

2024年1月30日

報道機関 各位

国立大学法人東北大学

## 量子アニーリングとAIで材料の新しい組成を発見 工場での製造工程最適化や生物分野などへの活用拡大に期待

### 【発表のポイント】

- 化学材料の組成探索において、量子力学の現象を利用した最適化手法である量子アニーリング<sup>(注1)</sup>と人工知能(AI)の機械学習を活用することで、これまで未探索であった目標特性値を持つ新規化学材料の組成を発見しました。
- 量子アニーリング技術の従来の最適化という目的に応じた活用だけでなく、量子力学に基づく探索という性質を最大限利用するという新しい活路での応用例に取り組み、その実証研究に成功しました。
- 本研究結果は、材料組成のみならず大きく化学分野や生物分野など活用の幅を大きく広げる進歩であり、量子アニーリング及び関連技術の実社会課題への応用、適用を後押しする結果です。

### 【概要】

これまで材料の新規組成探索では、様々な組み合わせを探索し提案された候補組成について、スーパーコンピュータによるシミュレーションを行い、その組成の物性評価を実施する必要があります。そのため膨大な時間がかかる探索を効率よく実施することが求められています。

東北大学大学院情報科学研究科大関教授らの研究グループは、韓国電機大手LG Electronicsグループの日本での研究法人LG Japan Lab株式会社(横浜市・呉彰浩社長)と、化学材料の組成探索を量子アニーリングとベイズ最適化<sup>(注2)</sup>と呼ばれる機械学習技術を連携し、新規組成探索というテーマにおいて共同研究を実施してきました。その結果、これまで未探索であった目標特性値を持つ新規化学材料の組成を発見しました。

本研究にて検証を行った手法は、化学材料の組成探索に限らず、創薬分野での候補物質の探索や、都市の人流シミュレーションや製造工程におけるパフォーマンスの評価など高度で複雑な現象における新しい解決手段の探索など、広く産業分野の実社会課題への適用が期待されます。

本研究成果は、2023年12月12日にコンピュータ分野の専門誌Frontiers in Computer Scienceに掲載されました。

## 【詳細な説明】

### 研究の背景

量子力学を利用した新しい形式の計算技術として、量子コンピューティング技術が期待と注目を集めています。特に量子アニーリングと呼ばれる計算技術は、パズルのように無数の組み合わせの中から最も良い答えを選択する組合せ最適化問題に対する解法として提案され、実社会課題への応用が強く期待されています。近年では実際に量子アニーリングの原理に従い動作する量子アニーリングマシンが開発されて、その性能を発揮して実社会で効率的に組合せ最適化問題を解決していこうという機運が高まっています。ただしその利用には、数式によるプログラミングが必要となり、いわばパズルのルールを明示的に書き下す必要がありました。

一方で複雑な化学現象を背景に持つ材料の開発、実際の動作がもたらす影響を考慮する必要のあるロボティクス、複雑なルールの絡んだ工程を含む製造プロセスなどの分野で、明示的に数式で表現することが困難である場合や、得られた結果を実際に検証する時間的・資源的なコストがかかる場合には、量子アニーリングマシンの計算速度の恩恵を受けることが難しいという問題がありました。

### 今回の取り組み

大関教授率いる研究グループは LG Japan Lab 株式会社との共同研究において、量子コンピューティング技術において注目されがちな計算の速度という観点ではなく、量子力学を利用した効率的な探索性能に注目して、実際の化学材料の組成探索において、量子アニーリングマシンとベイズ的最適化という枠組みを利用して、これまで未探索であった目標特性値を持つ新規化学材料を発見することに成功しました。<sup>(図1)</sup>

科学的に新しい帰結を得るために膨大なデータを対象にした分析を行う学問をデータ駆動科学と呼びますが、本研究成果は、量子アニーリングによるデータ駆動科学の端緒を開く画期的な成果となります。

### 今後の展開

本研究で用いたアプローチは、化学材料の組成探索に限らず、製造工程の最適化など、産業の実社会課題への適用も期待できます。今後も東北大学は、日本を代表する量子ソリューション拠点として、基礎研究から得られた知見を、企業との共同研究などを通じて様々な産業の課題を解決し社会に還元していきます。

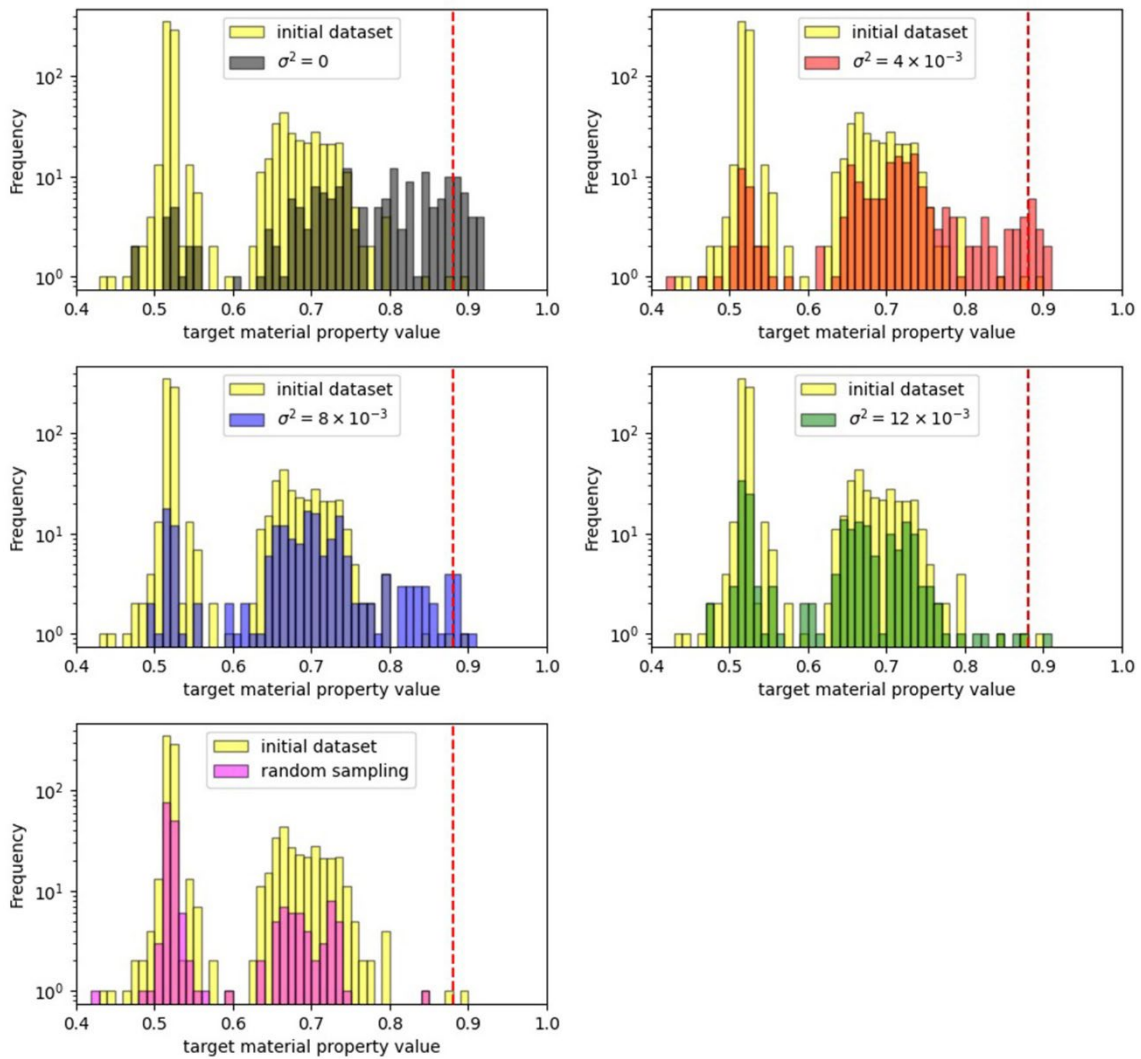


図 1. 縦軸が得られた頻度、横軸が物性値です。赤い点線は、望ましいターゲット材料特性値として定義したカットオフ値 (0.880) を示し、ここに相当するデータが多く生成されることを目指しています。最下部の random sampling の結果と比べ、4つの図で示す提案手法については初期データセットからカットオフ値に近いものを多く生成している様子が読み取れます。

### 【謝辞】

本研究は日本学術振興会科研費(課題番号:JP23H01432)および、文部科学省「光・量子飛躍フラッグシッププログラム(Q-LEAP)人材育成プログラム【独創的サブプログラム】実践的研究開発による全国的量子ネイティブの育成」(JPMXS0120352009)、内閣府「官民研究開発投資拡大プログラム(PRISM)「量子技術領域」:量子アプリ開発を支援する民間研究開発環境の整備」、内閣府「研究開発と Society 5.0 との橋渡しプログラム(BRIDGE):量子プロダクト事業化推進プラットフォーム構築事業」の支援を受けて実施されたものです。

## 【用語説明】

### 注1. 量子アニーリング

極低温において、原子や分子などの非常に小さいスケールでは、結果が確率的に変動する「量子揺らぎ」が存在します。これを利用して揺らすことでひっかかりのない安定した配置へ誘導する量子アニーリングと呼ばれる技術が1998年に東京工業大学の当時大学院生であった門脇正史氏(現:デンソー株式会社)、西森秀稔名誉教授から提案されました。カナダのベンチャー企業であるD-Wave Systems社が量子アニーリングの原理に従ったコンピュータを製作して販売をしています。原子や分子の振る舞いを調べる量子シミュレーションや、様々な可能性の中で最も良い回答を探索する最適化問題、人工知能の基盤技術となる機械学習への応用などが注目されています。この量子アニーリングでは、量子揺らぎにより、デジタル信号処理における0と1の重ね合わせ状態を作ることができます。この重ね合わせを巧みに利用することで、どちらの状態にあるのが最も相応しいのか、組み合わせ最適化問題における解答を探索することができます。

### 注2. ベイズ最適化

可能な限り少ない回数でブラックボックス関数の性質を理解し、この関数を最適化することを実現する為の手法です。基本的な考え方を記載します。まず、既存のデータセットからブラックボックス関数をモデル化する代理関数を定義します。代理関数に基づき、ブラックボックス関数の次の探索点を決定する獲得関数を定義します。獲得関数を最適化することで得られた次の探索点を実際にブラックボックス関数で評価し、得られた入出力関係を既存のデータセットへ追加し、代理モデルを更新します。この手続きを反復することでブラックボックス関数の最適化を目指します。

## 【論文情報】

タイトル: Exploration of new chemical materials using black-box optimization with the D-wave quantum annealer

著者: Mikiya Doi, Yoshihiro Nakao, Takuro Tanaka, Masami Sako, and Masayuki Ohzeki\*

\*責任著者: 東北大学大学院情報科学研究科 教授 大関真之

掲載誌: Frontiers in Computer Science Theoretical Computer Science

DOI: 10.3389/fcomp.2023.1286226

URL:

<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fcomp.2023.1286226/abstract>

**【問い合わせ先】**

(研究に関すること)

東北大学大学院情報科学研究科

教授 大関 真之

Email: mohzeki@tohoku.ac.jp

TEL: 022-795-5899

(報道に関すること)

東北大学大学院情報科学研究科

広報室 鹿野 絵里

TEL: 022-795-4529

Email: koho@is.tohoku.ac.jp