

Quantum Computing: Et nyt værktøj for kemi- og biotekniske ingeniører

Quantum Computing kan bruges til at studere en bred vifte af emner lige fra katalysators reaktivitet til komplekse optimeringer af produktionsanlæg. Teknologien kan således bidrage til udvikling af avanceret og effektiv terapi samt udvikling af mere effektive og mere miljømæssigt bæredygtige produktionsanlæg.

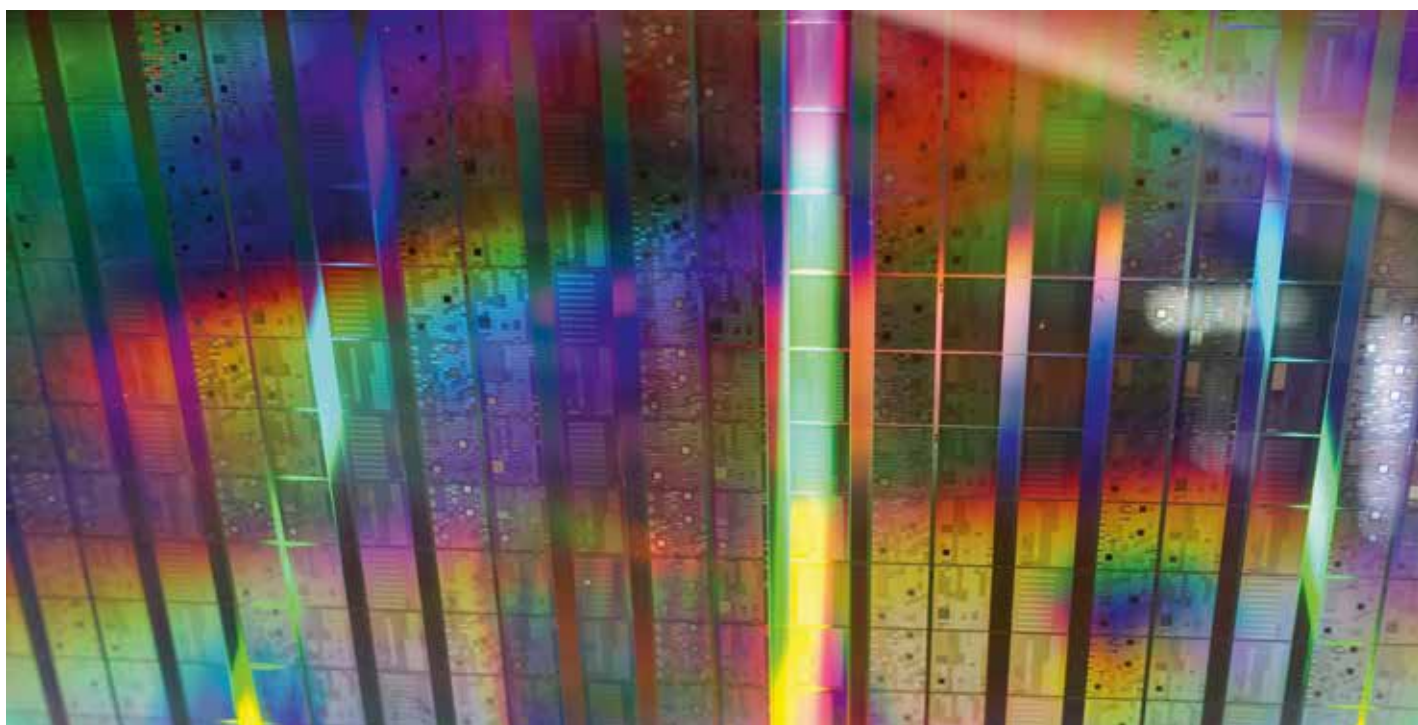


Foto: Wikimedia

Af Seyed Soheil Mansouri¹,
Matrin Peter Andersson¹, Izabela
Balicka² og Christian Beenfeldt³

¹ Institut for Kemiteknik, DTU

² AIChE - American Institute of Chemical
Engineers, New York

³ Knowledge Hub Zealand

Vi drager nytte af fordelene ved klassiske computere hver dag. Der er imidlertid mange typer af problemer, som - i

takt med at de vokser i størrelse, bliver så beregningsmæssigt komplekse, at klassiske computere aldrig vil kunne løse dem. Quantum computing (QC) er en beregningsmodel, der anvender kvantemekaniske materialeegenskaber til at løse sådanne problemer. QC befinder sig på et tidligt stadie af et omfattende indtog i forskellige områder af industrien, hvor der kan drages fordel af de algoritmiske hastighedsforøgelser,

som teknologien kan tilbyde. QC kan anvendes inden for en række områder som for eksempel datalogi, matematik, kemisk og biokemisk ingeniørvidenskab og inden for finansindustrien.

Udviklingen af de første kvantecomputere og "quantum advantage"

Kvantecomputere begyndte at vinde indpas i 1982, da fysikeren Richard

Feynman holdt et foredrag, hvor han forklarede, at klassiske computere ikke kunne behandle beregninger, der beskriver kvantefænomener, og at der derfor var brug for en QC-metode for at fjerne flaskehalse [1]. I midten af 1990'erne udviklede Peter Shor sin banebrydende algoritme, som beviste, at en kvantecomputer kan beregne primfaktorer af store tal eksponentielt hurtigere end klassiske computere, hvilket illustrerede styrken af denne nye teknologi [2]. I dag er et stigende antal virksomheder, startups og akademiske forskningslaboratorier afhængige af QC for at accelerere udviklingen af nye teknologier. Det forudses, at QC-markedet vil vokse hurtigt over de næste 10 år, især drevet af QC's anvendelsesmuligheder inden for farma, kemi og biologi.

Nogle af de problemer, som ingeniører i disse industrier skal løse, kræver en enorm stor beregningskapacitet/databehandlingskapacitet på grund af problemernes kompleksitet og størrelse, og de kan derfor ikke løses med klassisk computerteknologi. Udtrykket "quantum advantage" bruges til at beskrive, hvordan kvantecomputere kan anvendes til at løse problemer, som det ville være umuligt at løse med klassiske databehandlingsmetoder/beregningsmetoder. Kvantecomputere anvender sandsynligheder og sammenfiltring på en unik måde, som gør dem til et potentielt særligt nyttigt redskab til at løse mange af de optimeringsproblemer, som man kan støde på inden for natur- og ingeniørvidenskaben.

Kvantecomputere lagrer information i qubits, dvs. kvantebits. I modsætning til klassiske bits, der eksisterer som enten 0 eller 1, eksisterer qubits i superpositioner af 0 og 1 og bruger sammenfiltring og interferens mellem en række af qubits til at løse en beregning med et stort antal udfaldsområder. Når quantum advantage er opnået, anslås det, at en kvantecomputer med kun et par hundrede qubits vil kunne udføre flere beregninger samtidig, end der er atomer i det kendte univers [3]. QC-teknologien har vist sig at have særligt stort potentiale til at løse problemer, som involverer kemi, kunstig intelligens, optimering, simulering, komplekse sammenhænge mellem indbyrdes forbundne elementer samt problemer med store datasæt, der ligger uden for de klassiske computers skaleringsgrænser [4].

Bidrag til bæredygtighed og optimering i cancerbehandling

QC-værktøjet har også adskillige relevante anvendelsesmuligheder inden for miljø- og biomedicinsk ingeniørvidenskab. Da QC kan bruges til at undersøge katalysators reaktivitet, kan oplysningerne fra QC-beregninger hjælpe ingeniører med at erstatte nuværende fremstillingsproceskatalysatorer med katalysatorer, der har en mindre miljøbelastning. For eksempel tegner kemiske katalysatorer, der anvendes i gødningsproduktionen, sig i øjeblikket for to procent af de globale kuldioxidudledninger og kan potentielt erstattes, hvis vi har de nødvendige værktøjer til

at undersøge alternative muligheder [5]. Desuden kan QC hjælpe ingeniører med at afdække billigere og mere effektive katalysatorer til kulstofopsamling end dem, der anvendes i øjeblikket, hvilket kan bidrage til at fremskynde tilpasning til teknologien [6].

Ingeniører inden for biomedicin har påvist, at QC kan have forskellige anvendelsesmuligheder inden for sundhedssektoren som for eksempel udvikling af forbedrede kræftbehandlingsmetoder. Computerne kan for eksempel analysere tusindvis af variabler for at udvikle strålingsplaner, der er rettet mod kræftceller med den ideelle dosis og det ideelle mål uden at skade raske celler [7]. QC er også blevet anvendt til at forstå diagnostiske billeder ved hjælp af maskinlæringsværktøjer. Inden for lægemiddeludvikling kan QC-værktøjer reducere tiden og forbedre resultaterne i forbindelse med "in silico"-lægemiddelforskning [8].

QC-teknologi er allerede ved at blive anerkendt af en række fremtrædende virksomheder. Google har bygget en kvantecomputer, der kan simulere en simpel kemisk reaktion [9]. Exxon-Mobil udvikler QC-teknologier til optimering af elnet, mere forudsigelig miljømodellering samt nye materialer til kulstofopsamling [10]. De japanske kemivirksomheder JSR og Mitsubishi Chemical har sluttet sig til IBM Q Hub på Keio University for at få adgang til kvantecomputere på 20 og 50 qubit, som kan undersøge unikke virksomhedsløsninger [11]. Øget støtte fra private equity og venturekapital har medført, at flere nystartede virksomheder specialiserer sig i at bruge QC-teknologi til en række forskellige formål.

Fremtiden

QC's potentiale realiseres allerede på tværs af mange forskellige områder, selvom det er en ny teknologi, der befinder sig på et tidligt udviklingsstadium, og som kræver langt mere udvikling med hensyn til hardwarekapacitet, tilpasning af løsningsstrategier for at udnytte anvendelsesmuligheder samt reelt at løse virkelige problemer. I denne sammenhæng er forbindelsen mellem kemisk og biomolekylær produktdesign og QC blevet diskuteret. Kemisk og biomolekylær produktdesign har i vid udstrækning draget nytte af computerunderstøttede metoder og værktøjer ved hjælp af klassiske computere. I forbindelse med produktudvikling af mere bæredygtige processer som for eksempel udvikling af grønne opløsningsmidler, mere effektivt procesdesign, integreret proces-produkt-design samt udvikling af nye lægemidler

■ Vi finder følgende områder inden for kemisk produkt-procesdesign relevante i forhold til at bruge QC-metoder fremover:

- **Hybride QC-metoder.** Disse vil sandsynligvis komme til at spille en vigtig rolle, da mange multivariable problemer vil blive løst optimalt ved hjælp af en kombination af "dyre" QC-ressourcer og "billige" klassiske databehandlingsressourcer. Front-end-applikationer, der kan optimere forholdet mellem QC og klassiske databehandlingsressourcer, vil sandsynligvis også være nyttige, såvel som understøttende trænings- og uddannelsesinitiativer vil komme til at spille en vigtig rolle.
- **Identificering af optimeringsudfordringer.** Identificering af relevante udfordringer, der kan anses som optimeringsudfordringer, og som kan løses med kvantecomputere. QC skal ikke erstatte alle eksisterende former for beregninger.
- **Anvendelse af QC i kombination med maskinlæringsmetoder.** Anvendelse af QC (hybrid eller "stand-alone") kombineret med maskinlæringsmetoder kan give betydelige fordele ved udvikling af multivariable statistiske procesovervågnings- og fejlagnosesystemer.
- **Computerbaseret modellering af kvantemekaniske systemer** som for eksempel molekyler, herunder forudsigelser af molekylers egenskaber, struktur og reaktivitet, vil sandsynligvis blive meget mere præcis ved hjælp af QC, hvilket vil få direkte indflydelse på områder som for eksempel opdagelse af lægemidler og design af kemiske specialmaterialer.

AICHe var sammen med DTU Kemiteknik og Knowledge Hub Zealand vært for workshoppen "Quantum Computing Applications in Chemical and Biochemical Engineering Workshop" (www.aiche.org/qc) der blev afholdt den 1.-3. april 2022 i København. Workshoppen var finansieret af Novo Nordisk Foundation.

eller vacciner til en fremtidig pandemi, kan der imidlertid drages fordel af nye beregningsværktøjer som for eksempel QC. Ligesom QC også ser ud til at kunne anvendes inden for procesdesign, -styring og -overvågning.

Der er blevet identificeret adskillige behov og udfordringer, og der er blevet givet specifikke forslag til, hvordan QC kan anvendes i denne sammenhæng [12]. Vi forudser rige muligheder for at udnytte QC til at udvikle og designe mere effektive, økonomiske og bæredygtige produkter og kemiske processer i en ikke så fjern fremtid.

E-mail:

Sayed Soheil Mansouri: seso@kt.dtu.dk

Referencer:

1. Gamble S. Quantum Computing: What It Is, Why We Want It, and How We're Trying to Get It. In: National Academy of Engineering. Frontiers of Engineering: Reports on Leading-Edge Engineering from the 2018 Symposium. Washington (DC): National Academies Press (US); 2019.
2. <https://news.mit.edu/2019/mit-professor-peter-shor-wins-micius-quantum-prize-0426>.
3. <https://www.technologyreview.com/2018/02/21/145300/serious-quantum-computers-are-finally-here-what-are-we-going-to-do-with-them/>.
4. <https://www.ibm.com/downloads/cas/8QDQKZJ>.
5. <https://karmainpact.com/quantum-computers-harnessed-to-solve-climate-change-may-be-on-the-horizon/#:~:text=Quantum%20computers%20will%20help%20the,CO2%20emissions%2C%20expert%20tells%20panel>.
6. <https://www.weforum.org/agenda/2019/12/quantum-computing-applications-climate-change/>.
7. Solenov, D. The Potential of Quantum Computing and Machine Learning to Advance Clinical Research and Change the Practice of Medicine. *Mo Med*. 2018, 115(5): 463-467.
8. <https://cen.acs.org/business/informatics/Lets-talk-quantum-computing-drug/98/i35>.
9. Savage, N. Google's Quantum Computer Achieves Chemistry Milestone. *Scientific American*; 2020 Sept 4.
10. IBM.
11. IBM.
12. Andersson, M.P., Jones, M.N., Mikkelsen, K., Fengqi, Y., Mansouri, S.S. Quantum computing for chemical and biomolecular product design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2022, 36, 100754.

Kvalitetssikring af manuelle plukke- og samleprocesser

Af Klaus Hansen, journalist

Ifm har lanceret et nyt kvalitetssikrings-system til overvågning af manuelle plukke- og samleprocesser. Systemet bygger på moderne billedbehandling kombineret med kunstig intelligens.

Det kan være for omkostningskrævende for virksomhederne at automatisere plukke- og samleprocesser. Her må man ty til pakkeoperatører - der manuelt plukker, samler og pakker produkterne. Som bekendt laver mennesker fejl - men naturligvis er det også her nødvendigt at sikre en høj kvalitetsstandard. Til dette formål har ifm bragt en løsning på markedet, nemlig ifm mate. Dette kvalitetssikringssystem overvåger ved hjælp af et kamera pakkeoperatørens hænder - og giver enten en akustisk alarm eller blink fra en lampe, hvis hænderne foretager sig noget "forkert", dvs. at plukke- og samleprocessen ikke forløber korrekt.

Systemet kan anvendes i alle industrier, hvor der udføres en manuel plukning af emner, der efterfølgende samles til et færdigt og salgsklart produkt. Et eksempel på anvendelse kunne være i medicinalindustrien ved manuel montage af medicinske enheder. Særligt i medicinalindustrien er kvalitetssikring i produktionen vigtigt. Et andet eksempel kunne være i elektronikindustrien, når de forskellige komponenter samles og monteres til de færdige og salgsklare produkter.

Systemet anvender kunstig intelligens

Systemet består af et 2D/3D-kamera (optisk sensor), der holder øje med, hvad pakkeoperatørens hænder foretager sig. Data fra kameraet behandles i et billedbehandlingsprogram, og ved hjælp af kunstig intelligens vurderer systemet løbende, om medarbejderne plukker og samler produkterne korrekt.

Som grænseflade til pakkeoperatøren anvender ifm mate normalt en touchskærm, der placeres foran medarbejderen.

De forskellige plukke- og samleprocesser defineres fleksibelt i softwaren. Konfigurering af ifm mate til de forskellige samleopgaver er nem, og der er ikke



Med Ifm's nye kvalitetssikringssystem er det muligt at kvalitetssikre manuelle plukke- og samleprocesser. Pakkeoperatøren griber her ud efter en momentskruetrækker med sin højre hånd. Hun er ved at samle en ifm sensor. Hvis hun laver en plukke- eller samlefejl, så vil systemet straks afgive en alarm, og hun får mulighed for at rette op på fejlen. Derved sikres det, at fejlbehæftede produkter ikke forlader hendes arbejdsstation.

behov for programmering eller særlige it-kyndige til at køre systemet ind. Ligeledes er systemet fleksibelt og kan hurtigt ændres til overvåge og kvalitetssikre andre tilsvarende plukke- og samleopgaver i virksomheden.

Systemet kan suppleres af en alarmdel, der afgiver et lyd- eller lyssignal, hvis pakkeoperatøren laver fejl i sit arbejde. Hvis systemet således registrerer en plukke- eller samlefejl, skal operatøren kvittere på touchskærmen - og herefter udføre arbejdet korrekt. På den måde sikres det, at alle de produkter, der forlader pakkeoperatøren, ikke er fejlbehæftede. Det betyder en forbedret og mere ensartet produktkvalitet - og et betydeligt fald i antallet af reklamationssager.

Yderligere information:

Ifm

Ole Jørgensen

Tlf. 43 35 07 06

ole.jorgensen@ifm.com