

02 мая 2024 г.

Промышленные и научные круги в сотрудничестве разрабатывают «алгоритм цифрового отжига» для ускорения проверки промышленных материалов.

Основная цель цифрового отжига — попытаться решить сложные проблемы, на решение которых традиционным вычислениям уходит слишком много времени, прежде чем квантовые компьютеры будут готовы к выполнению формальных операций. При поддержке Гос.Комитета по науке и технологиям Тайваня (National Science Council, NSC) проф. Цин-Жуй Чжан (Prof. Ching-Ray Chang) из Христианского университета Чун-Юань (Chung Yuan Christian University) и докторант Национального тайваньского университета (National Taiwan University) Цзянь-Хун Чжо (Chien-Hung Cho) в сотрудничестве с корпорацией Формоза Пластикс (Formosa Plastics Corporation) и Институтом информационной индустрии (Institute for Information Industry) провели совместные научные исследования, используя оборудование цифрового отжига от Fujitsu. Успешная разработка алгоритма цифрового отжига позволила значительно сократить время, необходимое для скрининга промышленных материалов, до 1/10 от исходного, а также оказала хороший ускоряющий эффект на синтез соединений в отрасли и поиск новых соединений.

После более чем двух лет длительных обсуждений и взаимодействия между экспертами в области химической инженерии, информационных технологий, физики и математики из промышленных и научных кругов, исследовательская группа при поддержке NSC разработала алгоритм цифрового отжига для скрининга циклических соединений и получила значительные результаты после запуска разработанного алгоритма в аппаратуре цифрового отжига Fujitsu третьего поколения с использованием параметров моделирования Quadratic unconstrained binary optimisation (QUBO), которая представляет собой полную базу данных химических соединений от Formosa Plastics Corporation. Оптимизация (QUBO), представляющая собой полную базу данных химических соединений от Formosa Plastics Corporation, результаты разработанного алгоритма были реализованы в аппаратном обеспечении цифрового отжига Fujitsu третьего поколения и достигли значительных результатов. Этот результат был выбран в качестве одной из обложек следующего номера журнала Industrial & Engineering Chemistry Research. Молекулы, отобранные с помощью алгоритма, были подтверждены на опытном заводе Formosa Plastics и в настоящее время проходят испытания в процессе производства ПВХ.

В настоящее время исследовательская группа работает над распространением разработанного алгоритма на другие соединения. С промышленной точки зрения, подобная технология скрининга имеет неограниченный потенциал для применения в области разработки материалов, не ограничиваясь ингибиторами, о которых идет речь в данной работе. Команда также работает над водопоглощающими материалами и добавками для аккумуляторов, а также предприняла первые попытки в области фотоэлектрических и каталитических материалов, демонстрируя потенциал для ускорения развития промышленности.

Цифровой отжиг позволяет решать сложные комбинаторные оптимизационные задачи за короткое время, выполняя параллельные вычисления в режиме реального времени. Цифровой отжиг лучше всего подходит для решения комбинаторных оптимизационных задач, таких как задачи о путешествующих клерках, задачи об упаковке и т. д. Исследования в области

использования технологии отжига и разработки программного обеспечения в настоящее время являются частью программы Quantum National Team.

Автором исследовательской работы является Чжо Цзяньхун из Тайваньского государственного университета (National Taiwan University). Среди других участников – проф. Чжан Цинжуй и Су Чжэнвэй из Христианского университета Чун-Юань (Chung Yuan Christian University), Чэнь Пинь-Хун, Линь Цзу-Вэй, Лю Синь-Хун, Ли Цзун-Си, г-н Ли Ин-Юань из Тайваньской компании Plastics Co. , Ltd. и г-н Юй Лянь-Бо из Совета по информационной политике, спонсором выступила компания Fujitsu Provide DA Hardware Technology.

Ссылка на оригинал:

<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.iecr.3c03331>

Контакты для СМИ:

Fang-Chun Liu

Program Manager

Department of Natural Sciences and Sustainable Development

National Science and Technology Council

TEL: +886-2-27377022

E-mail: fcliu@nstc.gov.tw