

イジングマシンによる固体材料の焼結シミュレーション

Simulating Sintering of Solid Material by Ising Machine

株式会社村田製作所¹ ○尾崎 仁亮¹, 池田 潤¹

Murata Manufacturing, Co., Ltd.¹ ○Noriaki Ozaki¹, Jun Ikeda¹

E-mail: noriaki.ozaki@murata.com

近年、データ駆動による業務改善や効率化が、様々な産業・学術分野で推進されている。材料化学においても、機械学習での解析、データ生成による仮想実験などは、効率的な材料研究に欠かせない手法となってきた。一方、こうした活動に費やされる電力の膨大さが問題にもなっており、近い将来、データ処理に係る電力需要が社会の許容限度を超える必然性が高い。この課題解決のために、高効率性あるいは省エネ性を発揮しうる計算機技術として、量子コンピュータなどの非古典計算機が重要視されるようになってきた。非古典計算機は、必ずしも汎用的な計算機ではないものの、各計算機が解きうるモデルが理論的にわかっており、当該のモデルに対しては、高効率に演算できるためである。しかし、実問題を、各計算機に対応するモデルに変換する方法については、知見が十分ではない。例えば、量子コンピュータ関連技術であるイジングマシンは、一般式 $H = \sum_{i,j} Q_{ij} q_i q_j$ ($q_i \in \{0, +1\}$) で表される非制約二値変数二次最適化 (QUBO) を解くことができるが、どのような実問題がこのモデルに変換可能なのかは、いまだに、探索段階にある。特に、材料化学に関する先行研究は、ほんの数例にとどまっている。こうした背景の基、我々は、材料化学の分野において、非古典計算機の活用法を検討している。本報告では、“イジングマシンによる固体材料の焼結シミュレーションが可能なのか”という検証結果を示す。

ここでは、焼結シミュレーションの対象を、3つの固体粒子が液相とともに存在する領域とし、粒子間相互作用などによる系の安定化を仮定して q_i 同士の演算として定式化した。シミュレーションの実行には、イジングマシンの一種である Fixstars Amplify AE を用い、状態の逐次変化を調べた (図1)。この結果、粒子同士の接面積の増加 ($t=5$)、粒子間の空間の狭小化 ($t=30$)、粒子間の空間の消失 ($t=60$) という挙動が得られた。これらは、それぞれ焼結におけるネッキング→気孔の形成→緻密化に相当しており、本焼結シミュレーション結果と一般的な知見が一致している。さらに、QUBO モデル内のパラメータ調節により、緻密化までのステップ数や、粒界のダイナミクスを制御できることも確認した。以上の結果は、イジングマシンを用いた固体材料の焼結シミュレーションや、本定式化に基づく仮想実験とデータ生成ができる可能性を示している。

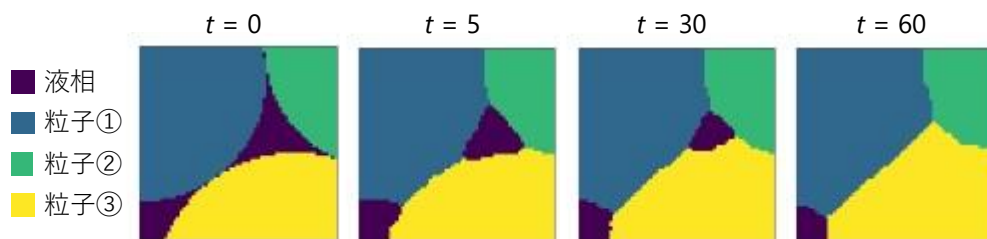


図1. 焼結シミュレーションの結果。 t はシミュレーション開始からのステップ数を表す。