

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 6 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2010 ～ 2011

課題番号：22650002

研究課題名（和文） ナノテク CAD とナノテク計算の結晶格子アルゴリズム解析による
統合研究研究課題名（英文） Unified Approach for Nanotechnology CAD/Computation by Algorithmic
Analysis of Periodic Crystal Structures

研究代表者

今井 浩 (IMAI HIROSHI)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

研究者番号：80183010

研究成果の概要（和文）：ナノテクにおける所望の原子配置を AFM を用いて実現する技術による表面結晶格子と、ナノテクを用いた量子計算での格子グラフ活用について、共通する結晶格子構造をアルゴリズム解析することによって、原子配置実現動作を構築する CAD と新しい計算モデルの能力解析を行い、統合的研究に取り組むことにより、動作計画法を確立して結晶格子を扱う数理を明らかにするとともに、量子計算への新たな展開について調べた。

研究成果の概要（英文）：Problems of computationally handling periodic crystal structures arise in related to nanotechnology such as arranging atoms in a specified manner on crystal surface by using AFM and investigating quantum computation. We analyzed these problems in a unified way of clarifying nice mathematical structures of periodic structures and established a way of performing nanotechnology CAD for the reconfiguration of atoms and for universality of measurement-based quantum computing.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|---------|-----------|---------|-----------|
| 2010 年度 | 1,300,000 | 0 | 1,300,000 |
| 2011 年度 | 1,200,000 | 360,000 | 1,560,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 2,500,000 | 360,000 | 2,860,000 |

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎

キーワード：量子計算理論、ナノテクノロジー、量子もつれ、量子情報組合せ論、計算幾何、
離散幾何、周期グラフ

1. 研究開始当初の背景

20 世紀半ばのコンピュータの発明は、新コンピュータを設計するためにコンピュータが解くべき様々な離散数理問題を産み出し、アルゴリズム理論の構築に貢献するとともに情報処理の隆盛をもたらした。このように新計算モデルとそれを実現する新技術は、新分野を創出してさらなるイノベーションを

もたらす。21 世紀になり、ナノテクノロジーの原子操作で設計者の意図する構造を作ることができるようになり、ナノスケール世界の量子力学原理等に基づいた新計算モデルが構想されている。しかし、ナノテク研究者と情報科学研究者の交流は少なく、ナノテクでの CAD と計算を融合した統一的な研究もこれまでになされていなかった。こうした現状を考察した結果、ナノテクを情報科学の観点から

咀嚼して問題解明に取り組むことにより、ナノテク CAD とナノテク計算の研究を統合計算パラダイムの構築・観点から行うという挑戦的アイデアを提案するに至った。

原子・分子は結晶格子という規則的構造を有し、代表的ナノテク計算の量子計算では周期構造など規則性の活用が効果的で、整数格子の問題が先端研究課題となっている。本研究では、結晶格子・整数格子の離散構造に着目し、それを解析するアルゴリズムの研究を推し進め、ナノテク構造作成の設計をコンピュータ支援により行うナノテク CAD と、ナノテク計算の計算能力解析のためのナノテク計算論を統合した枠組みを提唱し、両者を融合させて「計算の新設計」と「計算による新設計」の両面から研究する。

2. 研究の目的

本研究課題では、近年のナノテクノロジー技術の発展で可能となってきた原子操作や新しい計算モデルについて、結晶格子や整数格子の格子構造のアルゴリズム解析を軸として、情報処理とデバイス技術を融合させた萌芽的分野での研究を展開することを試みる。ナノテクの種々技術を用いて実現される量子情報システムでは、これまで現在の情報システムを凌駕する能力に着眼した研究が主であったが、本研究ではナノテク計算の対象をナノテクそのものに向け、展開する対象世界を拡大するという特色がある。具体的には、(1) ナノテクによって可能となった原子操作を実際に新規ナノ分子構造・ナノデバイス開発に適用するための自動設計の理論をナノテク CAD (自動設計) として展開し、(2) ナノテクを用いた計算モデルであるナノテク計算が整数格子等の規則的構造を有する問題に効果的であることの原理解明とそれを適用した新アルゴリズム開発を行う。これによって、(3) ナノテクノロジーという技術基盤の上に「ナノテクを進展させるための情報処理」と「情報処理を多大に加速するナノテク」の両面からの研究を推進する。

3. 研究の方法

まず結晶格子の最も基本的なものである正方格子上での隣接原子交換操作による所望の原子配置実現の研究を精査し、そこでの課題点と拡張方向を整理することから研究に取り組みを始めた。

その結果をふまえて、研究期間全体にわたって、アルゴリズム解析の対象となる結晶格子をより多様なものへと発展させるために、多様な結晶格子を (1) 高次元整数格子に埋め込むことによってアルゴリズム的に統一的に扱う研究と、(2) 結晶格子の有する規則性を周期的グラフとして記述することにより適用範囲を広げるとともに、その汎用性が

ら効率減少が生じる範囲でおさえるアルゴリズムの研究を推し進めた。具体的には以下の二方向からアプローチを行った。

ナノテク CAD 研究においては、正方格子はアルゴリズムを展開する際に直積構造があることから、分割統治法を適用しやすい構造となっており、本グループの先行研究でハニカム格子上の分割統治アルゴリズムを用いた2つの格子点集合間の最近接点対問題を拡張していた。一方で、種々格子をこの方向で扱うためには従来の高次元整数格子への埋込み理論を整理する必要があったため、まずは元々の格子の2点間パスの間の関係が高次元整数格子での2点間パスの間の関係とどう対応するかについて調べた。

ナノテク計算については、整数格子と量子計算等のナノテクノロジーを用いた新計算モデルの既存研究について広い範囲を調査して、結晶格子の2・3次元の物理的実現に限らない高次元格子構造のもつ数理的性質を調べ、その計算への適用を検討した。

さらに最終年度では研究成果を拡張し、理論的な進展を目指すことにも取り組んだ。計算環境をより充実したものにし、演算能力を最大の状態に整えて、これまで精度・スケールなど種々の問題により解くことができなかった結晶格子でのナノテク CAD やより大規模な問題を解くことができる環境を整備した上でナノテク量子計算の研究を推進した。両者の融合部分においては、高次元格子の次元削減による近似可能性の研究も行い、それによって次元に対する依存性がより低い効率的アルゴリズムの開発に取り組んだ。

こうした研究活動と並行して、得られた研究成果をまとめ上げ学会で発表を行うなど、周知活動にも随時積極的に取り組んだ。

4. 研究成果

(1) 平成 22 年度の研究成果

研究初年度においては、正方格子上での隣接原子交換操作による所望の原子配置実現の研究を精査して、そのアルゴリズムの対象となる結晶格子をより多様なものへと発展させることを目指した。多様な結晶格子をグラフ理論で扱うため、結晶格子を高次元整数格子に埋め込むことによってアルゴリズム的に統一的に扱う研究と、結晶格子の代表的構造である平面タイリングの有する規則性を周期的グラフとして記述することにより適用範囲を広げその汎用性から効率減少が生じる範囲でおさえるアルゴリズムの研究を並行して進めた。

具体的には、タイリングを統一的に周期グラフとして表現し、その周期グラフ上で定義されるパラメトリック整数計画問題を解くことにより、元々の格子の2点間距離をパラ

メタで表現することを、グレブナー基底という計算代数手法を用いて示した。これにより計算代数に関わる興味深い問題を抽出することもできた。上記の高次元整数格子への埋め込みについては、タイリングの埋め込み可能性に関する既存研究をもとに上記の2点間距離をパラメタ表現する他の方法を検討し、隣接原子交換によってこれらのタイリングの中に所望の原子配置を実現する際に軸分解を用いて正方格子同様に動作計画立案できる場合について調べた。これらの成果については、初年度の研究で論文の執筆を開始する段階まで進めることができた。

また、ナノテクに関連した量子情報について双曲幾何を用いて解析する方法について計算幾何の観点から検討する研究も進め、論文を発表した。他にも、上記タイリングに代表される結晶構造を量子計算で活用することについての検討を進め、グラフ理論的にも量子計算の面でも研究進展が望めることが判明した。この成果についての学会発表も行った。

(2) 平成 23 年度の研究成果

最終年度においては、結晶格子の数理モデルとして2次元周期グラフに着目して研究を遂行した。コンピュータ科学におけるVLSI・スケジューリングや化学の分野における既存の周期グラフの研究について、ナノテクCADの原子交換操作による所望の原子配置実現の問題の観点から、グラフ理論と計算幾何の方法論を用いて解析を進めた。周期グラフがL1埋込み可能である場合、周期グラフ上での近接関係が効率よく扱えることを示し、これをVoronoi図に関する国際会議で発表したところ、この成果は高く評価され、選定された論文特集号への投稿を推薦されることとなった。また、原子配置実現のため、L1埋込み可能な周期グラフの中に、さらに動作計画を実現するための干渉のない軸への分解理論を構築して、効率的動作計画が可能な周期グラフをすべて調べあげた。この成果については、2012年度に開催されるVoronoi図に関する国際会議に投稿中である。また、日韓ワークショップにおいて、結晶格子モデルの周期グラフをコンパクトに表現する方法を示して、その表現のデータベース作成にも取り組んだ。このように原子配置実現問題を軸に、ナノテクCADという萌芽的方法論をコンピュータ科学のアプローチにより広く展開した。

量子情報処理の観点からは、量子情報理論と密接な関係がある双曲空間での近接関係を解明した論文を計算科学に関するジャーナルに論文掲載するという成果をあげた。量子情報はセキュリティ理論と表裏一体のものであり、この論文は現代暗号における楕円

曲線暗号の算術実装効率化への展開も図ったものである。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 9 件)

1. N. Fu, H. Imai and S. Moriyama, Voronoi Diagrams on Periodic Graphs, Proceedings of 2010 International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering, IEEE Xplorer, pp.189-198 (2010). DOI: 10.1109/ISVD.2010.26
2. T. Tanuma, H. Imai and S. Moriyama, Revisiting Hyperbolic Voronoi Diagrams from Theoretical, Applied and Generalized Viewpoints, Proceedings of International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering, IEEE Xplorer, pp.23-32 (2010). DOI: 10.1109/ISVD.2010.13
3. N. Fu, A. Hashikura and H. Imai, Proximity and Motion Planning on \mathbb{L}_1 -embeddable Tilings, Proceedings of The Eighth International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering, Vol.1, pp. 150-159 (2011). DOI: 10.1109/ISVD.2011.28
4. A.Hashikura, N.Fu and H. Imai, Distance and Axis Decomposition of \mathbb{L}_1 -embeddable Tilings, Proceedings of the 14th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation, Vol.1, pp.130-136 (2011).
5. T. Tanuma, H. Imai and S. Moriyama, Revisiting Hyperbolic Voronoi Diagrams in Two and Higher Dimensions from Theoretical, Applied and Generalized Viewpoints, Transactions on Computational Science, LNCS 6970, Vol.14, pp.1-30 (2011). DOI: 10.1007/978-3-642-25249-5_1
6. Y. Matsumoto, S. Moriyama, H. Imai and D. Bremner, Matroid Enumeration for Incidence Geometry, Discrete and Computational Geometry, Vol. 47, pp.17-43 (2012). DOI: 10.1007/s00454-011-9388-y

7. V. Suppakitpaisarn, M. Edahiro and H. Imai, Fast Elliptic Curve Cryptography Using Minimal Weight Conversion of d Integers. AISC2012, Conferences in Research and Practice in Information Technology, Vol.125, pp.15-26 (2012).
<http://crpit.com/confpapers/CRPITV125Suppakitpaisarn.pdf>
8. V. Suppakitpaisarn, M. Edahiro, and H. Imai, Calculating Average Joint Hamming Weight for Minimal Weight Conversion of d Integer, WALCOM 2012, 6th International Workshop on Algorithms and Computation, Lecture Notes in Computer Science, Vol.7157, pp.229-240 (2012).
DOI: 10.1007/978-3-642-28076-4_23
9. N. Fu, A. Hashikura and H. Imai, Geometric Treatment of Periodic Graphs with Coordinate System Using Axis-Fibre and an Application to a Motion Planning, Proceedings of 2012 International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering, to appear (2012).

[学会発表] (計 6件)

1. 今井浩, 幾何から量子そしてその先 (招待講演), 「計算幾何学の発展と未来」研究集会, 2011-03-11, 京都大学.
2. 橋倉彰宏、夫紀恵、今井浩, periodic graph の static graph に関する一考察, 電子情報通信学会コンピュータシミュレーション研究会, 2010-09-29, 長岡技術科学大学.
3. 今井浩、夫紀恵、森山園子, 量子グラフ状態による情報処理, 「ナノ量子情報エレクトロニクスの進展」シンポジウム, 2010-12-22, 東京大学.
4. 今井浩, Feynman の 2 つの提唱からグラフと計算量への展開, 電子情報通信学会第 23 回量子情報技術研究会, 2010-11-15, 東京大学.
5. J. Fukawa, F. Le Gall, and H. Imai, Quantum Coloring Games via Symmetric SAT Games, 11th Asian Quantum Information Science Conference, 2011-08-25, Busan, Korea.

6. 今井浩, 量子シミュレーションの計算量理論へ, 電子情報通信学会第 25 回量子情報技術研究会, QIT25, 大阪大学, 2011-11-21/22, pp. 27-29, 大阪大学.

[図書] (計 0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計 0件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

今井 浩 (IMAI HIROSHI)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授
研究者番号 : 80183010

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし