaptive Interpolating Quantum Transform (AIQT), Quantum-Classical Hybrid Computing, First-Principles Calculation, Quantum Machine Learning (QML)

背景と目的

本研究の当初の目的は有機高分子材料の量子化学的研究であったが、研究の過程で、量子ビット数や回路深さに制約がある現在の量子計算環境において、計算効率を劇的に向上させるアルゴリズムの構築こそが最優先課題であるとの結論に至った。

特に、データの特徴を効率的に抽出・表現する「変換(Transform)」のプロセスに着目し、従来の固定基底を用いた手法を超え、データに適応して最適な基底を学習する「適応補間量子変換(AIQT)」および「General Transform(GT)」の開発を主目的に据えた。

本研究の目的は、これら独自アルゴリズムを核として、量子機械学習(QML)、CAE シミュレーション、および半導体材料計算の各領域における計算精度と効率を統合的に高度化することにある。

概要

本研究では、以下の 3 つの柱に基づき研究を実施した。

1. 量子ネイティブな変換学習フレームワークの構築: 複数のユニタリ変換を連続的に補間し、最小限のパラメータで高度な表現力を実現する AIQT [1]、

およびその古典版である GT [2]を開発した。

- 量子計算の効率化(応用実証): AIQT を振幅エンコーディングに適用し、量子回路内でのデータ表現効率を検証した [3]。また、QML モデルとしてのスケール特性を解析した。
- 材料計算への適用: 第一原理計算(DFT)を用い、半導体の N 型ドーピングにおける水素と欠陥の相互作用を解析した [4]。これは、将来的に AIQT 等のアルゴリズムを材料物性予測へ適用するためのベンチマークとしての役割も担う。

### 結果および考察

#### 1. AIQT による振幅エンコーディングの高度化:

金融データおよび画像データを用いた検証の結果、AIQT は従来の量子フーリエ変換ベースの手法と比較し、同一のスパー条件で再構成誤差を最大約 50% 低減した(図 1)。これは、データに適応して基底を最適化する AIQT の特性が、限られた量子リソース下での情報保持に極めて有効であることを示している。

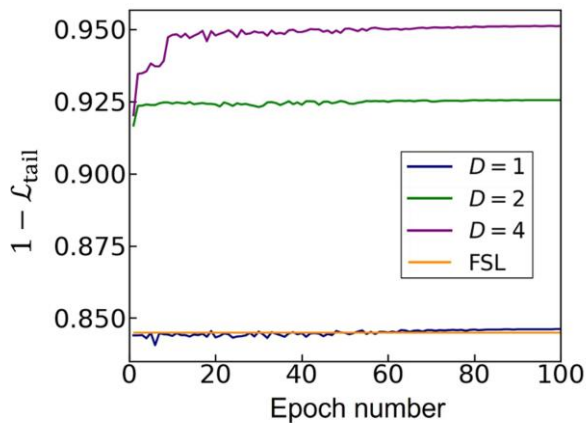


図 1. Deep AIQT (AIQT の D 層の繰り返しアーキテクチャ)の学習曲線 [3]。MNIST データを 5%のスパー情報に圧縮して振幅エンコードを行った場合の、量子フーリエ変換ベースの手法(FSL)との比較結果。複素 RMSE の検証誤差で FSL は  $12.46 \times 10^{-3}$  に対し、Deep AIQT (D=4)は  $6.934 \times 10^{-3}$  であった。

#### 2. General Transform(GT)の汎用性:

画像認識や自然言語処理において、GT を導入したモデルは既存の変換手法を一貫して上回る性能を示した

(表 1)。特筆すべきはパラメータ増加が極微量である点であり、実用規模のモデルへの組み込みが容易であることを確認した。

表 1. 自然言語処理タスクの CoLA と SST-2 に対する FNet(フーリエ変換ベース手法)と GTNet のファインチューニング結果 [2]。検証の損失関数  $L$  と Top-1 精度  $A_{Top-1}$  の比較。

	CoLA		SST-2	
	$L$	$A_{Top-1}$	$L$	$A_{Top-1}$
FNet-base	0.5875	72.48	0.3876	87.58
GTNet-base	0.5624	74.04	0.3835	88.50
FNet-large	0.5336	77.75	0.3560	90.04
GTNet-large	0.5238	78.74	0.3342	90.70

#### 3. 半導体ドーピングにおける物理機構の解明:

水素注入が特定の欠陥と結合することで、不活性化しやすい N 型ドーパントからの自由電子生成を安定化させる機構を理論的に解明した(図 2)。これにより、パワー半導体の電力損失低減に向けた明確な設計指針が得られた。

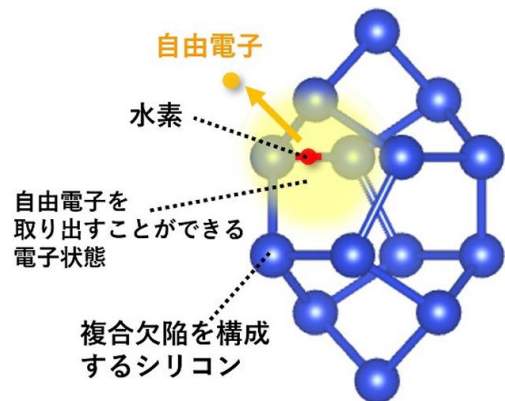


図 2. ESR 実験と第一原理計算の比較により同定したシリコンパワー半導体中の複合欠陥構造 [4]。複合欠陥中の水素が自由電子を取り出し可能な電子状態を形成することで、電子濃度を制御することが可能になる。

#### 4. TSUBAME4.0 利用の有効性:

これら大規模な量子回路シミュレーションおよび DFT 計算は、数十基の GPU を用いた分散並列環境におい

て初めて実用的な時間内での完遂が可能となった。

#### まとめ、今後の課題

本研究により、独自開発の AIQT および GT が量子・古典双方の計算領域において劇的な効率向上をもたらすことが実証された。これにより、当初の目標を大きく超え、次世代計算基盤の核となるアルゴリズムの確立に成功した。

#### 今後の課題

本研究で得られた知見を基に、今後は大規模条件下における量子アルゴリズムの理論的性能検証と、実用的な量子-古典ハイブリッド計算基盤の設計指針の獲得に注力する。現状の量子ハードウェアの制約を克服し、実用規模に近い条件でアルゴリズム挙動を評価するためには、指数関数的に増大する演算量とメモリ消費に対応した大規模な量子回路シミュレーションが不可欠である。

次段階では、単体 GPU 環境では実行困難な規模のシミュレーションを分散 GPU 環境で並列実行し、強スケーリング特性や通信律速条件下でのさらなる性能評価を行う。あわせて、QML における学習過程のスケーリング挙動解析や、材料モデル構築のための電子状態計算(DFT)および機械学習ポテンシャル(MLIP)生成を加速させる。これらの研究を通じ、多数の GPU と高速インターコネクトを要する古典 HPC 資源との高効率な連携アーキテクチャを確立し、次世代の計算基盤構築に寄与することを目指す。

#### 参考文献

- [1] G. Budiutama et al., Phys. Rev. A 112, 062410 (2025).
- [2] G. Budiutama et al., arXiv:2505.04969 (2025).
- [3] G. Budiutama et al., arXiv:2603.03803 (2026).
- [4] A. Kiyoi et al., Communications Materials 7, 8 (2025).