

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2020年度採択研究代表者

2022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

## 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、化学反応ネットワーク上の経路探索問題や原子マッピング問題、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、量子計算および関連計算技術を用いて、これらの化学反応論の問題を効率的に解くための枠組みを開発することである。2022年度は、化学反応ネットワーク上の経路探索問題と原子マッピング問題に対して量子アニーリングなどのイジング計算技術を応用する研究を進めた。

化学反応ネットワーク上の経路探索問題は、標的化学種と原料化学種を結ぶ化学反応ネットワーク上の経路(=化学反応の組合せ)を求めるNP困難な組合せ問題である。本研究では、イジング計算機を用いて化学反応ネットワーク上の経路探索問題を解くプログラムを開発し、D-Wave Advantage とシミュレーテッドアニーリング(SA)を用いた性能評価を行った。提案アルゴリズムにより厳密な最適経路を求めることは困難であるが、コスト値の相対誤差を許容すれば、解の発見確率や計算時間のスケールリングは改善することがわかった。さらに、提案アルゴリズムが最適解を見つけられない理由を詳細に解析し、今後の技術開発の方向性に関する指針を得た。

原子マッピング問題は、化学反応式が与えられたときに、反応物(左辺)と生成物(右辺)の原子の間の対応関係を同定するNP困難な組合せ問題である。この問題は最大クリーク列挙問題に帰着されることが知られているため、本研究ではイジング計算機により最大クリークを全列挙するアルゴリズムを開発した。SAを用いた提案アルゴリズムと既存の最大クリーク列挙アルゴリズムの計算性能を比較したところ、問題サイズに対する計算時間のスケールリングにおいて、提案アルゴリズムの優位性を確認した。