

# MERIT インターンシップ報告書

理学系研究科 物理学専攻

常行研究室 博士課程 2 年

MERIT 6 期生

吉川 誠司

## ○実施期間

2019年11月25日～2019年12月26日

## ○受け入れ先

京セラ株式会社 先進マテリアルデバイス研究所 量子技術課

## ○テーマ

量子アニーリングを用いた組み合わせ最適化の研究

## ○研究内容

D-Wave マシンを使った量子アニーリングによる組み合わせ最適化の、結晶構造予測への応用に取り組んだ。量子アニーリングで解くことができるイジング模型に問題を落とし込むために、原子種を $\{0, 1\}$ で表した結晶構造を最適化することにした。具体的には、FCC 構造をとる Ag-Cu 置換型合金について、Ag 単体から 1/4 まで Cu に置換する問題を考えた。Conventional Cell では置換の方法が 1 通りなので、 $2 \times 2 \times 2$  の Supercell を取った。結晶構造の安定性を評価するために、Ag-Cu 系の EAM 型モデルポテンシャルを用いた。また、イジング模型の係数  $Q_{ij}$  が未知であるとして、組み合わせとそれに対応するエネルギーのトレーニングセットから  $Q_{ij}$  をベイズ推定する手法を用いた。

Ag 原子を Cu 原子に置換するだけで局所最適化しない場合、二体間モデルポテンシャルはイジング模型で正確に表現することができる。イジング模型の係数  $Q_{ij}$  は 528 個のパラメータを持つが、110 個程度の少ないサンプル数でそれなりに上手く最適化することができた。これは、正しい  $Q_{ij}$  が高い対称性を持っているためだと考えられる。

局所最適化まで行くと結晶の対称性が崩れるため、イジング模型では正確にエネルギーを表すことができなくなる。 $Q_{ij}$ に対称性がなくなったことで、少ないサンプル数では $Q_{ij}$ のフィッティングが上手くいかなかった。そこで、局所最適化前後で係数 $Q_{ij}$ に大きな変化はないとして、結晶構造の対称性から $Q_{ij}$ にも対称性を課してフィッティングパラメーターを少なくした。すると、対称的な $Q_{ij}$ でモデル化してもある程度エネルギーを予測できることがわかった。 $Q_{ij}$ がある程度合っさえいれば、最安定点の候補を効率的に探すことができる。

## ○所感

一ヶ月という限られた期間で、このような非自明な結果が得られ、論文にできるどころまで来たことは良かったと思います。企業という違った環境での経験は、大学での研究から距離をおき、自身の今後や研究そのものを見つめ直す良い機会になりました。

## ○謝辞

本インターンシップにあたり、直接担当してくださった増子貴子様をはじめとしたけいはんなリサーチセンターの皆様、お忙しい中ディスカッションをしてくださった東北大の大関真之先生、ほぼ同時期にインターンシップに参加した北大の藤森俊和くんに深く御礼申し上げます。

インターンシップのサポートをしていただいた PCoMS IPD プログラムおよび物性研 CCMS 事務局の有馬和美様にも大変感謝しております。また、このような貴重な機会を与えてくださいました、MERIT および指導教員の常行真司先生、副指導教員の瀧川仁先生に、この場を借りて御礼申し上げます。