

## 材料研究でのイジングマシン活用の試み

### Trial for Utilizing Ising Machine in Materials Research

株式会社村田製作所<sup>1</sup> ◯尾崎 仁亮<sup>1</sup>, 池田 潤<sup>1</sup>

Murata Manufacturing, Co., Ltd.<sup>1</sup>, ◯Noriaki Ozaki<sup>1</sup>, Jun Ikeda<sup>1</sup>

E-mail: noriaki.ozaki@murata.com

電子部品が高電圧、高温などの過酷な環境下で使用される機会が増えており、部品を構成する材料への特性要求が高度化している。このため、要求を満たす材料の発見が難化し、開発における仮説立案—検証のサイクルの高速化が必要になっている。我々は、この高速化の鍵がデータ科学にあると考えている。中でも、メタヒューリスティクスの物理実装であるイジングマシンは、非制約二次二値最適化 (QUBO) に変換した問題の高速求解が可能であり、高効率なデータ解析手法として有望である。しかし、本研究に着手した当初、材料研究における課題を QUBO に変換した事例は少なく、実用可能性や汎用性は未知であった。そこで、我々は、どのような課題が、QUBO に変換可能か、検証に取り組んだ。この結果、下記のような活用方法があることを見出している。まず、実験計画段階では、球充填法を用いた非直方空間への空間充填実験計画を実装した。続くデータ解析段階では、線形回帰と組み合わせることで、特性発現の基盤となる要因構造を特定可能とした[1]の他、線形非ガウス因果モデルによる変数間の因果関係の探索を、高速化することに成功した。さらに、考察段階で有用となる、焼結や拡散のシミュレーション[2,3]が、実行可能であることも発見した。加えて、イジングマシンによる汎用的な最適化手法である FMA にグレイコードを適用し、連続変数の最適化を高精度化した。本研究により、イジングマシンが材料研究の様々な段階で有用なツールとなることを確認し、材料研究の効率化に寄与しうることを示した。

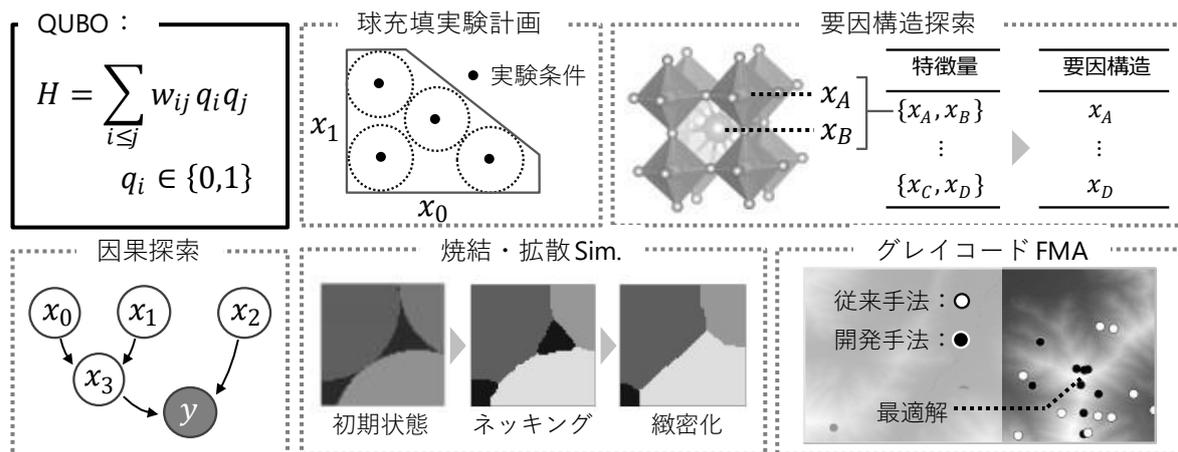


図 1. Tasks in materials research solved by Ising machine.

[1] 尾崎仁亮, 池田潤, 特徴量の組合せ最適化による材料特性決定要因の解明, 応物秋季学術講演会(2024). [2] 尾崎仁亮, 池田潤, 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, 応物秋季学術講演会(2023). [3] 尾崎仁亮, 池田潤, イジングマシンによる拡散のシミュレーション, 応物春季学術講演会(2024).