

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

2021 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、化学量論的反応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。

2021年度は、量子アニーリングをはじめとするイジング計算機の化学反応経路解析へ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合成経路最適化や代謝反応機構解析は、NP 完全な組合せ最適化問題としてモデル化できる。本研究では 2021 年度までに、イジング計算機を用いた化学反応経路解析プログラムを開発してきた。このプログラムは、(1)化学反応経路解析問題の数理モデルの構築、(2)イジング計算機で解ける二次制約なし二値最適化問題への翻訳、(3)イジング計算機で問題を解くためのパラメータの調節、そして(4)イジング計算機を用いた解のサンプリング、といった一連の流れを自動的に実行する。さらに、市販の混合整数計画ソルバーを用いた化学反応経路解析プログラムと実在の化学反応ネットワークを用いたベンチマーク用合成経路最適化問題生成プログラムも実装し、イジング計算機を用いた化学反応経路解析プログラムの性能評価基盤を整えた。量子アニーラー実機の D-Wave Advantage で直接扱える 20-130 変数 (350-4000 qubits 相当) 程度の合成経路最適化問題を用いて、D-Wave Advantage, シミュレーテッド・アニーリング (SA), 混合整数計画ソルバー Gurobi Optimizer に対する性能評価を行った。パラメータ自動調節機構により、ユーザーがパラメータを調節しなくても、D-Wave Advantage と SA を用いて合成経路最適化問題の近似解を自動的に得ることに成功した。しかし、同じ精度の近似解を得るまでにかかる計算時間を比較すると、D-Wave Advantage と SA は Gurobi Optimizer より性能が劣るため、さらなるソフトウェア・ハードウェアの改善が望まれる。