

Title	物理と情報の間の新領域を切り拓く面白さ： 量子という物理現象の本質を申し分なくコンピューティングに生かしていく
Sub Title	
Author	由利, 伸子(Yuri, Shinko)
Publisher	慶應義塾大学理工学部
Publication year	2024
Jtitle	新版 窮理図解 No.40 (2024. 9) ,p.2- 3
JaLC DOI	
Abstract	
Notes	慶應理工の量子アニーリング：物理学と情報工学のフロンティアに挑む 物理情報工学科 田中宗 (准教授) 研究紹介
Genre	Article
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KO50001002-00000040-0002

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

物理と情報の間の 新領域を切り拓く面白さ

量子という物理現象の本質を申し分なく
コンピューティングに生かしていく

“モノを扱う物理の言葉で、コトを扱う情報を理解できる”、これをあるときに知った学部時代の感動が、田中さんの研究の原点だ。今や物理と情報の境界は科学の最先端にある。田中さんは、量子ゆらぎを使ったアニーリングによる計算手法で、組合せ最適化問題を解き、配送計画、生産システム、新材料開発など様々な分野の効率を画期的に高めようとしている。

世界は組合せ最適化問題で できている？

朝起きて、今日はどの服を着るのか、朝食は何を食べるのか、学校や仕事場までどういう道筋でいくのかなど、私たちは様々な選択肢から、格好よさ、コストパフォーマンス、安全など、いろいろな評価基準をもとに次々と選択している。「このように、多数の選択肢から評価基準に基づいて最もよい選択肢を選ぶコトを、『組合せ最適化問題』といいます」と田中さんは説明を始める。

仕事や産業の場にも、荷を配る、機械や機器を動かすなど、各種の工程におけ

る効率的な順番といった組合せ最適化問題が無数にある。この問題の難点の1つは、荷を届ける場所が多くなると、組合せの選択肢の数が爆発的に増えてしまうことだ。「そこで、工夫された問題の解き方(アルゴリズム)が必要になります。その中で最近注目を集めているのが、組合せ最適化問題を高速に解くことが期待されている量子アニーリングの出番になることです」(図1)。

物理現象を計算手法として使う

量子アニーリングは、最適化問題に対する効率の良い計算方法として知られている。現在注目を集めている量子コンピューティングの一種であり、物理学と情報工学の境界領域に位置づけられている。

「最適化するということは、何かを『最大化』あるいは『最小化』することです。どちらも数学的には取り扱い方は同じです。ここでは、最小化する場合を考えてみましょう。一般に物理学では、エネルギーが低い状態を安定状態とみなします。量子アニー



図1 荷の配送計画の最適化

量子アニーリングを用いることで、「どのような順番で荷を配送すれば効率が良いか」といった解を高速に探索することが期待されている。

リングと呼ばれる計算手法は、この考え方を組合せ最適化問題に適用するように作られています。つまり、エネルギーが低い安定状態を探索することで、組合せ最適化問題の最適解を探索する、という考え方です。

アニーリングを日本語訳すると“焼きなまし”のことであり、材料工学で使われる用語である。合金を生成する際、合金の成分である金属原子を熱によってバラバラにし、温度をゆっくり下げていく。この工程によって安定した原子配列が生成される。このような現象から着想を得た計算方法がシミュレーテッドアニーリングと呼ばれる方法である。シミュレーテッドアニーリングでは熱を用いるが、量子アニーリングでは熱の代わりに量子ゆらぎを用いる。量子ゆらぎがある場合、量子ビットに書き込まれた値は0と1の量子重ね合わせになる。その状態から量子ゆらぎを弱めていくと、0あるいは1に収束して安定な状態になり、その時に示される値が組合せ最適化問題の解となる。

「量子アニーリングは、私が2002年に卒業研究のために入った東京工業大学(2024年10月より東京科学大学)西

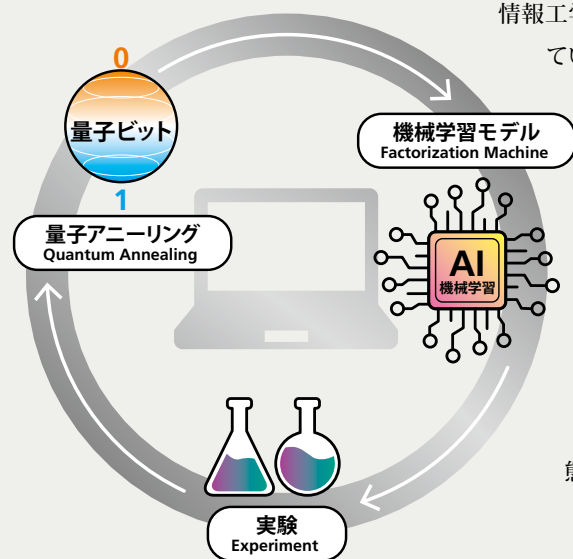
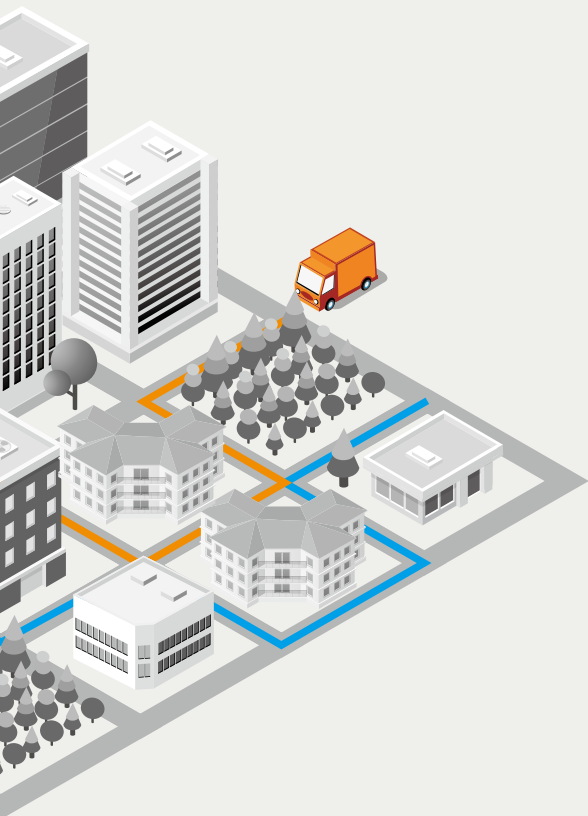


図2 量子アニーリングとAIとを組み合わせた新たな計算手法であるFMQA

いくつかの実験結果をもとに機械学習を用いてイジングモデルあるいはQUBO形式の関数にし、量子アニーリングマシンで計算する。すると、その時点の良い解が出てくる。この解は次に実験すべき実験条件を示している。この過程を何度か繰り返して、望む性能を実現する実験条件を得ることが期待される。



森研究室の西森秀穂先生のグループが1998年の論文で示した計算手法です。まさに西森研究室は物理で情報を扱う研究室でした。

量子アニーリングなど自然現象のメカニズムを計算手法とするものは自然計算(Natural Computing)と呼ばれている。中でも量子アニーリングは、2011年にカナダのD-Waveが世界初の量子アニーリングマシンの商業化に用いた計算手法ということもあり、注目度は高い。

AIと量子アニーリングの融合

量子アニーリングという計算手法を使

うには、問題を「イジングモデル」あるいは「Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO)」と呼ばれる形式の関数にしなければならない。しかし、これらの関数にするのが簡単な問題もあれば、難しい問題もある。そもそも関数として表現できない問題もある。

「社会課題に関連する組合せ最適化問題に取り組むときには、まず、問題ごとにすでに決まった型のようなものがあるので、類似の型がないか過去の研究事例を参考にしたり、それをさらに発展させたりして、最適化する関数を構築します。また、まったく新しいタイプの組合せ最適化問題に出合ったとき、どのように関数を構築するかを考える能力が、私たちプロの研究者の大きな強みだと思っています」。田中さんは、その豊かな経験と鋭い勘どころで、広告配信、旅行計画、交通、集積回路設計などの最適化のアプリケーションを、様々な企業と組んで実現してきた。そして、今、田中さんが力を入れているのがAI(機械学習)と量子アニーリングの融合だ。これに目を向けたのは博士課程の時だという。

「情報工学の研究を進めていた友人と『機械学習と量子アニーリングを組合せたら面白いことができるのでは……』と話したのが始まりです。2009年には、これに関して、人工知能系の国際学会で発表しました。学位を取得してからしばらくは、ほとんど量子アニーリングの研究をしていなかったのですが、この論文に興味を持った企業の方からの連絡が、量子アニーリング研究復活の端緒になりました」。

そして、東京大学や物質・材料研究機構の先生方などと研究に関する議論を重ね、「問題をイジングモデルやQUBO形式の関数にする」ところを機械学習で行う「FMQA (Factorization Machine with Quantum Annealing)」の発想に行き着き、その計算方法を構築することに成功した。現在、FMQAを使った各種アプリケーション開発や、FMQAのさらなる発展を目指した研究開発を精力的に行っている(図2)。

「例えば、複数の物質を混ぜることで、電気がよく流れる新規物質を開発したい時、実験科学者なら、まずは複数の物質を様々な割合で混ぜて電流を測定し、この配合比ではこれだけ電気が流れるというデータをいくつか出すでしょう。FMQAでは、このいくつかのデータをもとに機械学習でイジングモデルやQUBO形式の関数を作ります。そして量子アニーリングマシンでこの関数の最適解を探索する。この時に出てくる解は、次に実験で試すべき配合比を表しています」。

いわば、実験結果を見て次の実験に繋げる実験科学者の「勘どころ」を量子アニーリングが代替しているわけだ。これに従って行った実験結果をもとに再びFMQAを実行する。この過程を繰り返すと関数の精度がしだいに高くなっていき、最終的に望む性能をもつ材料の配合比を探索することが可能になると期待される。

「この方法を使った様々な材料探索やその他のアプリケーション開発に、企業や大学と一緒に取り組んでいます」(図3)。

FMQAの論文は2020年に発表されたが、材料分野はもちろんのこと、いろいろな分野の人が興味をもっているようだ。

「『まだ発表できませんが、FMQAを使った研究を手がけています』と声をかけてくださる企業の方が結構いらっしゃいます」。FMQAは、実験やシミュレーションといった試行錯誤を繰り返し、これを繋げながら実態を解明していくもの、いわばブラックボックスに対する最適化のツールだという。「FMQAを通じて、様々なブラックボックスの最適化の事例が出てくることを、私自身非常に楽しみにしています」。

(取材・構成 由利伸子)

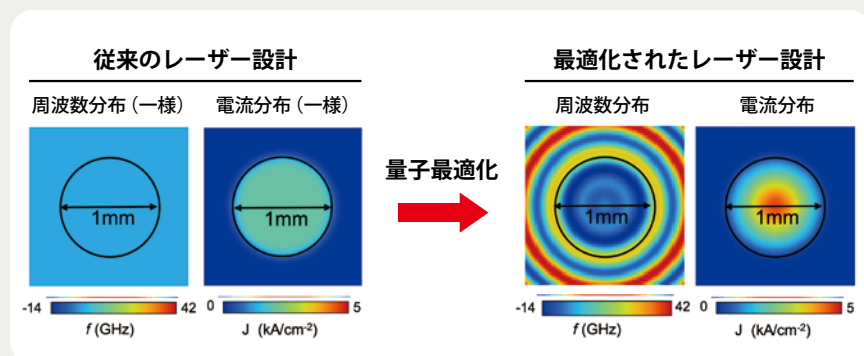


図3 量子アニーリングによるフォトニック結晶レーザーの構造最適化の結果

従来設計の場合(左図)と量子アニーリングを利用した場合(右図)とでは、周波数分布と注入電流分布がまったく異なっており、非自明な空間分布をもつデバイス構造が得られていることが分かる。