

2023年3月23日

報道機関 各位

国立大学法人東北大学

量子コンピュータで化学反応計算を行う手法開発 — 燃焼など化学反応計算の飛躍的な高速化に期待 —

【発表のポイント】

- 量子コンピュータ*1を用いて実用規模のエンジンやガスタービンなどを対象とする詳細な燃焼（化学反応）計算を可能にする手法を提案しました。
- 量子コンピュータが扱うことのできない非線形問題である化学反応の問題を、量子コンピュータの得意な線形問題に変換する手法を開発しました。
- 古典コンピュータが今後発展したとしても不可能と考えられる大規模な問題であっても、本開発手法と量子コンピュータを組み合わせることで計算可能になると期待されます。

【概要】

燃焼を含む反応性流体の数値解析において、化学反応の時間進行は計算コストが非常に高く、ボトルネックとなります。

量子コンピュータは、非常に高速な計算性能が期待され世界中で研究が進められていますが、線形問題しか解くことができず、一般に強い非線形問題として知られる化学反応とは相性が悪いと考えられてきました。東北大学流体科学研究所秋葉貴輝（工学研究科博士後期課程）、森井雄飛助教らの研究グループでは、量子コンピュータが膨大な変数を取り扱える特性に着目し、非線形問題を膨大な変数で線型化する手法（Carleman線型化）を取り入れることで、非線形な化学反応問題を線形問題に帰着させ、量子コンピュータで取り扱うことのできる手法を開発しました。さらに、線型化する際に使用する変数を増やすことで計算の精度が向上することを示しました。今後、量子コンピュータの実現とともに化学反応計算の飛躍的な高速化が達成されることが期待されます。

本研究成果は、2023年3月9日にScientific Reports誌電子版に掲載されました。

【詳細な説明】

研究の背景

反応性流体の数値解析において、化学反応の数値計算は非線形性、想定する化学種の多さから計算コストの多くを占めます。この計算を高速化するため、膨大な変数の問題を高速に計算することが期待される量子コンピュータを活用する手法を検討しました。

今回の取り組み

量子コンピュータは線型問題のみを取り扱うことができる一方、化学反応は強い非線形性を持っています。そこで、化学反応の非線形性を多くの変数を用いて線型化（Carleman 線型化）することで量子コンピュータが解くことができる手法を提案しました。その結果、非線形問題を線型化した形で解くことに成功し量子コンピュータでの実装の可能性を提示しました。さらに線型化の際に用いる変数の数を増やすことで計算精度が向上することを示し、量子コンピュータ技術の向上とともに計算精度が向上する可能性を示しました。

今後の展開

本研究では量子コンピュータの利用を可能にするソフトウェア（アルゴリズム）を提案しました。しかしコンピュータ内部でのデータのやり取りに伴う通信速度や量子ビット数などのハードウェア的な問題も多く残されております。今後こうした課題が解決され、量子コンピュータが実用化された際に、これまで従来型コンピュータでは事実上時不可能だった大規模な化学反応計算に量子コンピュータを適用することが可能になり、現在より格段に高精度かつ複雑な反応性流体の計算が可能になると考えられます。また、化学反応以外の効果もまとめて線型化することでより複雑な問題も量子コンピュータで扱えるようになることが期待されます。

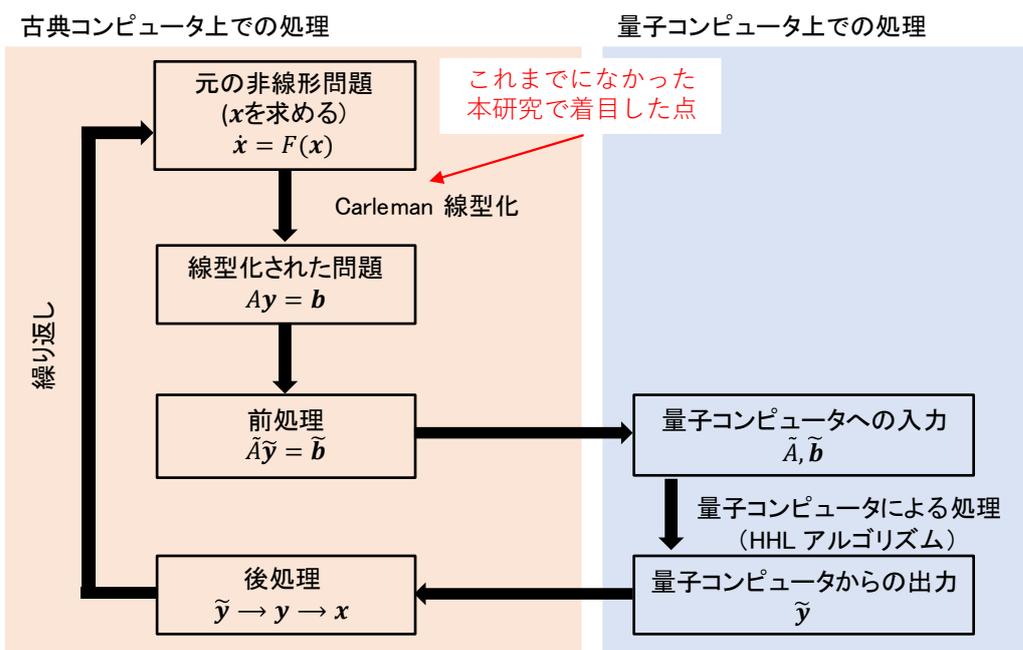


図 1. 本研究で提案したアルゴリズムの概要

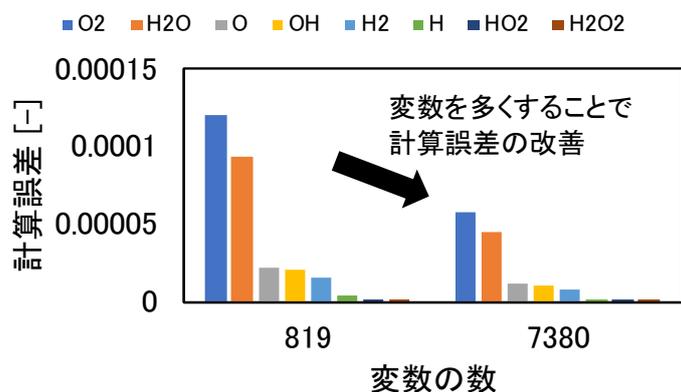


図 2. 線型化の際に用意する変数の数を増やすことで計算精度が向上

【謝辞】

本研究は AICE および日本学術振興会（JP21J11887）の支援を受けて実施されました。

【用語説明】

*1 量子コンピュータ

量子力学に基づく次世代のコンピュータ。特定の分野において、現代のコンピュータでは解けない問題を高速に解くことが期待される。

【論文情報】

タイトル : Carleman linearization approach for chemical kinetics integration toward quantum computation

著者 : Takaki Akiba, Youhi Morii, Kaoru Maruta

*責任著者 : 東北大学流体科学研究所 博士後期課程 秋葉貴輝 (工学研究科)

掲載誌 : Scientific Reports

DOI : 10.1038/s41598-023-31009-9

URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-023-31009-9>

【問い合わせ先】

(研究に関すること)

東北大学流体科学研究所

助教 森井雄飛

TEL:022-217-5296

E-mail: morii@ifs.tohoku.ac.jp

東北大学流体科学研究所

教授・所長 丸田薫

TEL:022-217-5319

E-mail: maruta@ifs.tohoku.ac.jp

(報道に関すること)

東北大学流体科学研究所 広報戦略室

TEL:022-217-5873

E-mail: ifs-koho@grp.tohoku.ac.jp