

2021年12月23日
 三井化学株式会社
 株式会社シグマアイ

三井化学とシグマアイ社 量子アニーリング技術を使い 化合物探索等の応用実証研究を開始

三井化学株式会社（本社：東京都港区、社長 橋本 修）は、量子アニーリングマシンを活用した研究開発ソリューション・アプリケーションを提供する株式会社シグマアイ（本社：東京都港区、代表：大関真之・観山正道）と共同で、材料探索を加速化する量子アニーリングの応用に関し、化合物探索や組成配合最適化といった具体的な事例について応用実証研究を開始しました。

通常、製品開発の場面では、最適な開発品を生み出すために試作と評価を繰り返す必要があり、時間もコストもかかっています。三井化学とシグマアイは、活用できるデータが少ない状況でもより少ない回数で希望する候補材料を選定する方法として、量子アニーリングを用いたブラックボックス最適化技術（図 1）に注目しました。

ブラックボックス最適化 = より少ない手数で望ましい解を探索する技術

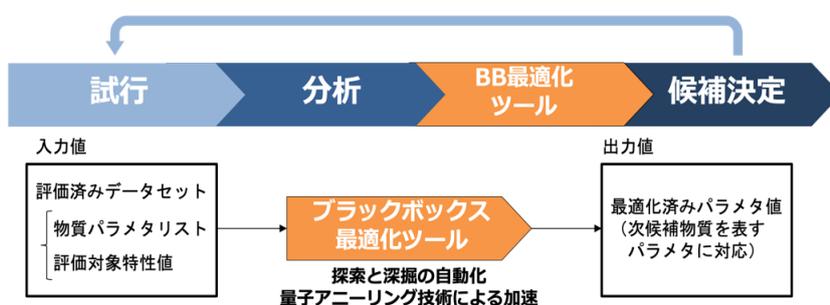


図 1. 量子アニーリングが加速するブラックボックス最適化

実験的手法や計算科学的手法、データ科学的手法といった製品開発の様々な手法において、分析と候補決定の間に、量子アニーリングを用いたブラックボックス最適化技術を組み込むことで（図 2）、選定される候補の精度が上がり、従来より、最適解を得るまでの時間もコストも削減可能になります。

本検討により広く化学分野の DX 浸透が期待されるとともに、三井化学の更なる製品開発力、市場提案力の向上を目指します。



図 2. 製品開発の様々な手法に本最適化技術を組み込むイメージ図

◆量子アニーリングを用いたブラックボックス最適化技術とは

物性評価のように実験・測定しないとわからない評価値（ブラックボックス）を所望の値に近づけるための手法がブラックボックス最適化技術です。量子アニーリングマシンは量子の力を用いて主に組合せ最適化（離散最適化）問題を解くことのできる専用計算機であり、本取組で用いられるブラックボックス最適化技術の計算ボトルネック部分を高速化することが期待されています。本技術は、材料探索に限らず、さまざまな探索・最適化に用いることが期待されます。

■シグマアイ社紹介

シグマアイは、黎明期から発展期を迎える量子科学時代において、量子アニーリングマシンの性能の限界を超える独自の根幹技術を持ち、量子アニーリングの活用事例を豊富に持つ東北大学の研究成果を社会に還元するために、様々な研究開発機関、事業会社との共同開発を進める世界でも屈指のスタートアップ企業です。

顧客企業の皆様とともに、D-Wave Systems 社の量子アニーリングマシン（2019年7月に日本初の大型利用契約を締結）をはじめとした新しい計算基盤を用いた研究開発事業、および多くのユーザーの生活に寄り添い、身近でありながら、優しく社会に浸透するアプリケーション開発事業を行っています。

会社 HP : https://sigmailab.com/index_jp.html

<ニュースリリースに関するお問い合わせ先>

三井化学株式会社 コーポレートコミュニケーション部

(TEL : 03-6253-2100、

お問い合わせフォーム : https://form.mitsuichemicals.com/corporate/cc_pr_csr_ja)

株式会社シグマアイ 担当 : 小幡 メール : info@sigmailab.com