

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書
------------------

水野 雄太

北海道大学 電子科学研究所  
助教

離散的化学反応論のための量子計算技術

## § 1. 研究成果の概要

原子・分子は粒子として振る舞う離散的な存在であり、化学反応は原子間の結合が組み換わる離散的な事象とみなせる。この離散性と組合せ爆発のために、化学量論的経路解析や確率論的速度論解析など、従来計算技術では膨大な計算量を要する問題が化学反応論には存在する。本研究の目的は、これらの問題を量子計算によって効率的に解くための枠組みを開発することである。

初年度である 2020 年度は、化学量論的経路解析への量子アニーリング・イジング計算機の応用について研究を進めた。化学反応ネットワーク上の有機合成経路最適化や代謝反応機構解析は、問題サイズが大きくなると組合せ爆発のために急激に計算困難になる組合せ最適化問題 (NP 完全問題) に帰着される。したがって、数千・数万反応からなる大規模化学反応ネットワークの解析の実用化のためには計算の工夫が必要であり、本研究では量子アニーリング・イジング計算機の適用を検討している。2020 年度は、化学量論的経路解析の数理モデルの構築、量子アニーリング・イジング計算機で解ける二次制約なし二値最適化 (QUBO) への問題の翻訳、量子アニーリング・イジング計算機で問題を解く際のパラメータの自動チューニング、そして量子アニーリング・イジング計算機を用いて実際に問題を解く、といった一連の流れを実現するプログラムを実装した。量子アニーラの実機である D-Wave Advantage を用いたテスト計算の結果、効率のよい計算を実現するためにはより精緻なパラメータチューニングが必要そうであることが分かった。今後もパラメータ自動チューニングアルゴリズムの改善に取り組んでいく予定である。この他にも、反応経路列挙の問題に対して、量子アニーリング・イジング計算機をサンプラーとして利用する確率的な列挙アルゴリズムの検討を進め、既存アルゴリズムの数理的解析と改良を行った。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Yuta Mizuno and Tamiki Komatsuzaki, “A Note on Enumeration by Fair Sampling”, arXiv:2104.01941 (2021).