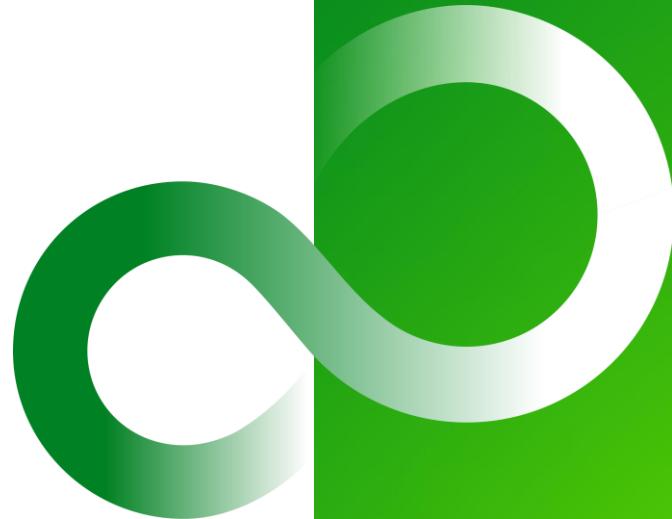


# デジタルアニーラとその応用

2023年3月2日  
富士通株式会社  
Executive Director  
岩井 大介



# デジタルアニーラとは

デジタルアニーラを軸とする応用事例

# デジタルアニーラ(量子インスパイアード)と量子コンピュータ FUJITSU

## ■ デジタルアニーラ

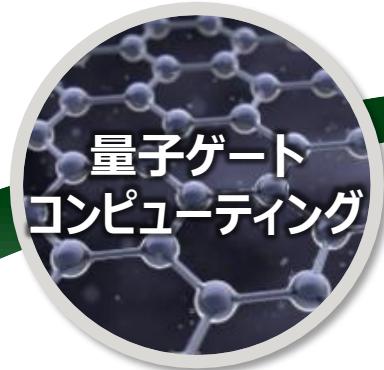
- 物理学の磁性体簡易モデルであるイジングモデルの最適化問題に特化したコンピューティング
- 組合せ最適化問題に能力を発揮

## ■ 量子コンピューティング

- 将来有望なコンピューティング候補



汎用コンピューティング



量子ゲート  
コンピューティング

組合せ最適化問題適用分野



物流・製造分野

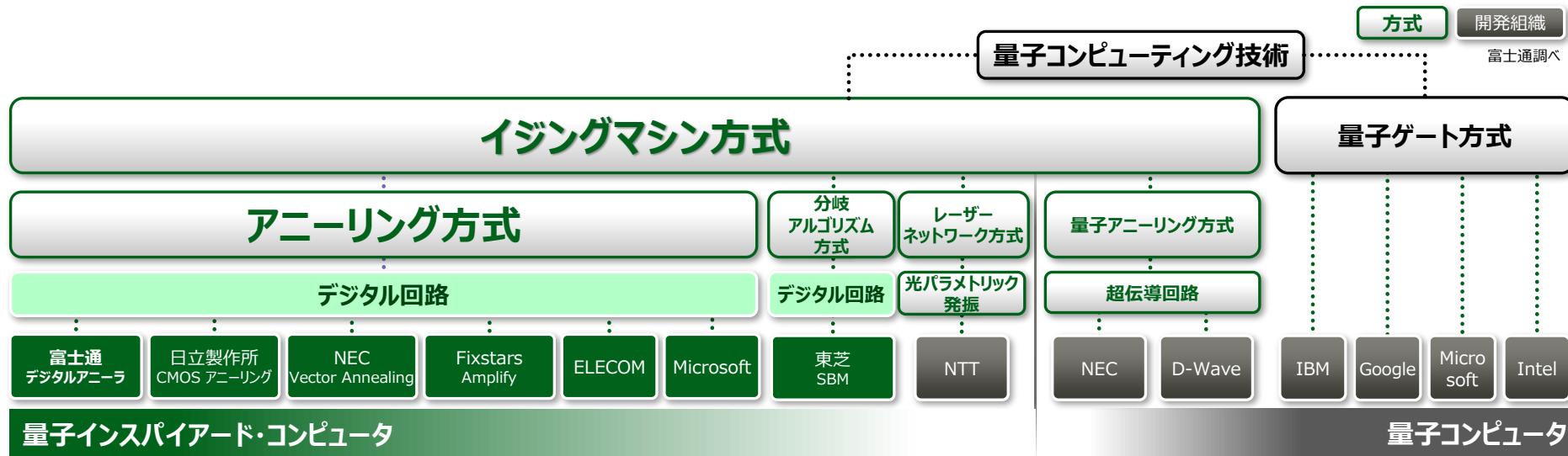


創薬・材料分野



金融分野

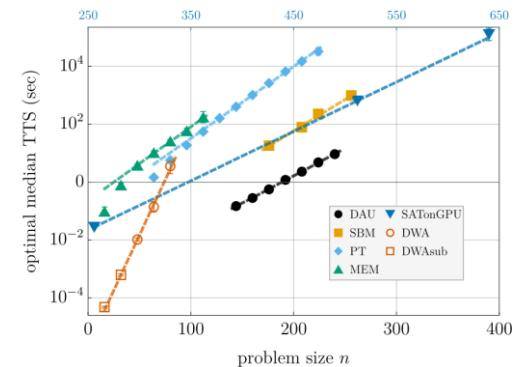
- イジングマシン方式の多くは、量子インスパイアード、日本が先行
- 量子ゲート方式は、各社開発途上（規模、誤り耐性）



# 各社比較

## 大規模アニーリングコアにより実問題求解性能で優位に

	富士通 <sup>[1]</sup>	D-Wave <sup>[3]</sup>	東芝 <sup>[4]</sup>	日立 <sup>[6]</sup>	NEC <sup>[7,8]</sup>
実装方式	ASIC, マルチGPU	超伝導	FPGA, GPU	GPU	汎用ベクトル プロセッサ
求解方式	MCMC** Parallel Tempering	Quantum Annealing	Simulated Bifurcation	Momentum Annealing	Simulated Annealing
ビット/スピン 数	10万 (サーバ並列で100万ビッ ト <sup>[2]</sup> )	約5000	100万	10万	10万
結合度	全結合	疎結合	全結合	全結合	全結合
結合強度階 調	64ビット	アナログ(5ビット 程度)	2~32ビット <sup>[5]</sup>	未公表	未公表
制約処理技 術	実制約ハンドリング 等式(1way-1hot, 2way-1hot), 不等式制約 係数自動調整	-	-	-	等式(1way- 1hot)



出典 :

arXiv:2103.08464v1 [quant-ph] 15 Mar 2021  
/USC Prof. Lidar, et. al

\*\* MCMC: Markov-Chain Monte Carlo

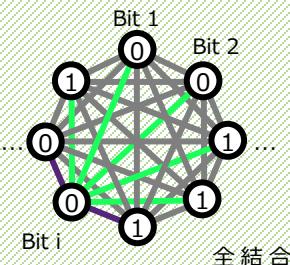
<sup>[1]</sup> <https://www.fujitsu.com/jp/group/labs/en/about/resources/tech/techintro.html><sup>[2]</sup> <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/11/9.html><sup>[3]</sup> <https://www.dwavesys.com/solutions-and-products/systems/><sup>[4]</sup> <https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.html><sup>[5]</sup> [https://www.itmedia.co.jp/news/articles/1907/30/news030\\_3.html](https://www.itmedia.co.jp/news/articles/1907/30/news030_3.html)<sup>[6]</sup> <https://www.hitachi.co.jp/rd/news/topics/2019/0830.html><sup>[7]</sup> <https://jpn.nec.com/nec-vector-annealing-service/index.html?nid=jpntop211051><sup>[8]</sup> 鷹野ら、IEICE Technical Report CAS2019-47, MSS2019-26

## 量子アニーリング

- ・厳密解が保証される
- ・量子状態維持のため超低温冷却の大型装置が必要（超低温動作、大規模化が困難）
- ・量子ビットが物理結合であり、結合数が少ない（複雑な実問題を求解できない）

## 量子インスパイアード

- ・厳密解は保証されない
- ・シリコン半導体のため小型化が容易（室温動作、大規模化が可能）
- ・全結合アーキテクチャを採用し、結合精度が高い（複雑な組合せ最適化問題を求解できる）



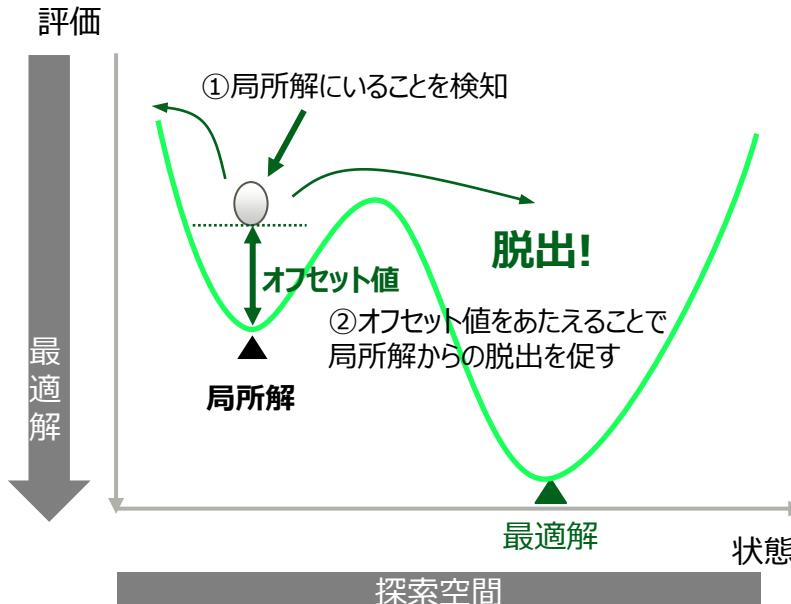
量子インスパイアードは既存のシリコン半導体技術をベースに実問題を解決

# 高速求解性能を実現するデジタルアニーラの技術

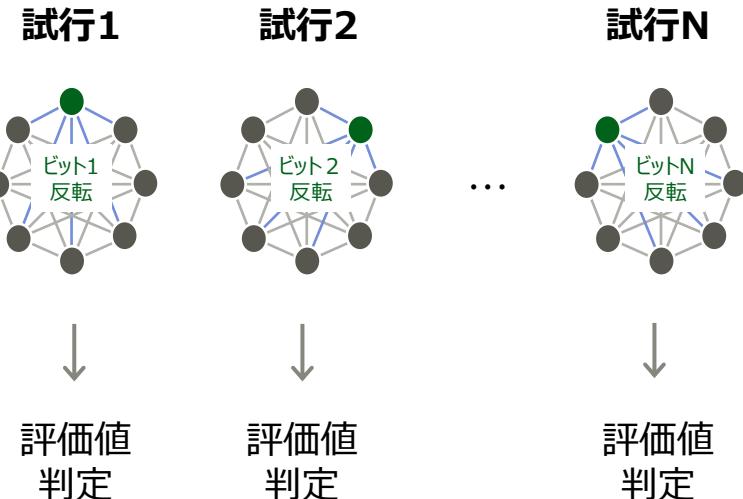
FUJITSU

## 最適解に導く確率を高める

## 並列評価により高速に最適解を求める



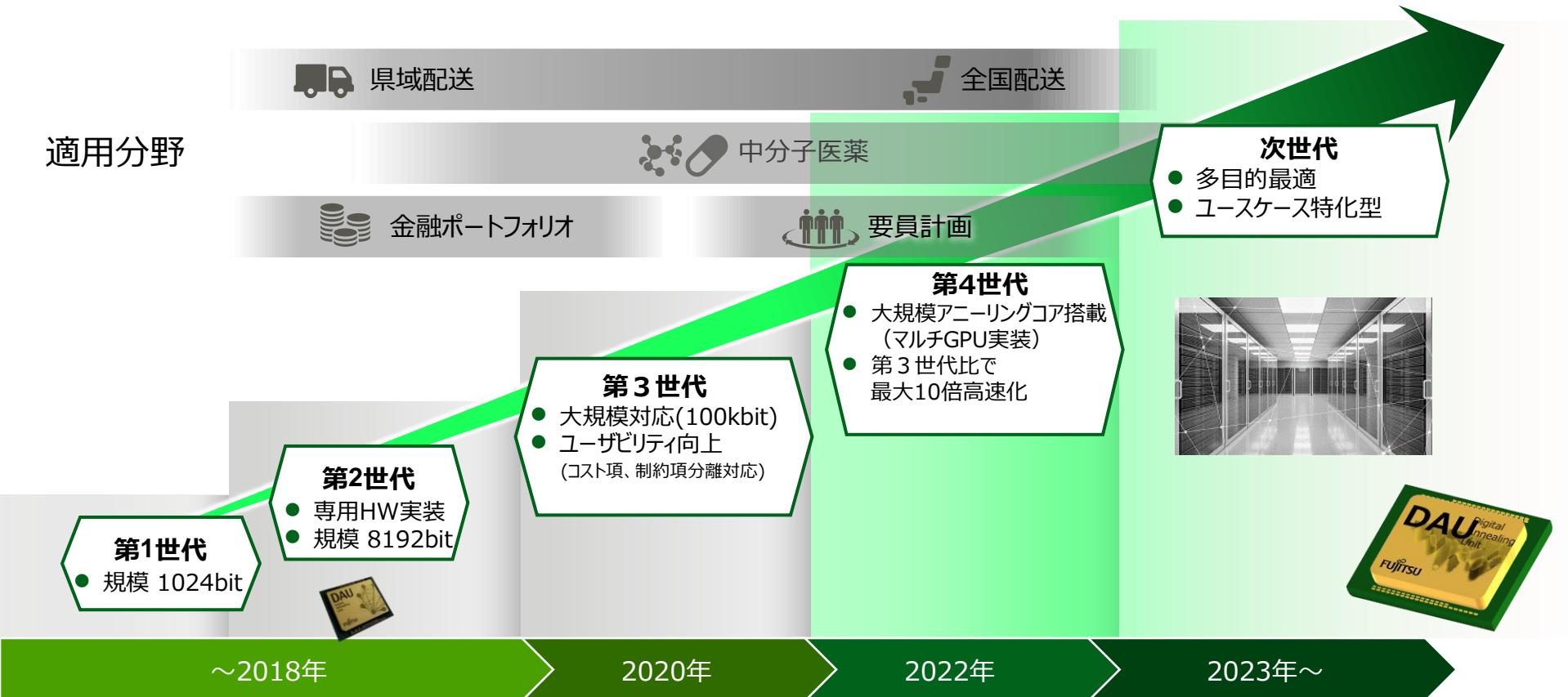
オフセット値を与えることで  
局所解からの脱出を促し、最適解を導く。



並列的に反転させるビットを評価することで  
高速に最適解を導く。

# 実問題求解に向けた技術ロードマップ

FUJITSU



# デジタルアニーラとは

デジタルアニーラを軸とする応用事例

## 社会課題の解決を目指して

### 物流・交通

#### 創薬・材料



材料探索  
(電池、混合物)

中分子医薬  
安定構造探索



スペクトル  
解析

CI  
CI  
CI

分子  
類似性  
検索

#### 医 療

放射線  
治療



物流  
ネットワーク  
最適化

CI  
CI  
CI

交通量  
最適化

工場内  
動線  
最適化

宇宙ゴミ  
除去経路  
最適化

要員計画

通信  
基地局  
ID割当

#### 製 造

ポートフォリオ  
最適化

Web  
広告

#### 金融

#### 情 報

デジタルアニーラ

# (ご参考) デジタルアニーラの適用領域:文献

FUJITSU

配送計画最適化: <https://www.fujitsu.com/downloads/JP/microsite/fujitsutransformationnews/journal-archives/pdf/2019-06-14-01.pdf>

部品物流最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/09/10-1.html>

LNG船経路最適化: <https://mirai.jogmec.go.jp/digital/column/01-04.html>

宇宙ゴミ除去経路最適化: <https://www.nikkei.com/article/DGXZQOUC24C5Y0U1A820C2000000/>

自動車船積み付け最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/09/2.html>

要員計画最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/11/9.html>

自動車生産計画最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/10/21.html>

要員計画最適化: [https://www.fujitsu.com/jp/about/resources/publications/technicalreview/topics/article010.html?utm\\_source=twitter&utm\\_medium=social&utm\\_campaign=official20210805](https://www.fujitsu.com/jp/about/resources/publications/technicalreview/topics/article010.html?utm_source=twitter&utm_medium=social&utm_campaign=official20210805)

倉庫ピッキング最適化: [https://www.fujitsu.com/downloads/JP/solutions/industry/retail/dl-contents/rtj/2020/pdf/R03-2\\_Digital-Annealar.pdf](https://www.fujitsu.com/downloads/JP/solutions/industry/retail/dl-contents/rtj/2020/pdf/R03-2_Digital-Annealar.pdf)

ポートフォリオ最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2018/10/23-1.html>

ポートフォリオ最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2019/08/30-1.html>

ポートフォリオ最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/02/7-1.html>

Web広告の効果最大化: <https://prtmes.jp/main/html/rd/p/000000165.000010742.html>

基地局割当最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/02/24.html>

基地局割当最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/03/18.html>

スタジアム座席配置最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/06/17.html>

創薬でのスクリーニング: <https://www.fujitsu.com/global/services/business-services/digital-annealer/accelerating-drug-discovery/>

分子類似性検索: [https://www.jstage.jst.go.jp/article/vss/63/3/63\\_20180509/\\_pdf/-char/ja](https://www.jstage.jst.go.jp/article/vss/63/3/63_20180509/_pdf/-char/ja)

タンパク質安定構造探索: <https://www.fujitsu.com/jp/about/resources/case-studies/vision/toray/>

中分子ペプチド創薬: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/10/13.html>

半導体材料最適配合探索: <https://www.sdk.co.jp/news/2022/41712.html>

放射線治療計画最適化: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/02/26.html>

# デジタルアナーラとは

デジタルアナーラを軸とする応用事例：物流関連

# 調達物流最適化

## 自動車製造に必要な部品の物流 ネットワーク最適化を追求

- ✓ 北米の数百を超える仕入れ先から部品を仕入れ、数か所の中継倉庫を通り、数十の工場へ配送する大規模なルートを探索する問題を計算
- ✓ トラック数、総走行距離、仕分け作業などを含めた物流コストの最適化
- ✓ 物流に関わるコストを2%～5%削減
- ✓ 30分以内に求解



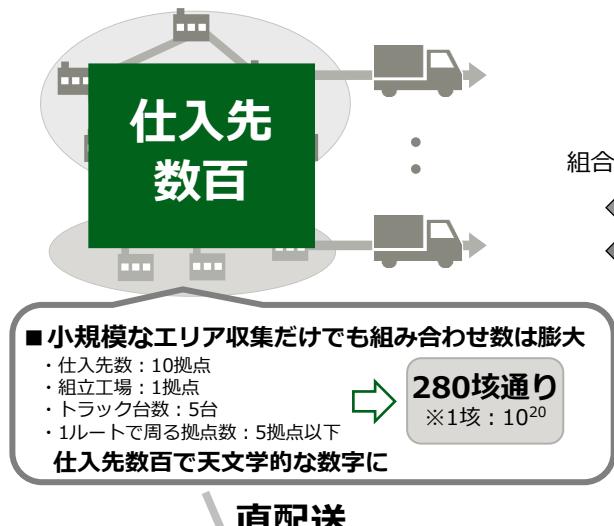
物流NW  
最適化

# 調達物流最適化の実証事例

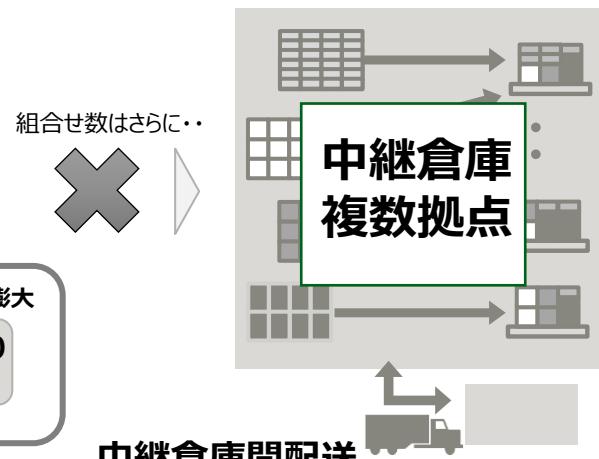
FUJITSU

## ■ 大規模な物流ネットワークのコスト最適化

### 1. 部品仕入先から部品を収集



### 2. 中継倉庫で部品を集約



### 3. 車両組立工場へ配送



- 人手では数か月かけて作っていた物流ルートを30分で探索
- 従来手法に比べ2%～5%のコスト削減効果を見込む

2020年9月 プレスリリース

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/09/10-1.html>

# 搬出入最適化

日本郵船株式会社 様

## 自動車専用輸送船への車両の 積み付けプランを最適化

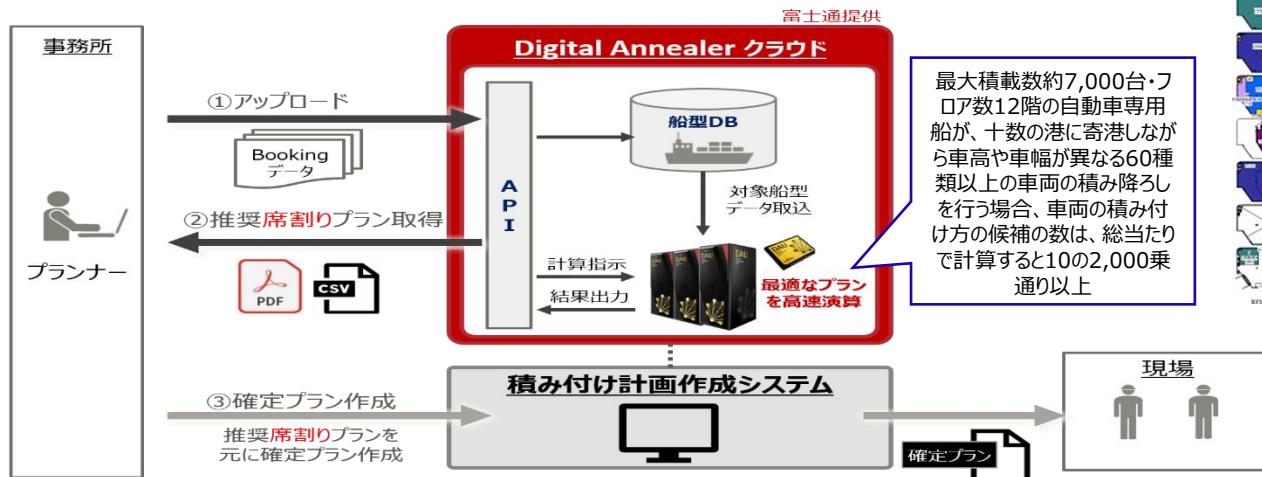
- 専門のプランナーが手作業で行っていた  
積み付けプラン作成業務を自動化
- 業務の効率化により、  
**年間4,000時間もの労働時間を削減**
- 急な計画変更への迅速な対応や、  
プランの品質バラつきの防止も実現



## ○自動車専用船の積み付け計画作成業務を効率化

- 人手による積み付け計画作成作業を自動化、業務の効率化により労働時間を大幅に削減
- 急な輸送計画の変更に迅速に対応することが可能
- 経験値や技量による担当者ごとの積み付け計画の品質のバラつきを防止

出力プラン（席割りプランの例）



年間4,000時間以上の労働時間の削減を実現

## デジタルアナーラとは

デジタルアナーラを軸とする応用事例：製造関連

# 車両混流生産順序最適化

1ラインで複数車種を生産する混流生産で  
車両の並びを平準化した生産順序を作成

- ✓ 従来手法では不十分であった平準化生産順序を実現
- ✓ 工場での作業効率低下は部品発注の非効率を  
回避するために、各工程における作業時間の  
ばらつきは各制約条件を考慮し、車両並びを  
平準化
- ✓ 納期遵守、部品在庫低減、物流スペース低減

プレスリリース：2022年 10月21日

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/10/21.html>



# 車両混流生産順序の最適化

FUJITSU

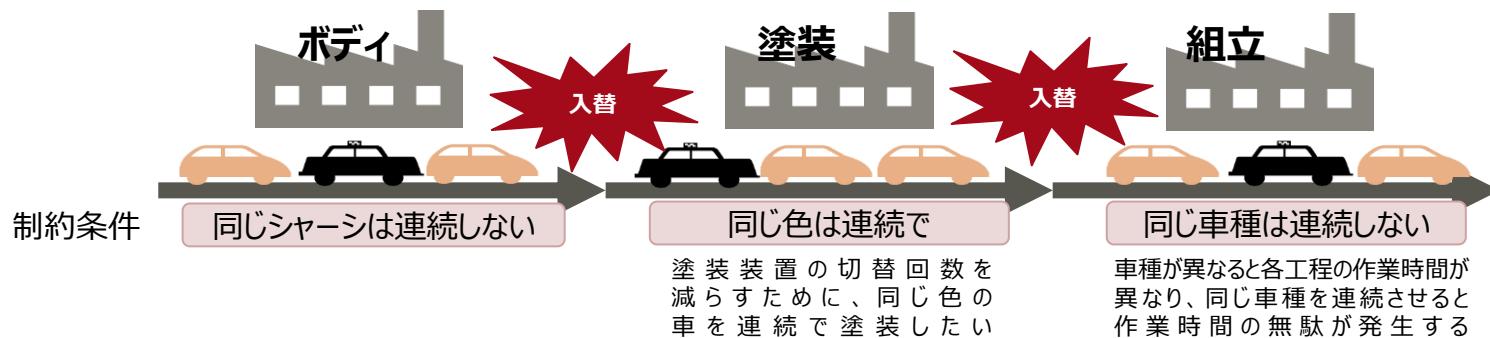
## ■ 工程間での生産順序入れ替えを最小限に抑えた平準化を実現

### ■ 課題

- ・混流生産では、工程間の制約条件が衝突するため「生産順序入れ替え」が必要となり、納期が厳しくなる
- ・入替工数・構内物流スペース増の課題

### ■ 狹い

- ・最適化性能向上：納期遵守、部品在庫低減、物流スペース低減を図る
- ・将来の変化変動への備え：最適化エンジン導入で工場のニーズ・特性に応じた生産順序立案する



# 倉庫最適化

工場内のピッキングルートおよび  
商品棚配置の最適化を実現

- ✓ 部品の出庫・入庫業務のルートを最適化
- ✓ 部品棚の相関関係を分析し、棚の位置を見直すことで、ピッカーの移動距離を最大で45%短縮
- ✓ 複数フロアをまたいだルートの最適化も実現



ピッキングルート  
最適化

# ピッキングルートおよび商品ロケーション最適化

FUJITSU

- 最適化したピッキングルートのデータから**需要の多い商品棚**を算出し、倉庫内商品棚のロケーション再配置を提示。

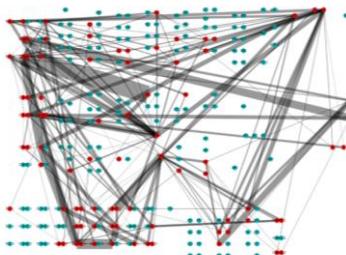


ピッキングルート最適化と組合せて運用していくことで、**ピッキング作業の更なる改善**が可能



実際のロケーション変更をせずに、  
ロケーション変更による効果を**シミュレーション**、  
**最適なロケーション提案**が可能

## Before



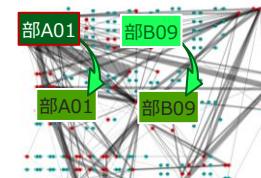
部品需要を考慮せず商品棚を設置しているため、ピッキング作業も効率的でなく、ピッキングルートも最適化されない。

①最適化したピッキングルートのデータから  
**需要の多い商品**を抽出

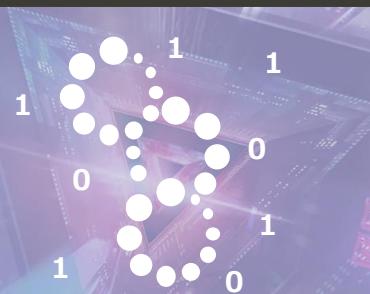


ピッキングが多い商品リスト  
No.1 部品A01、部品B09  
No.2 部品C10、部品D08

②ピッキングが多かった部品を移動した  
(近づけた) 仮想ロケーションマップを作成

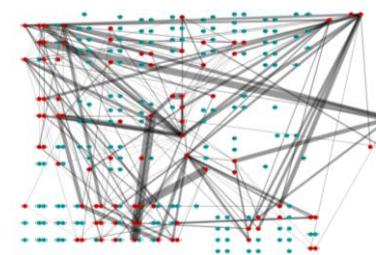


## デジタルアニーラクラウドサービス



ロケーション変更後のピッキングルートをデジタルアニーラで  
シミュレーション

## After



ロケーション変更後の  
ピッキングルートの改善効果の  
提示が可能

## デジタルアナーラとは

デジタルアナーラを軸とする応用事例：材料関連

# Materials Informatics / Drug Discovery

デジタルアニーラとのハイブリッドコンピューティングによる  
計算科学・データ科学の高速化

## 計算科学

### オープンデータ



### 文書分類 知識抽出



### 知識DB

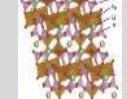


### 候補 絞り込み



材料候補  
プロセス条件

### シミュレーション 実験・分析検証



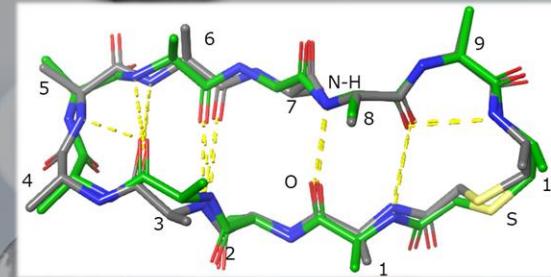
## データ科学

AI RL/ML/DL

# 不可能であった中分子創薬の計算を高精度で実現！

- ✓ 驚異的な精度(RMSD 0.73Å)で実験構造と計算構造を一致させることに成功。一晩で高精度に計算。中分子医薬候補探索の飛躍的効率化を実現。
- ✓ ペプチドリームから高評価。「高精度を維持し、探索時間の短縮化に挑戦しながら、革新的な新薬創出がこれまで以上に加速していくものと考えている」。
- ✓ 新型コロナ感染症治療薬に特化した合弁会社、ペプチエイド株式会社を2020.11に設立。新薬開発を加速。治療薬の開発候補化合物の臨床研究を2022.3に開始。

緑色：計算結果  
灰色：実験結果

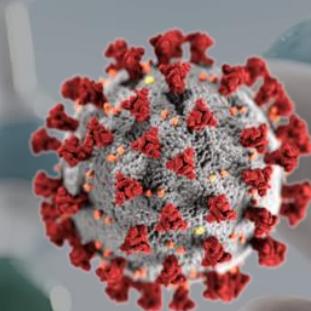


環状ペプチドの実験構造と計算構造の比較

RMSD : 0.73Åの驚異的な精度で

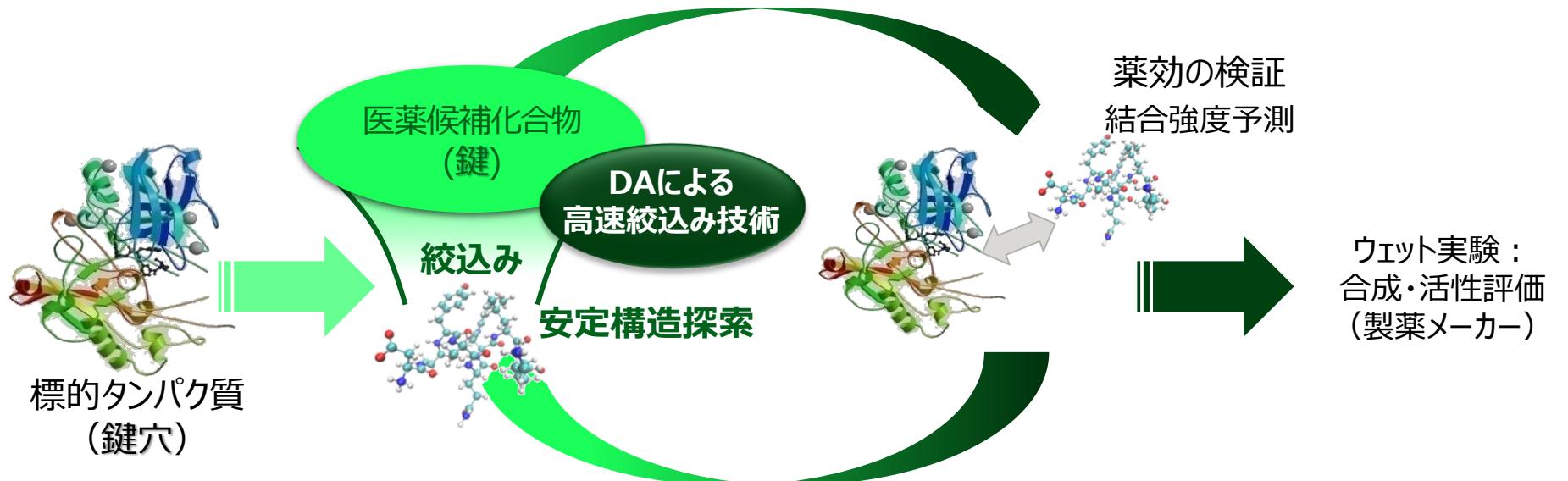
実験構造と計算構造が一致

RMSD(Root Mean Square Deviation) : 平均二乗偏差



新型コロナウィルス感染症治療薬を含む、新薬の開発を加速

FUJITSU



低分子医薬(アミノ酸2～4個)でのIT創薬活用は進みつつあるが…

- 低分子医薬(アミノ酸2～4個)から副作用のリスクが低い中分子医薬(アミノ酸5～50個)へシフト

- **中分子医薬候補の安定構造探索は、計算量の爆発的な増加により、困難**

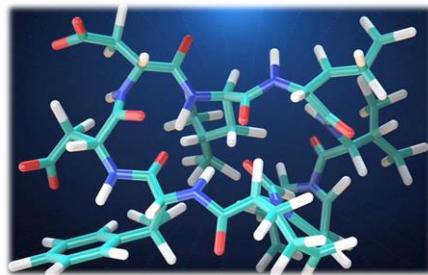
低分子：天然のアミノ酸3個の配列種類は：4200

中分子：天然のアミノ酸15個の配列種類は： $\sim 1.6 \times 10^{19} = 1,600$ 京

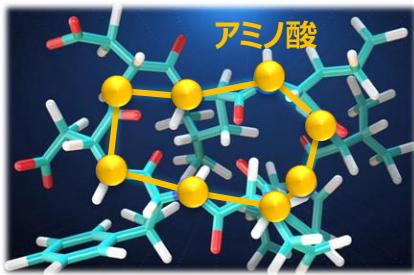


# デジタルアニーラによる安定構造探索

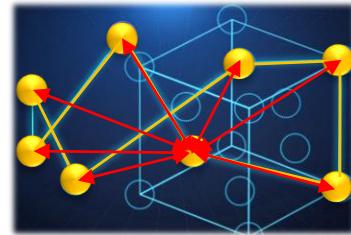
FUJITSU



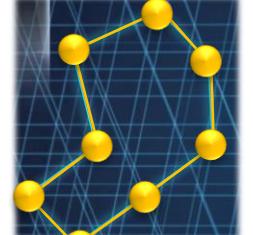
中分子環状ペプチド



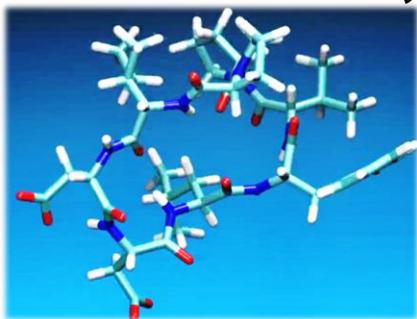
アミノ酸で括って粗視化  
アミノ酸間の相互作用をAIでモデル化



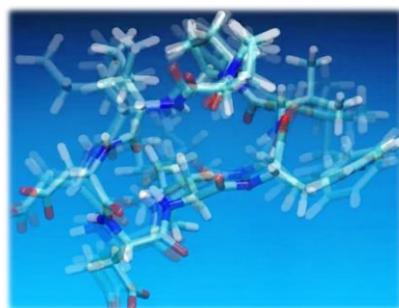
アミノ酸を格子点に配置し  
アミノ酸間の相互作用を考慮  
デジタルアニーラで構造探索



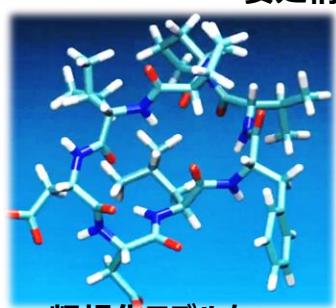
デジタルアニーラで求めた  
安定構造



求まった安定構造  
(実験構造と1Å以下で一致)



HPCによる  
精細構造探索



粗視化モデルを  
全原子モデルに戻す

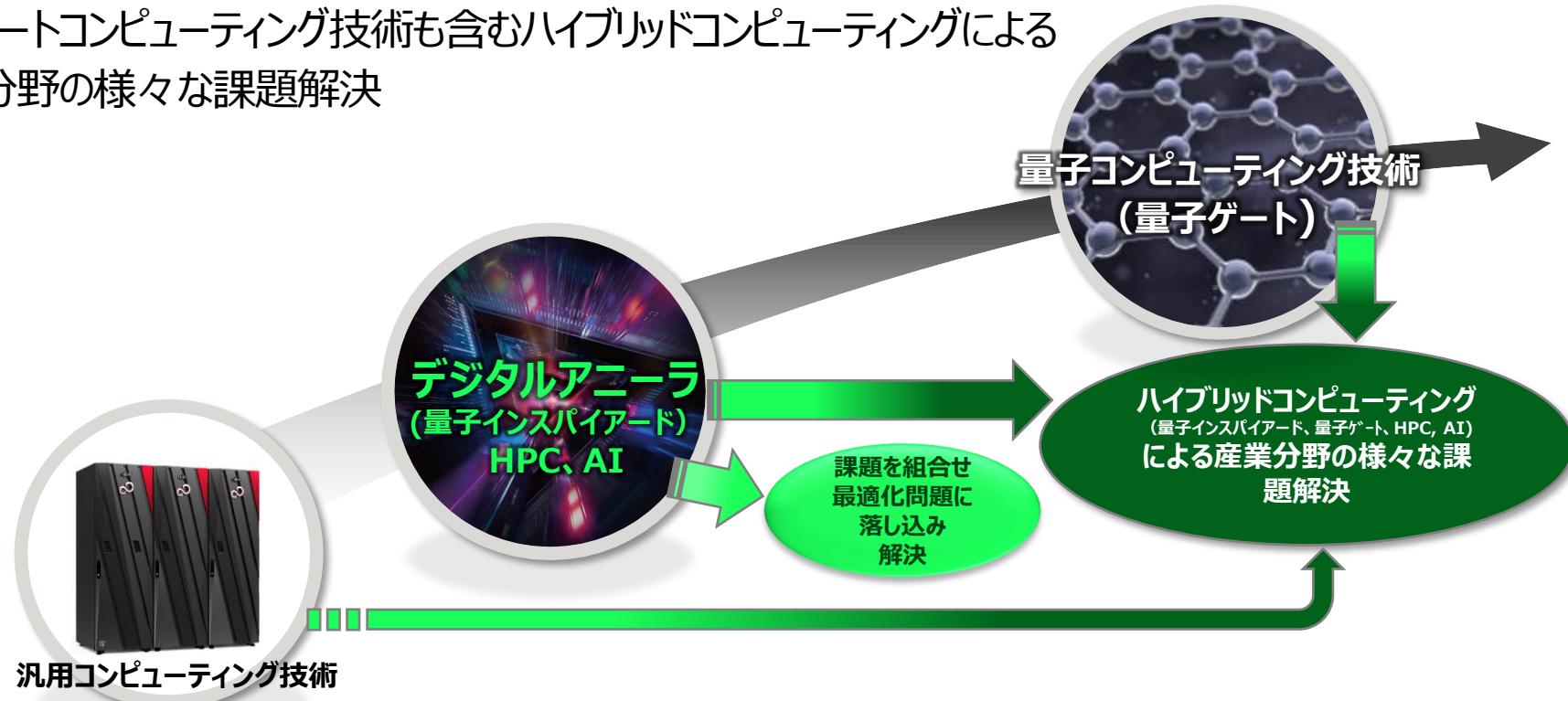


AI・デジタルアニーラ・HPCの連携計算により高速かつ高精度な中分子安定構造探索を実現

粗視化の単位を工夫すれば、他の電池など他材料への展開も可能

# 将来のコンピューティングは…

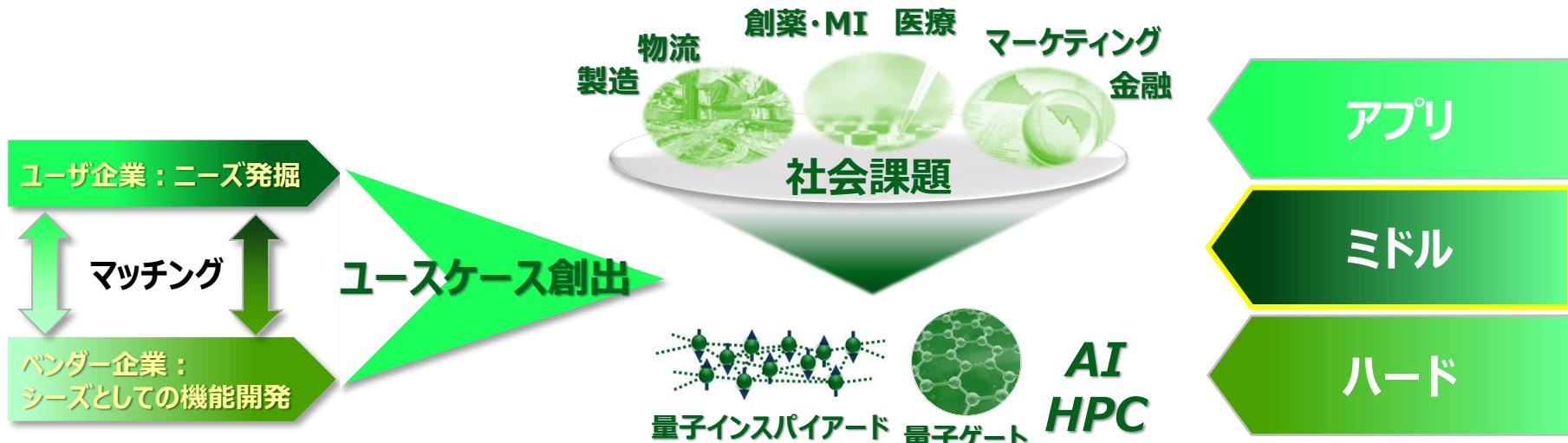
- 量子インスパイアード(デジタルアニーラ等)を軸にHPC、AIによるコンピューティング技術融合で課題を組合せ最適化問題に落し込んで解決
- 量子ゲートコンピューティング技術も含むハイブリッドコンピューティングによる産業分野の様々な課題解決



# ハイブリッドコンピューティングへの期待

FUJITSU

- 量子技術の産業化は**ハイブリッドコンピューティングが重要**
- ハイブリッドコンピューティング：アプリの応じて適材適所のコンピューティング技術を活用、**ミドルが鍵**
- **ミドル開発には、ハードとアプリが揃っていることが重要**であり、現在日本は、量子インスパイアードというハードを有している点で世界を一步リード。
- **量子インスパイアード活を軸にしたアプリ開拓、ミドル開発を先行して行うことで、量子ゲートが来た際も、産業化に迅速に対応**





# Thank you

