

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 離散的化学反応論のための量子計算技術

2. 個人研究者名

水野 雄太（北海道大学電子科学研究所 助教）

3. 事後評価結果

本研究では化学反応論への量子コンピュータ応用を目指した。化学分野への量子コンピュータ応用では量子化学計算が盛んに研究されているが、本研究はそれとは異なった応用に着目した点で評価できる。

研究項目は (A) 化学反応ネットワーク上の経路探索や (B) 化学反応における原子マッピング、(C) 化学反応システムの確率論的速度論解析であり、(A) と (B) は量子アニーリングを、(C) はゲート型量子コンピュータによる線形微分方程式の高速な解法を利用する。量子計算機で化学反応探索の方法が確立すれば、新物質合成や製薬などの発展につながる可能性がある。

このうち経路探索については、量子アニーリングが用いるイジングモデルによる最適化は従来の最適化手法に対して優位性が見い出せていない。この原因が最適化におけるペナルティ項のサイズ依存性にあると考え、領域の他の研究者と共同で制約量子アニーリングを適用することでこの問題を打開しようとしている。

原子マッピングは、与えられた化学反応式において反応物（左辺）と生成物（右辺）の原子間の対応関係を同定する NP 困難な組合せ最適化問題である。この問題はイジングモデルで定式化できるが、最適解の全列挙が必要となり、そのためのプログラムを開発した。大きな問題サイズでは既存アルゴリズムよりも問題を速く解けることを確認している。このように、量子アニーラ（イジングモデル）で効率的に解ける問題と解けない問題を明らかにし、その原因を考察していることは将来の量子アニーラの応用にとって有用であると考えられる。

化学反応システムの確率論的速度論解析の基礎方程式は化学マスター方程式であり、疎な係数行列を持つ高次元線形微分方程式である。次元 N は化学種の数に対して指数的に増大するが、このような方程式は誤り耐性量子コンピュータで効率的に解けることが知られている。しかし、計算結果を効率的に解析する手法は未開拓である。本研究では力学系のシミュレーション結果を効率的に解析する量子動的モード分解アルゴリズムを開発した。提案アルゴリズムは動的モード分解を $O(\text{poly log } N)$ の計算量で実行可能であり $O(N)$ の計算量が必要な古典計算機に対して指数加速を達成している。この動的モード分解アルゴリズムは、汎用的であり流体・力学系などの幅広い適用が期待できる。微分方程式の数値解法についてさきがけ領域内外の研究者と共同研究が始まっている。また、Noisy Intermediate-Scale Quantum computer (NISQ) デバイスを用いて化学マスター方程式の定常状態を計算する変分量子アルゴリズムの検討も行われ、実機（国産 3 号機）を用いることも計画されており、今後の発展に期待したい。

一方で、論文が査読付き論文 1 件と arXiv 2 件のみであることはやや物足りない。成果を拡充してより多くの査読付き論文誌へ掲載されることを望む。