

令和 2 年 6 月 22 日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14357

研究課題名(和文)量子アニーリングのデータ解析への多面的な展開

研究課題名(英文)Application of quantum annealing for data analysis

研究代表者

橋爪 洋一郎 (Hashizume, Yoichiro)

東京理科大学・理学部第一部応用物理学科・講師

研究者番号：50711610

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：量子アニーリングは効率的に最適化問題を解決できる量子計算法として知られている。本研究では最適化問題に制限されることなく、一般のデータ解析に使用することを目指した。1つは熱電材料の性質を示す重要な関数であるスペクトル伝導率が、量子アニーリングを利用して観測可能な電気伝導率とゼーベック係数から推定できることがわかった。もう1つはセンサーネットワークへの応用である。建築物などに設置されたいくつものセンサーから重要な部分を抽出するためには、深層学習を補足的に使用してこの抽出を行うことができる。さらに、量子アニーリングをデータ分析に広く適用するためにエントロピーを基準にする効率的な時間発展が提案できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

世界中のいたるところをセンサーが結ぶIoT(Internet of Things)社会が実現した際には、集積された莫大なデータを解析することが必要になる。大規模なデータを適切に処理し、有益な情報を手に入れるためには、データ処理にむけた技術が必要とされる。本研究ではこの要求に応えることを目指して、情報統計力学の生んだ強力な手法である量子アニーリングをより一般的かつ多面的に大規模データの解析へと活用できる、新しい例を示すことができた。具体的な材料やデバイスへの応用可能性が示され、今後の様々な応用につながるという。

研究成果の概要(英文)：Quantum annealing is an efficient method to solve optimization problems by using quantum physics. In the present study, we have investigated the usage of quantum annealing without limit to optimization problems. And we clarified two important applications. One is an application to clarify the details of the thermoelectric materials. We show that spectral conductivity can be estimated by observable parameters, namely electrical conductivity and Seebeck coefficients, using quantum annealing. This is an inverse problem of integral equations. Another is applications to sensor networks. Sensors set on buildings give us a lot of information. We have to extract important parts of the information. We tried this extraction by quantum annealing with supplementally using deep learning methods. Furthermore, for giving the wide application of the quantum annealing for data analysis, and efficient time schedule is required. We found that entropy plays a sufficient role to find the time schedule.

研究分野：数理物理・物性基礎

キーワード：量子アニーリング データ解析 材料・デバイス応用

1. 研究開始当初の背景

量子アニーリングは1998年に門脇・西森によって提案され、最適化問題を解く汎用的な技術として、今も強く期待されている。2011年5月にカナダのD-Wave社が量子アニーリングを実行できる商用量子コンピュータとしてD-Wave Oneを発表して以来、それまで実現困難とされていた量子コンピューティングが急激に現実味を帯びてきていた。

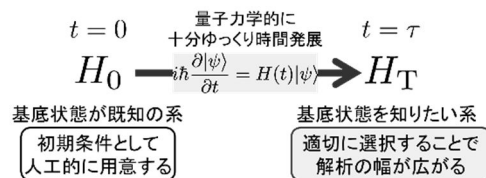
一方で、古典計算によるビッグデータ解析手法の開発が独立に並行して進んでいた。例えば、日本のCREST課題「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」や米国で2012年に発表された「ビッグデータイニシアティブ」などである。

このような背景を踏まえて、ここではまず、本研究の意図を明確にするため、本研究で対象とした量子アニーリングの基本的な事柄と、研究開始当初の研究提案の意図について述べる。量子アニーリングは、量子断熱定理に基づいて、複雑な多体系の基底状態(最低エネルギー状態)を得るための強力な方法である。基底状態を知りたい多体系のハミルトニアンを H_T とし、この系の基底状態を求めるのが難しいとする。そこで、基底状態が容易に得られる別の系(ハミルトニアンは H_0 とする)を用いて、例えば

$$H(t) = t/\tau H_T + (1 - t/\tau) H_0 \quad (1)$$

などのような、時間 t に依存するハミルトニアン $H(t)$ を用いることにする。ここで、 τ は時間スケールを表す定数で、計算時間に相当する。実際、(1)式では、 $t=0$ の時には初期条件 $H(t=0) = H_0$ であり、終状態 $t=\tau$ においては $H(t=\tau) = H_T$ である。さて、基底状態を探索するために、初期条件として H_0 の基底状態を用意する。量子断熱定理によれば、 τ を十分に大きくしてゆっくりと時間発展させれば、終状態まで状態は基底状態にとどまり、 $t=\tau$ において $H(t=\tau) = H_T$ の基底状態を与えることがわかる。

これが量子アニーリングの基本的な手続きである(右図)。例えば、複雑な多体系 H_T として最適化問題におけるコスト関数を表す系(しばしば横磁場イジングモデルが利用される)を用意すれば、この最適化問題を解決することに利用できる。



ところで、研究開始当時には半導体や誘電体の技術発展により、世界中のいたるところをセンサーが結ぶIoT社会が目前に迫ってきていた。これが実現した場合には、集積された莫大なデータを解析することが必要になることは容易に予想できることであった。本研究ではこの要求に応えるため、量子アニーリングを用いた、より一般かつ多面的なデータ解析への応用を提案することを意図していた。

2. 研究の目的

本研究では期間中(2017年度から2019年度の3年間)に次の3つの項目を実施することを目的とした。

- I. 量子アニーリングによる特異値分解・主成分分析のより詳細な検討
- II. データ解析への量子アニーリングの適用手法の開発
- III. 材料・デバイスへの応用展開

研究代表者は、この研究課題の発足前に量子アニーリングを用いて特異値分解を実施し、主成分分析等が実行できることを既に示していた。目的Iではこの手法がノイズやデータサイズに応じてどの程度有効であるかを検討する事が目的とされた。目的IIでは特異値分解に限定されないデータ分析として逆問題を対象に据え、実施可能であるかどうかを検討することを目的とした。目的IIIではそれまでに得られるであろういくつかの知見を、材料やデバイスへと応用する事を目的とした。

それぞれの目的は2つ程度のテーマからなる。目的Iは「ノイズの影響をどの程度受けるかについての検討」および「データの階層性やデータサイズに対する影響の検討」を含む。目的IIは「逆問題の解決方法の構築」および「より複雑なデータ解析に有効な量子アニーリングの実行基準の探索」を含む。目的IIIは「熱電材料に対する逆問題としてのデータ解析」および「センサーネットワークから得られる情報からの逆問題解析」を含む。これらのテーマからなる3つの目的を段階的に解決することで、量子アニーリングによるデータ処理の精度を知り(目的I)、汎用的に扱えるデータの領域を拡張し(目的II)、具体的なデータに対する解析を実施する(目的III)ことが可能になり、最終的に本研究課題である「量子アニーリングのデータ解析への多面的展開」が達成されるといえる。

3. 研究の方法

量子アニーリングの振る舞いについての研究ではあるが、実際の量子アニーラーを用いるのではなく、解析的手法による理論的取扱いと古典計算機上でのシミュレーションを中心的方法として利用した。具体的な目的の解決に向けての取り組みを以下に記す。

目的 I の解決に向けて

研究代表者らは、既に量子アニーリングを用いてデータの特異値分解・主成分分析が可能であることを示していた。本研究全体の目標である量子アニーリングをより広くデータ解析へと展開するにあたって、これを詳細に検討しておくことは、後の一般化に向けた基礎となるだけでなく、新たな視点での理解にもつながることが期待できた。この項目は主に 2017-2018 年度を中心として実施した。

○ノイズの影響をどの程度受けるかについての検討

一般に、計測や観測によって得られるデータがノイズを含むことは避けられない。このようなノイズを除去する方法は、平滑化やフィルタリングといった方法が古典的には知られている。しかし、量子アニーリングを用いた特異値分解・主成分分析の方法では、それらの処理を特別に行わなくても、ある程度のノイズであれば同程度の結果が得られることが経験的にわかっていた。このことが、特異値分解そのものの性質であるのか、あるいは量子アニーリングを用いていることに起因するのかについて明らかにした。

○データの階層性やデータサイズに対する影響の検討

特異値分解・主成分分析の対象となるデータが階層構造を持つこと自体は決して珍しいことではない。例えば、社会データであれば、国別—地域別—都市別のように階層性が現れるであろうし、物質であれば、マクロスケールからミクロスケールという階層に応じて物性は変化する。研究代表者らはこのようなデータの最も極限的な場合として、どのスケールにも同じタイプのデータが現れる、という自己相似形(フラクタル)なデータを対象とした研究を実施し、階層数やデータサイズに対する量子アニーリングの実行時間を検討した。

目的 II の解決に向けて

目的Iの検討で得られた知見をもとに、より複雑なデータ分析を実施することを目指した。この項目は主に 2018-2019 年度に実施した。

○逆問題の解決方法の構築

逆問題と呼ばれる課題を扱った。逆問題は端的に言えば「得られたデータの背景を知るための解析手法」である。すなわち、本来は背景から演繹的に結果が生じることになるが、得られた結果がどのような背景にもとづくものであるかを知ろうとする問題群のことを指す。このような逆問題へのアプローチを量子アニーリングによって実施した。

○より複雑なデータ解析に有効な量子アニーリングの実行基準の探索

量子アニーリングでは、計算途中にノイズが強く影響するなどする複雑なデータになるほど、正答率を確保するのが難しくなる。そこでエントロピーに着目した量子アニーリングの実行基準を導入し、複雑なデータでも正答率を確保できるようにした。また、この発展として熱場ダイナミクスという量子統計力学の理論を援用して熱力学的状態距離を導入し、これを実行基準とすることが有効であることを確かめた。

目的 III の解決に向けて

目的IIで得られた逆問題への展開を、具体的な系として材料・デバイスへの応用として実施した。この研究は 2018-2019 年度を中心に実施した。

○熱電材料に対する逆問題としてのデータ解析

材料系としてはセラミックやカーボンナノチューブで構成される熱電材料を扱った。熱電材料では、状態密度などを強く反映したスペクトル伝導度を知ることが重要になるが、これを直接測定することは、定義上は絶対零度での測定が求められるため極めて難しい。そこで量子アニーリングによる逆問題解決方法を用いて、測定される電気伝導度やゼーベック係数からの逆問題としてスペクトル伝導度を調べた。

○センサーネットワークから得られる情報からの逆問題解析

また、デバイスとしてはセンサーデバイス(主に振動や加速度を検知するセンサー)を利用し、その信号がどのような状況から生じているのかを逆推定することを行った。具体的には、例えば建築物などに振動検知のセンサーを複数設置すると、内部で人がどのように活動しているかや、建築物が損傷しているかどうかなどの状態判別ができる可能性がある。これも、本来は建築物の状態が起源となって振動信号の様子が変化するのであるが、これを逆問題として振動信号から建築物の状態を推察することを行った。残念ながら、これは量子アニーリングだけによって実施するのは困難である部分が存在したので必要に応じて機械学習を援用した。

4. 研究成果

各目的について研究で得られた結果や成果発表などについて記述する。

目的に係る研究成果

○ノイズの影響をどの程度受けるかについての検討結果

ノイズの影響はデータそのものにノイズが含まれる場合と、アニーリング過程でノイズが加わる場合とでは本質的に異なる。ここではデータ解析を主な目的とするので、前者の場合を対象とする。データ行列としてランダム行列を用い、そこに微小なノイズが重畳されているとした。その特異値分解を量子アニーリングで実施すると得られる固有状態は元のランダム行列における基底状態とどの程度一致しているかを調べた。ノイズの増大と共に、ベキ的に正答率は減少することが分かった。

○データの階層性やデータサイズに対する影響の検討結果

データサイズが大きくなると計算時間はより長くかかることは避けられない。このとき、データサイズの大型化に対してどの程度計算時間が長くなるのかは、基底状態と第一励起状態の間のギャップの最小値によって明らかにすることができる。その結果、およそデータサイズの2乗(データサイズ N に対して N^2 のオーダー)で計算時間が増大することが分かった。さらに、特異値分解を量子アニーリングで実施する際の初期条件を工夫することで、正答率の減少を防ぐことができることも明らかになった。この結果の一部は国際会議 AQC2018 で田中宗氏(早大)田村亮氏(NIMS)との共同研究として発表した。

目的に係る研究成果

○逆問題の解決方法の構築

逆問題の中で、フレドホルムの第一種積分方程式

$$\int_a^b K(x,t)g(t)dt = f(x)$$

を対象とした。これはカーネル関数 $K(x,t)$ が指数関数などの場合にはフーリエ変換やラプラス変換のように逆変換が一意的に存在し $f(x)$ から $g(t)$ を求めることは難しくない。しかし、一般の $K(x,t)$ に対して $f(x)$ から $g(t)$ を求めるのは難しい。そこで研究代表者は、測定で得られるデータを $f(x)$ とみなし、その背景関数である $g(t)$ を量子アニーリングで求めることを試みた。これにはまずデータと $g(t)$ の試行関数から得られる積分結果との差異がより小さくなるようにコスト関数を設定し、シミュレーテッドアニーリングを構築した。そして、このコスト関数をスピントデルに変換することで量子アニーリングと対応させた。こうして逆問題の1つを量子アニーリングで解析できることが分かった。この成果は、後に材料・デバイスへの応用で活用した。

○より複雑なデータ解析に有効な量子アニーリングの実行基準の探索

複雑なデータ解析をする際に正答率が下がってしまう問題をさけるため、エントロピーを基準とした量子アニーリングのスケジューリングを導入した。その結果、通常(1)式で示される線型な時間発展に比べて60%程度の計算時間で98%以上の正答率を示すことが明らかになった。この結果は国際会議 AQC2019 や物理学会等で発表した。

目的の解決に向けて

○熱電材料に対する逆問題としてのデータ解析

熱電現象は温度 T 、電場 E に対して電流密度が $J(E,T) = L_{11} E + L_{12} (-\nabla T/T)$ と書けることに起因して生じる。このときの線形応答係数 L_{11} 、 L_{12} はスペクトル伝導度に対してヘルムホルツの第一種積分方程式の形で与えられる。カーネル関数はフェルミの窓関数である。これらの係数 L_{11} 、 L_{12} は適切な変形で電気伝導度とゼーベック係数に書き換えられ、観測可能量である。一方でスペクトル伝導度は直接の測定は非常に困難であるが、状態密度など物性を知るための重要な情報が含まれている。そこで目的で得られた手法を用いて第一原理計算の結果と一致することを示した。この成果は国際研究会 DLAP2019 で発表した。この成果にもとづいて、測定器と連携してスペクトル伝導度を測定値から直接推定するシステムを構築中である。

○センサーネットワークから得られる情報からの逆問題解析

建築物に設置したセンサーネットワークのデータを分析するために量子アニーリングを用い、建築物内部の振動源分布からセンサーの検知する信号へのフレドホルム方程式を逆解析した。しかし、このデータは振動源分布の分解能が高くなく、次元削減の工夫が必要だったため機械学習を援用して事前に信号を統計しておき、その結果を初期条件として量子アニーリングを実行することで対応した。この成果は国際会議 ISSS を中心として様々に公開した。この成果にもとづいて東京理科大学建築学科、電気工学科のスタッフらと共に大分県国東市や東京都葛飾区に設置されたセンサーネットワークの解析が進められている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Suzuki H., Hashizume Y.	4. 巻 517
2. 論文標題 Expectation parameter representation of information length for non-equilibrium systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physica A: Statistical Mechanics and its Applications	6. 最初と最後の頁 400 ~ 408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physa.2018.11.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fukuda Shigeki, Hashizume Yoichiro, Nakajima Takashi, Okamura Soichiro	4. 巻 57
2. 論文標題 Composition dependence of energy storage properties of antiferroelectric (Pb,Y)(Sn,Zr)O ₃ thin film capacitors	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 11UF08 ~ 11UF08
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.11UF08	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Naoto Enomoto, Yoichiro Hashizume, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura	4. 巻 56
2. 論文標題 Polarization Induced Resistance Switching Phenomenon in Metal Au / Ferroelectric VDF-TrFE / Semiconductor Si Junction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS	6. 最初と最後の頁 10PF13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.56.10PF13	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hitoshi Honmi, Yoichiro Hashizume, Takashi Nakajima, Soichiro Okamura	4. 巻 56
2. 論文標題 Thermodynamic analysis of a cooling system using electrocaloric effect	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS	6. 最初と最後の頁 10PC09
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.56.10PC09	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計18件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 岸朔矢, 中嶋宇史, 岡村総一郎, 山本貴博, 河原尊之, 崔彰訓, 伊藤拓海, 長谷川幹雄,
2. 発表標題 ニューラルネット型の分類器を用いた木造壁の損傷位置検出の可能性
3. 学会等名 複雑コミュニケーションサイエンス研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoichiro Hashizume
2. 発表標題 Matrix Product Representation of Wave Function in Quantum Adiabatic Process and its Time Evolution
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing conference (AQC2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ryo Tamura, Yoichiro Hashizume, Shu Tanaka
2. 発表標題 Adiabatic quantum computation to obtain singular vectors
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing conference (AQC2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 鈴木増雄, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 熱場ダイナミクスを用いた熱力学的距離の導入と非散逸カレントの寄与
3. 学会等名 熱場の量子論とその応用 (TQFT 2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山崎勇人, 橋爪洋一郎, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 量子アニーリングにおける波動関数の行列積表示
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋爪 洋一郎, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 熱力学的距離を用いた緩和過程での状態追跡
3. 学会等名 非平衡系の物理学 - 階層性と普遍性 -
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋爪洋一郎
2. 発表標題 熱場ダイナミクスによる量子力学と統計力学の関連性の研究
3. 学会等名 学術研究ネットセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 鈴木増雄, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 熱場ダイナミクスを用いて表された熱力学的状態距離の散逸過程への適用
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoichiro Hashizume, Ryo Tamura, Shu Tanaka
2. 発表標題 A construction method of initial Hamiltonian for singular value decomposition by quantum annealing
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing Conference (AQC) 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 山崎勇人, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 量子断熱過程における波動関数の行列積表示とその時間発展
3. 学会等名 弱値・弱測定、エンタングルメント、量子コヒーレンスの新地平 (QMNH2018)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Hashizume, M. Tsukuda, T. Yamamoto, T. Nakajima, S. Okamura
2. 発表標題 Analytical approach to thermoelectric properties of carbon nanotube thin film using a random graph theory and machine learning
3. 学会等名 International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics 2018 (ICOT2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 中嶋宇史, 岡村総一郎, 鈴木増雄
2. 発表標題 準静的熱力学過程における熱場ダイナミクスの特徴量
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 岸朔矢, 岸映裕, 橋爪洋一郎, 中嶋 宇史, 山本貴博, 河原尊之, 長谷川幹雄, 伊藤拓海, 崔彰訓, 岡村総一郎
2. 発表標題 圧電素子を用いた建物の損傷検出における機械学習の活用
3. 学会等名 第65回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋爪洋一郎, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 ベイズの定理を用いた双対なくりこみ変換
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 堀真弘, 橋爪洋一郎, 中嶋宇史, 岡村総一郎
2. 発表標題 多安定系で見られる多段階の確率共鳴についての研究
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岸朔矢, 橋爪洋一郎, 中嶋 宇史, 山本貴博, 河原尊之, 長谷川幹雄, 伊藤拓海, 崔彰訓, 岡村総一郎
2. 発表標題 機械学習を活用した圧電センシングシステムによる建物の状態検出
3. 学会等名 第78回 応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 神戸智樹、中嶋宇史、橋爪洋一郎、岡村総一郎
2. 発表標題 PLZTを用いたチューナブル2次元フォトニック結晶におけるスローライトに関する研究
3. 学会等名 第27回日本MRS年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 橋爪洋一郎，鈴木増雄，中嶋宇史，岡村総一郎
2. 発表標題 カレントのある系の状態変化に対する熱場ダイナミクスを用いた解析
3. 学会等名 非平衡物理の最前線 - 素粒子・宇宙から物性まで -
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 橋爪洋一郎，山本貴博	4. 発行年 2019年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 463
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集 第七節「シミュレーテッド・アニーリング法による熱電材料の物性予測」	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考