

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	村松真由
研究機関名	慶應義塾大学
所属部署名	理工学部
役職名	准教授
研究課題名	量子アニーリングによる材料トポロジー設計システムの構築
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

材料がどのような微細構造をとるのか解析することは重要である。2 成分材料系の 2 相構造を解析する方法の一つに Phase-field 解析がある。これは Phase-field 変数という秩序変数を導入し、その時間発展方程式を解くことで境界の移動を表現することができる。Phase-field 解析は、境界を追従することなく滑らかに表現できるため広く用いられている。しかしながら平衡状態を得るまでに長い計算時間がかかるという欠点がある。

一方、近年量子コンピュータによる計算の高速化が注目されている。量子アニーリングは統計的で量子的な揺らぎを利用する方法で、最適化問題をエネルギー関数で表されるイジングモデルや Quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) と呼ばれる形式に変換し、エネルギーが最小になる組合せの近似解を導出する。量子アニーリングによって離散最適化問題を解くとシミュレーテッドアニーリングと比較して最大 1 億倍高速に計算ができたという研究結果もある。これまでに量子アニーリングにより Phase-field 解析を行う方法を本研究室で提案したが、アニーリングに用いるエネルギー項は従来手法で用いられる自由エネルギー汎関数と似た働きをするように設計されているだけで対応は不十分である。また、従来手法で得られる結果との誤差評価も不明である。

本研究では Factorization Machine を用いて、量子アニーリングによる Phase-field 解析で用いられるハミルトニアンを、従来手法の自由エネルギー汎関数と一致させるための補正項構築手法を開発した。また、本手法を用いて補正項を構築するとともに、補正項の性能を評価した。