

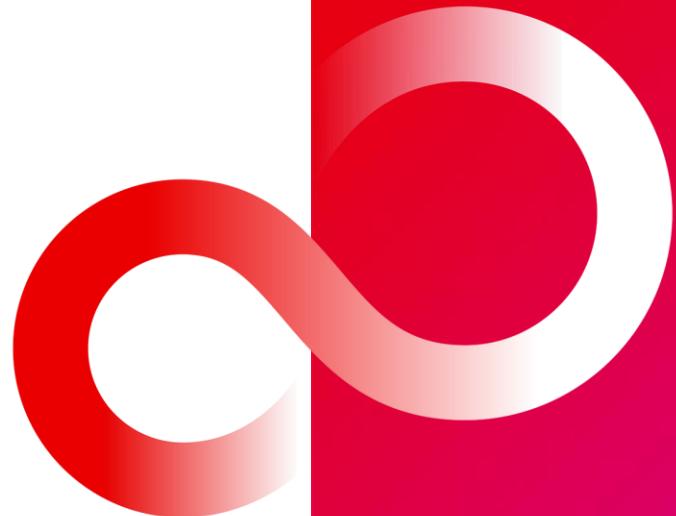
デジタルアニーラとその応用

2022年9月26日

Strategic Engagement Office

Executive Director

岩井 大介



コンピューティング業界は何を追いかけてきたか

FUJITSU

■ コンピュータに掛ける夢

あらゆる問題に一瞬で答えを出し決して間違わない何か

その時々の過剰な期待に短期的に応えられたかは疑問

- ・ 時間をかけて夢を実現したことは間違いない

■ ただ、従来の延長線上の夢は終焉を迎えるつつある

- 延長線上ではないもの…

- 人工知能（AI）、量子コンピュータ……

- デジタルアニメーション

デジタルアーニーラとは

デジタルアーニーラのビジネス展開

デジタルアーニーラを軸とする応用事例

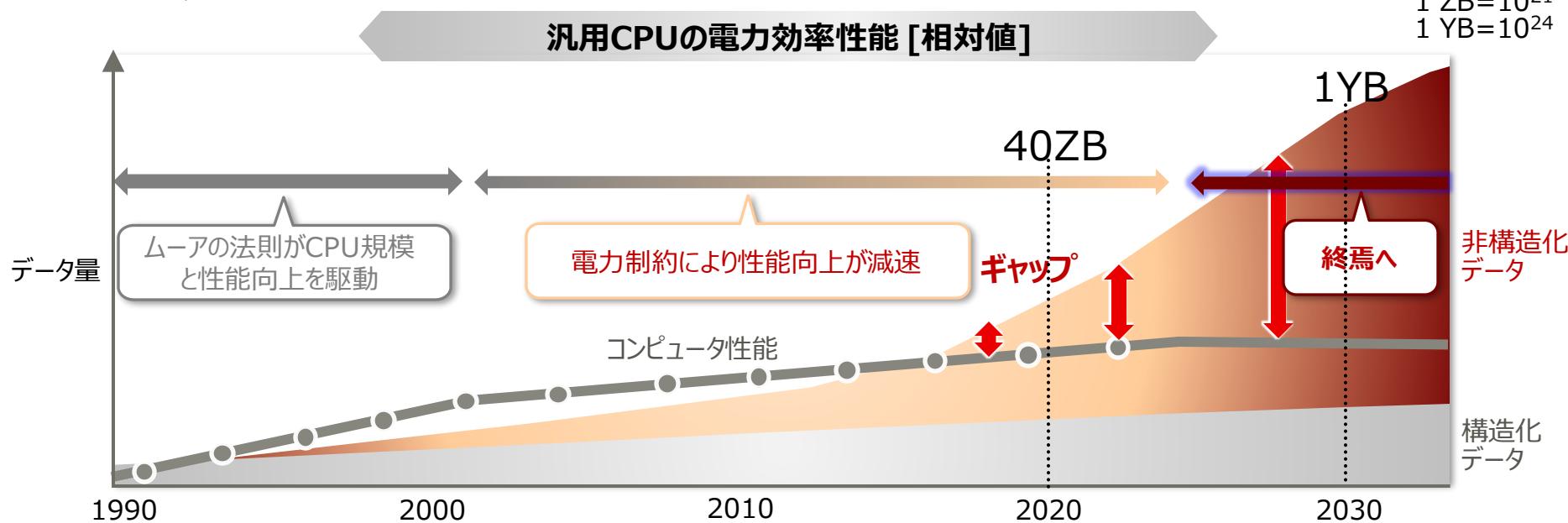
従来コンピュータの限界

FUJITSU

- 社会やビジネスのデジタル革新に伴い、より高度で複雑な大量データを高速に処理するコンピュータが重要だが、ムーアの法則*にあるような、コンピュータ性能の大幅向上はもはや限界。

* ムーアの法則：半導体業界において、1つの集積回路に実装される素子の数は18ヵ月ごとに倍増する、という経験則。

1 ZB = 10^{21}
1 YB = 10^{24}



次世代コンピュータとしての方向性と有力候補は？

ドメイン指向コンピューティング

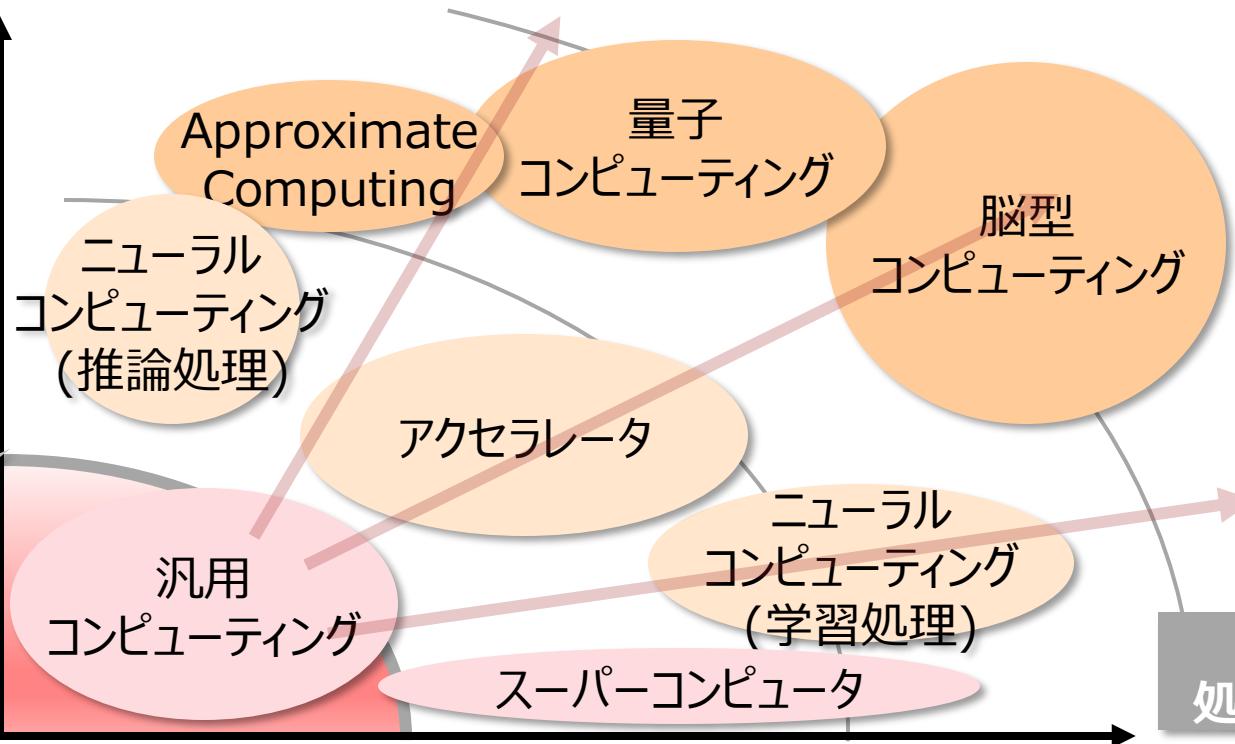
FUJITSU

- 従来の性能指標の延長では無く、処理の特性に特化し進化させたアーキテクチャ(ドメイン指向)が成長

処理の特性
に特化

ムーア則の
限界

従来の
処理性能指標



進化を実現する方向性

FUJITSU

従来のアーキテクチャ

汎用



これからのアーキテクチャ

シンプルな専用コア

処理の特性に特化し無駄を排除

逐次 + 並列



超並列

膨大な演算を並列に処理

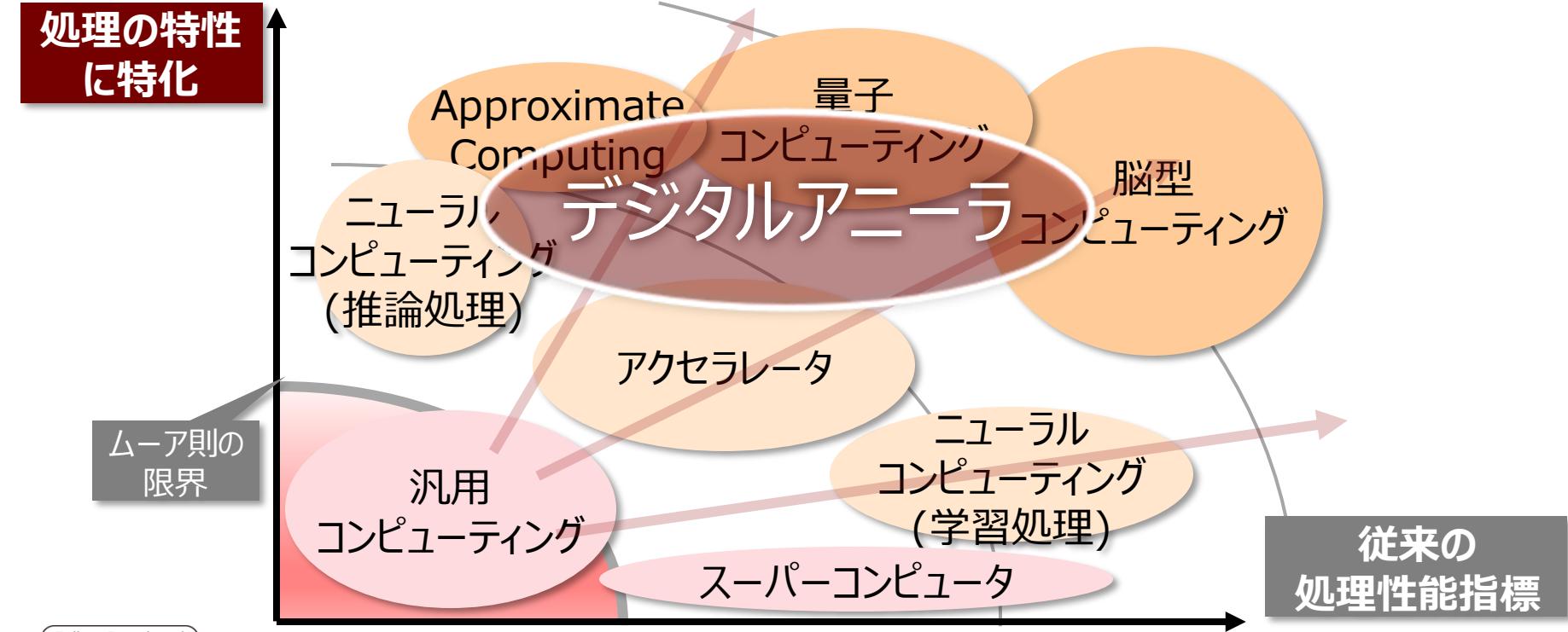
厳密な値の精度



処理に応じた精度

“いい加減”で処理を効率化

ドメイン指向コンピューティングとしてのデジタルアニーラ FUJITSU



■ デジタルアニーラ

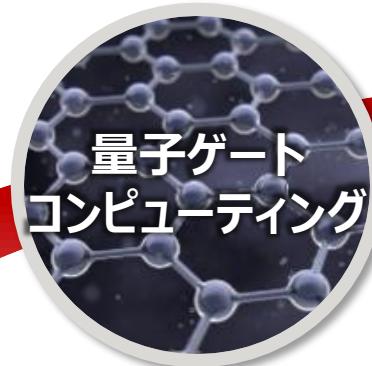
- 物理学の磁性体簡易モデルであるイジングモデルの最適化問題に特化したコンピューティング
- 組合せ最適化問題に能力を発揮

■ 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



組合せ最適化問題適用分野



物流・製造分野

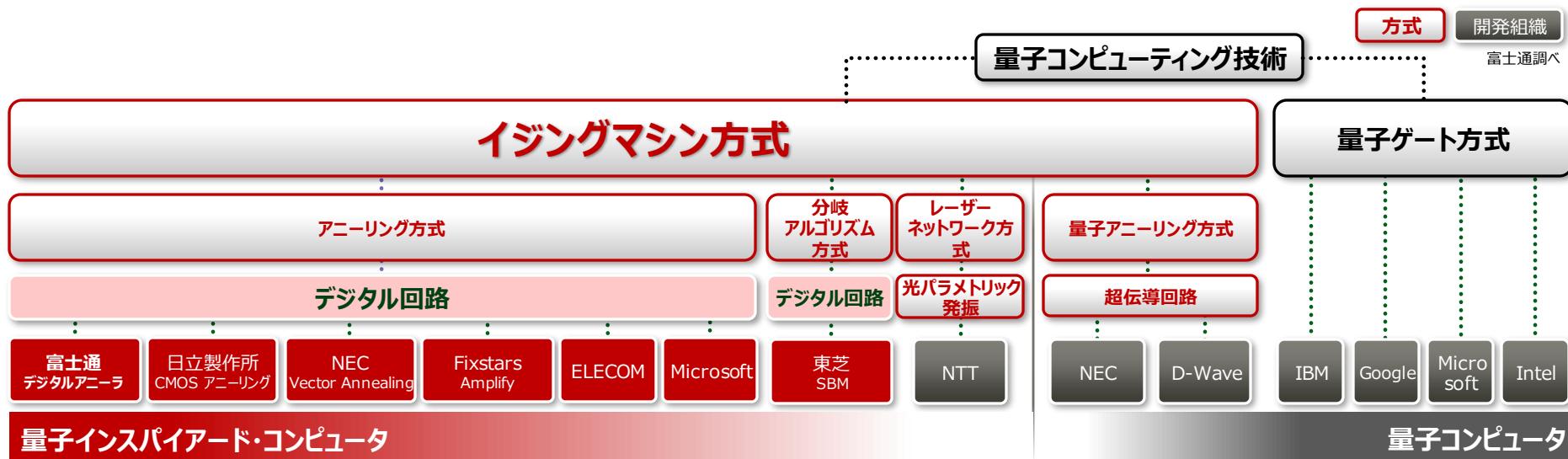


創薬・材料分野



金融分野

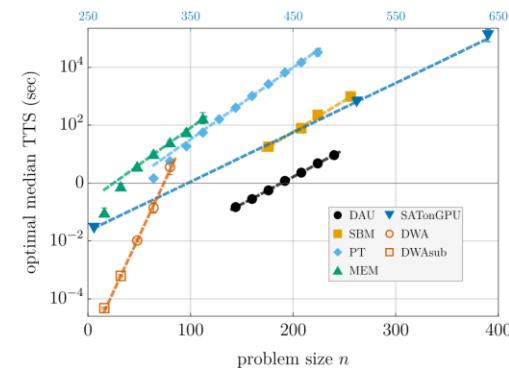
- イジングマシン方式の多くは、量子インスパイアード、日本が先行
- 量子ゲート方式は、各社開発途上（規模、誤り耐性）



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 ^[1] | D-Wave ^[3] | 東芝 ^[4] | 日立 ^[6] | NEC ^[7,8] |
|--------------|--------------------------------------------------------------|-----------------------|--------------------------|-----------------------|------------------------|
| 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 ^[2]) | 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 ^[5] | 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

*1 <https://www.fujitsu.com/jp/group/labs/en/about/resources/tech/techintro.html>

*2 <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/11/9.html>

*3 <https://www.dwavesys.com/solutions-and-products/systems/>

*4 <https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.html>

*5 https://www.itmedia.co.jp/news/articles/1907/30/news030_3.html

*6 <https://www.hitachi.co.jp/rd/news/topics/2019/0830.html>

*7 <https://jpn.nec.com/nec-vector-r-annealing-service/index.html?nid=jpntop211051>

*8 鷹野ら、IEICE Technical Report CAS2019-47, MSS2019-26

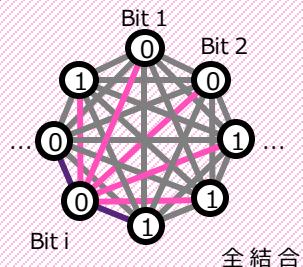
既存のシリコン半導体技術をベースに実問題を解決

量子アニーリング

- ・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

- ・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）

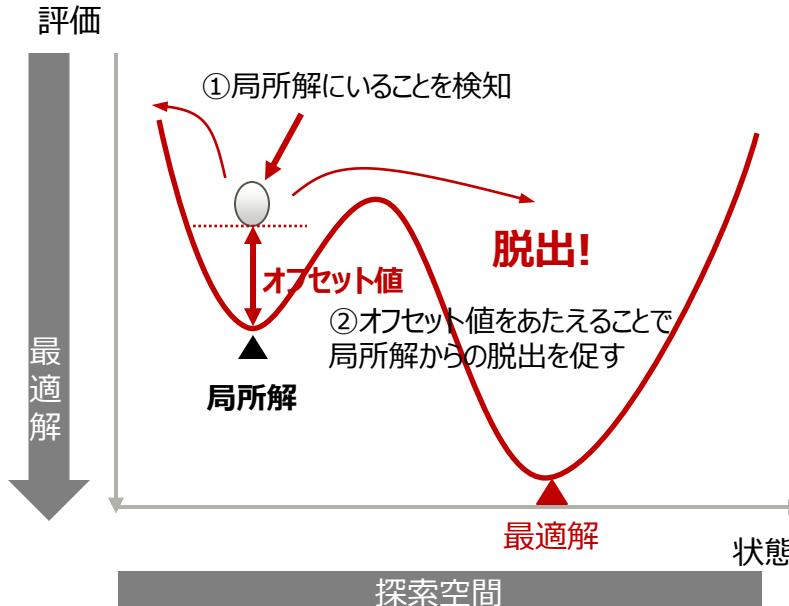


高速の求解性能を実現する2つの独自技術

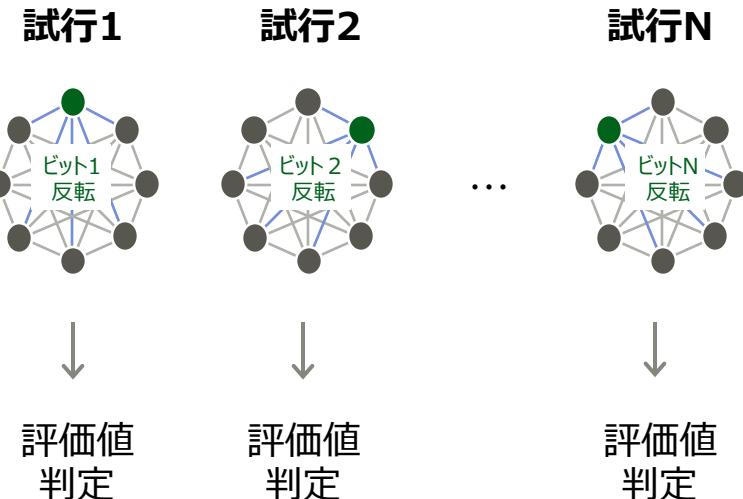
FUJITSU

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



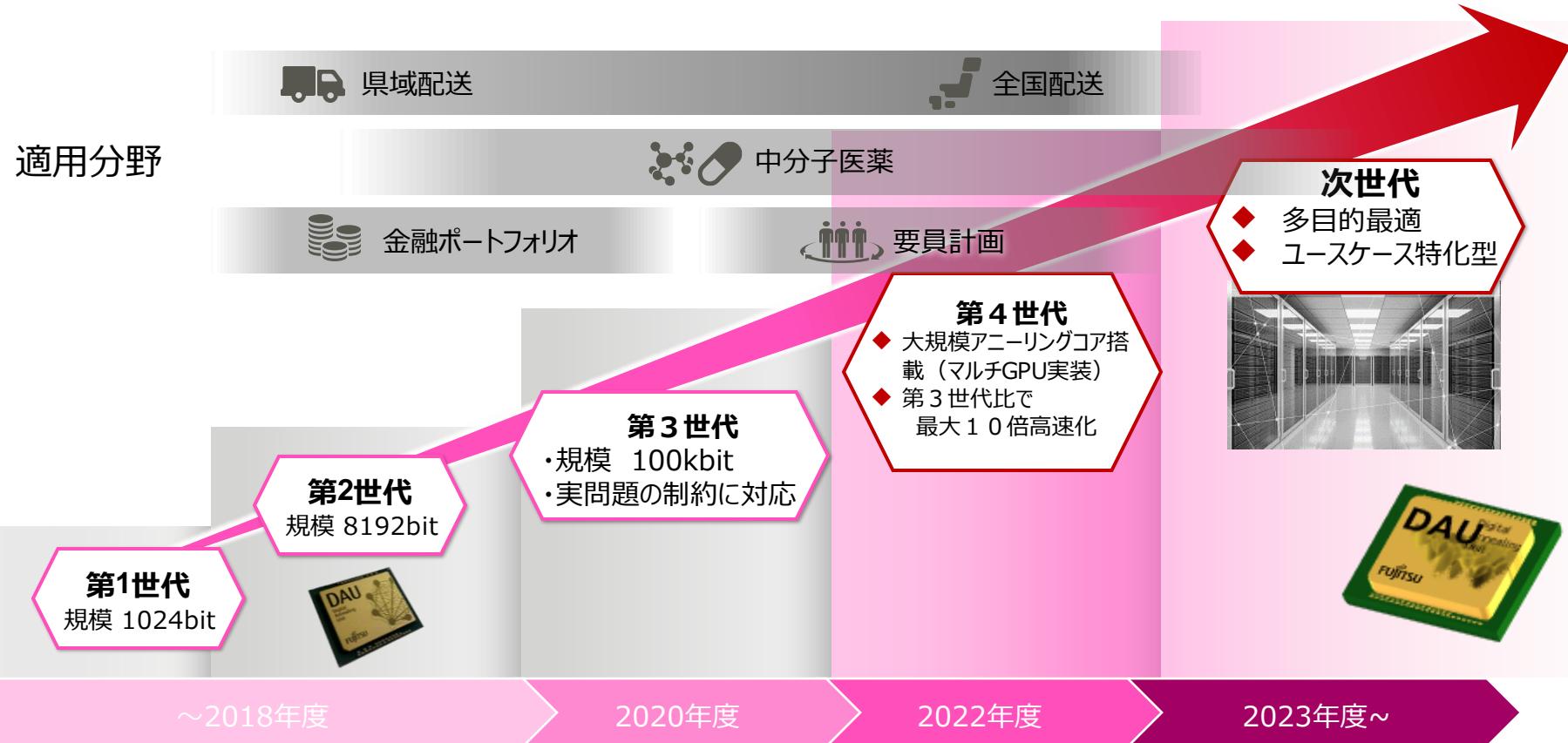
オフセット値を与えることで
局所解からの脱出を促し、最適解を導く。



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



「組合せ最適化問題」とは

- 与えられた「組合せ」の中から、指定された条件を満たす「一番良い組合せ」を選び出す問題

例) 巡回セールスマン問題

各都市を**必ず1回だけ通る**という制約のもとで、
距離が最小となる巡回ルート（最短経路）を見つける問題

N個の都市



選択肢：都市の数

経路の組合せ



評価項目：都市間の移動距離
制約条件：1都市に1回

一番総距離が短い経路



最適解(最適値)：最短経路

5都市なら120通り → 32都市 2630京×1京通り 組合せ数は指数関数的に増加

巡回セールスマン問題

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで、距離が最小となる巡回ルート（最短経路）を見つける問題

1. 解きたい問題の最適解(最適値)を定義する

一番総距離が短い経路



最適解(最適値)[※]:最短経路

※何を最適解(最適値)とするか 巡回セールスマン問題においては、最短経路(=最小値)であるが、問題によっては最大値が最適解になることもある。

NEXT

最短経路を導くには**何の情報と何の情報を組合せれば求められるのか？**

2. 変数/制約条件を定義する

最短経路を導くには、

訪問する
順番

訪問する
都市

…巡回セールスマン問題における**変数**^{*}

を組合せれば求められる。

※何を変数とするか 最適解を決めたい要素を変数とする。
巡回セールスマン問題においては、訪問する都市とその順番が**変数**となる。

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで

この問題における**制約条件**

NEXT

最適解/変数・制約条件を定義した問題を
デジタルアニーラで解けるようにするには？

デジタルアニーラで「組合せ最適化問題」を解く手順

②

FUJITSU

巡回セールスマン問題

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで、距離が最小となる巡回ルート（最短経路）を見つける問題

3. デジタルアニーラで解ける数式をつくる

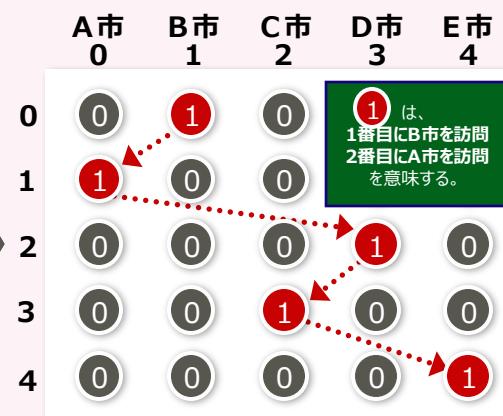
数式をたてるために、イジングモデルをつくる

イジングモデル：変数の「なし」「あり」を「0」「1」で表現できるようにしたモデル

| | | 訪問都市(i,j) | | | | |
|--------|---|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| | | A市 | B市 | C市 | D市 | E市 |
| 訪問順(t) | 0 | x ₀₀ | x ₀₁ | x ₀₂ | x ₀₃ | x ₀₄ |
| | 1 | x ₁₀ | x ₁₁ | x ₁₂ | x ₁₃ | x ₁₄ |
| | 2 | x ₂₀ | x ₂₁ | x ₂₂ | x ₂₃ | x ₂₄ |
| | 3 | x ₃₀ | x ₃₁ | x ₃₂ | x ₃₃ | x ₃₄ |
| | 4 | x ₄₀ | x ₄₁ | x ₄₂ | x ₄₃ | x ₄₄ |

- 制約 条件
複数の都市に同時に滞在できない
各都市を必ず1回だけ通る
→各行/各列1つのみ選択可能

- 黒い丸が1ビットを表す
- デジタルアニーラ第二世代では8192ビットまで対応



- 1ビットは「0」(なし)か「1」(あり)になることができる
- 何番目にどの都市を訪問するか(=最適解)を①で表せる。
→デジタルアニーラで解ける問題になっている。

4. デジタルアニーラで解く

デジタルアニーラに式を投入
→最適解(最適値)を確認

目的関数

$$E = \sum_{t,i,j} d_{ij} x_{ti} x_{(t+1)j} +$$

E=エネルギーを最小化/最大化する関数
t,i,j : 訪問する都市
t : 訪問順

制約項

$$\alpha \sum_t \left(\sum_i x_{ti} - 1 \right)^2 +$$

制約条件

複数の都市に同時に滞在できなり

$$\beta \sum_i \left(\sum_t x_{ti} - 1 \right)^2$$

制約条件

各都市を必ず1回だけ通る

デジタルアニーラとは

デジタルアニーラのビジネス展開

デジタルアニーラを軸とする応用事例

Computing as a Service Vision



アプリケーション



プラットフォーム

AI

シミュレーション

データ解析

Computing as a Service

超低消費電力

巨大なコンピューティングパワー

トラスト基盤

Available on
Public Cloud
(Amazon Web Services
/ Microsoft Azure)

ミドルウェア

OS

ハードウェア

High Performance Computing (HPC)



A64FX Technology

Quantum-Inspired Technology



Digital Annealer



Quantum Simulator

Quantum Technology



Superconducting Qubit
Diamond Spin Qubit

写真提供：理化学研究所

「Fujitsu Computing as a Service」の全体像

FUJITSU

Fujitsu
Uvance



幅広い分野への適用

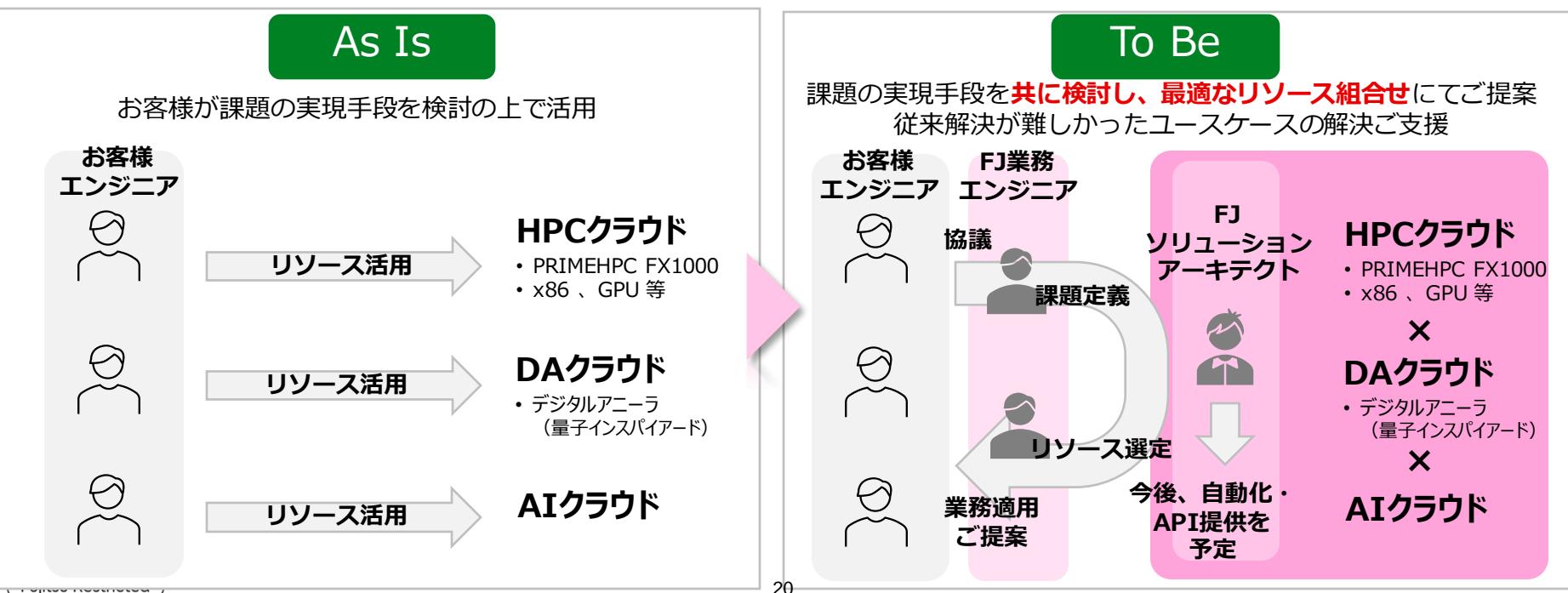
Uvance
Core Application



誰もが容易に利用でき
る高度なコンピュー
ティング技術



- お客様課題に応じて最適な計算リソースの組合せ活用をAPIとして提供
- 当社の業務エンジニアとソリューションアーキテクトが連携してお客様業務のDX化を加速



デジタルアニーラとは

デジタルアニーラのビジネス展開

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

分子
類似性
検索

放射線
治療

物流
ネットワーク
最適化

スペクトル
解析

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

デジタルアニーラの適用領域



イジングマシン方式を活用した組合せ最適化問題を中心に取り組みが進展

| | 机上・理論検証（公開ペーパー有） | 実証実験・社会実装 |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| 物流・交通 | マルチモーダルシェア(DENSO) 配送計画最適化(富士通)*1 部品物流最適化(富士通)*2 LNG船経路最適化(富士通)*3 宇宙ゴミ除去経路最適化(富士通)*4 北京の交通量最適化(Volkswagen) | 自動車船積付最適化(富士通)*5 バンコクの交通量最適化(DENSO、豊田通商) |
| 製造 | 要員計画最適化(富士通)*6,7 ロボットアーム操作(BMW) 自動車のキャリブレーションテスト(AISIN、AW) グラフ彩色(LOCKHEED MARTIN) フォルトツリー解析(AIRBUS) | 倉庫ピッキング最適化(富士通)*8 無人搬送車経路最適化(DENSO) 生産計画最適化(NEC) |
| 金融 | ポートフォリオ最適化(1QBit) AIで株価予測(野村アセットマネジメント) リバースストレステスト(HSBC) ポートフォリオ最適化(富士通)*9,10 | ポートフォリオ最適化(富士通)*11 |
| 情報 | 広告入札最適化(リクルートコミュニケーションズ) 航空写真からの樹木判定(NASA) 行列因子分解(Los Alamos) Web広告の効果最大化(富士通)*12 基地局割当最適化(富士通)*13,14 スタジアム座席配置最適化(富士通)*15 | ホテルリコメンド最適化(DENSO、豊田通商) |
| 材料・創薬 | 創薬でのスクリーニング(富士通)*16 分子類似性検索(富士通)*17 タンパク質安定構造探索(富士通)*18 | 中分子ペプチド創薬(富士通)*19 半導体材料最適配合探索(昭和電工、富士通)*20 |
| 医療 | 放射線治療計画最適化(富士通)*21 | |

* イジングマシン（量子インスペイアード、量子アニーリング）を活用した組合せ最適化問題

(ご参考) デジタルアニーラの適用領域:文献



- *1: <https://www.fujitsu.com/downloads/JP/microsite/fujitsutransformationnews/journal-archives/pdf/2019-06-14-01.pdf>
- *2: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/09/10-1.html>
- *3: <https://mirai.jogmec.go.jp/digital/column/01-04.html>
- *4: <https://www.nikkei.com/article/DGXZQOUC24C5Y0U1A820C2000000/>
- *5: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/09/2.html>
- *6: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/11/9.html>
- *7: https://www.fujitsu.com/jp/about/resources/publications/technicalreview/topics/article010.html?utm_source=twitter&utm_medium=social&utm_campaign=official20210805
- *8: https://www.fujitsu.com/downloads/JP/solutions/industry/retail/dl-contents/rtj/2020/pdf/R03-2_Digital-Annealar.pdf
- *9: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2018/10/23-1.html>
- *10: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2019/08/30-1.html>
- *11: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/02/7-1.html>
- *12: <https://prtetimes.jp/main/html/rd/p/000000165.000010742.html>
- *13: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/02/24.html>
- *14: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/03/18.html>
- *15: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/06/17.html>
- *16: <https://www.fujitsu.com/global/services/business-services/digital-annealer/accelerating-drug-discovery/>
- *17: https://www.jstage.jst.go.jp/article/vss/63/3/63_20180509/_pdf/-char/ja
- *18: <https://www.fujitsu.com/jp/about/resources/case-studies/vision/toray/>
- *19: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/10/13.html>
- *20: <https://www.sdk.co.jp/news/2022/41712.html>
- *21: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2021/02/26.html>

デジタルアーニーラとは

デジタルアーニーラのビジネス展開

デジタルアーニーラを軸とする応用事例：物流関連

物流事例

トヨタシステムズ 様

自動車製造に必要な部品の 物流ネットワークを最適化

- ✓ 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小化
- ✓ 物流に関わるコストを2%～5%削減
- ✓ 30分以内に求解

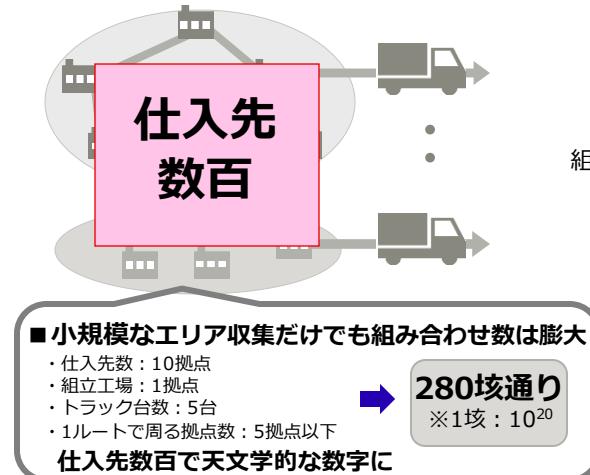
FUJITSU



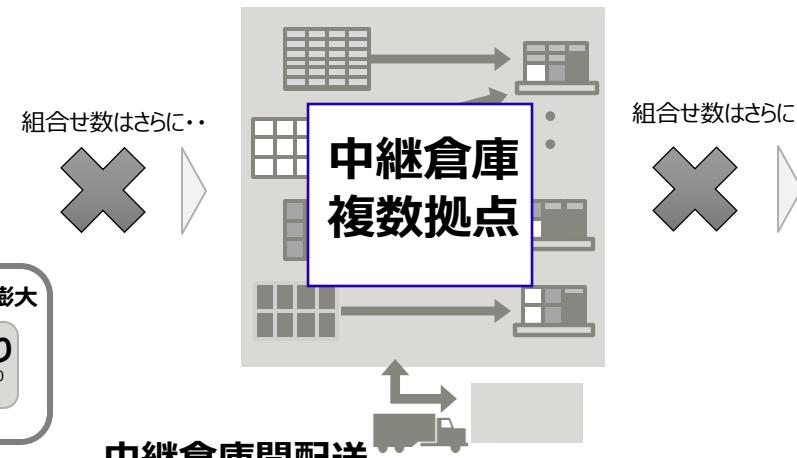
配送計画
最適化

● 大規模な物流ネットワークのコスト最小化

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

物流事例

日本郵船株式会社 様

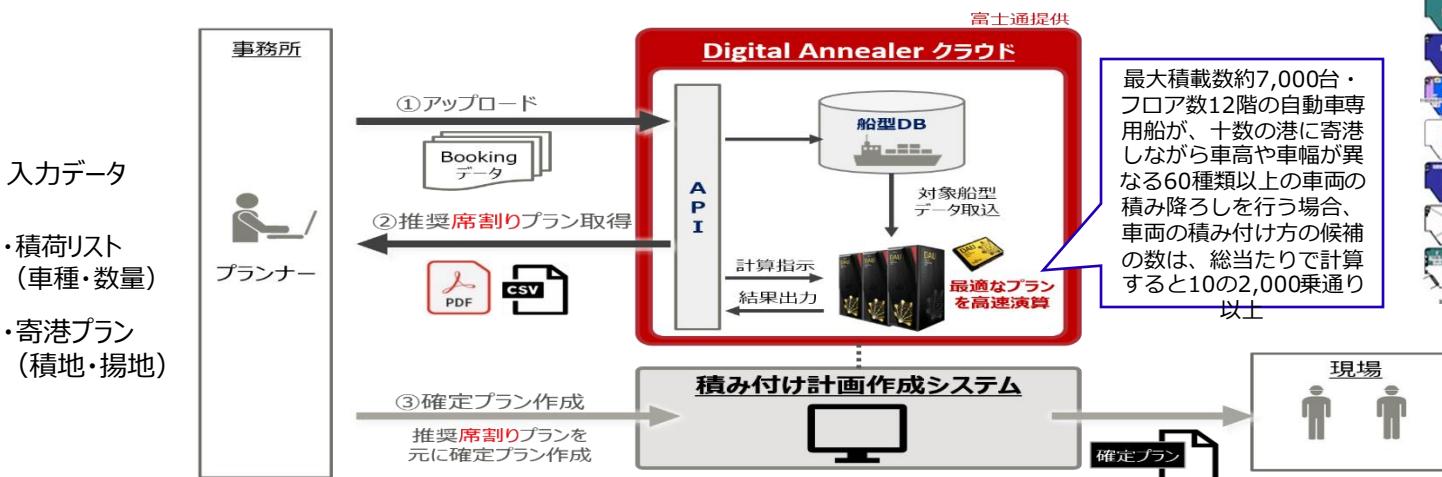
自動車専用輸送船への車両の 積み付けプランを最適化

- 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

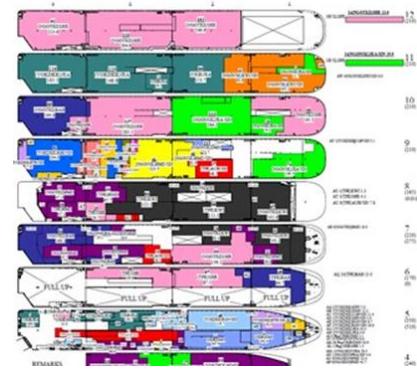


● 自動車専用船の積み付け計画作成業務を効率化

- 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

独立行政法人
石油天然ガス・金属鉱物資源機構 様

LNG運搬経路の最適化

- LNG供給経路（基地～仕向先サプライチェーンモデル）の CAPEX+OPEXが最小になるプランを作成
- 20年間の長期輸送におけるLNG船必要数を6→5隻に。ルート最適化により輸送コストを約12%削減
- LNG生産地の増加、仕向先ガス需要量の増減に対して条件変更によりコストを再計算し最適化できることを検証



LNG船舶輸送の最適化

FUJITSU

● 概要

- LNG生産地（ボンタン）から15か所の供給仕向港に対し、LNG運搬船を20年間運航した場合のコスト（CAPEX+OPEX）が最も安くなる船サイズ・船数・仕向地の地上タンクサイズ・船の運航ルートの組合せを算出



| | 設定条件 | Phase1要件定義 | Phase2要件定義 |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| LNG船 | LNG船の隻数 LNG船の運航速度 荷役能力（時間） メンテナンス | 任意（期間中固定） 固定（14 Knots） 固定（6時間） なし（操業費に含む） | 任意（追加が可能） 固定（14 Knots） 固定（21時間） なし（操業費に含む） |
| 港 | 港の数 港のタンクサイズ 港の需要量 港の寄港費 港への接岸条件（サイズ） 港の寄港可能条件（時間） 生産地（DEPOT） 生産地のLNG生産期間 ハブ港 | 固定（15） 任意（期間中固定） 固定 固定 あり（固定） 24時間 ボンタン 期間中生産可能 設定可能 | 固定（15） 任意（追加が可能） 増加あり 固定 あり（接岸投資を考慮） 指定時間（6時～18時） ボンタン、アバディ ボンタン：全期間、 アバディ：10年後以降 設定可能 |
| その他 | 揮発量 割引率 税額控除 | なし なし なし | なし あり（割引率：10%） あり（税額控除：25%，15年間） |

結果

必要なLNG船数を**6隻から5隻**に削減
総コストを**約12%削減**できるルート発見

さらに、以下のようなモデルを作成し、選択される組合せの変化や20年間の総コストの増減を確認

- 各仕向地でのガス需要量を増加させた場合
- ボンタン、マセラ（アバディ）の2か所を生産地とした場合 等

デジタルアニーラとは

デジタルアニーラのビジネス展開

デジタルアニーラを軸とする応用事例：製造関連

生産計画事例

大規模な生産計画を最適化

- ✓ 従来手法で解けなかった大規模問題として知られる
生産計画問題を最適化
- ✓ 多品種少量のサーバ生産スケジュールを作業順序、
作業者の技能レベル、休憩時間、
設備利用可能時間など複雑な制約条件下で計算
- ✓ 作業数100、設備数12、作業者数13、
時間スロット65で100万ビット規模の問題を求解

プレスリリース：2020年 11月9日

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/11/9.html>

FUJITSU

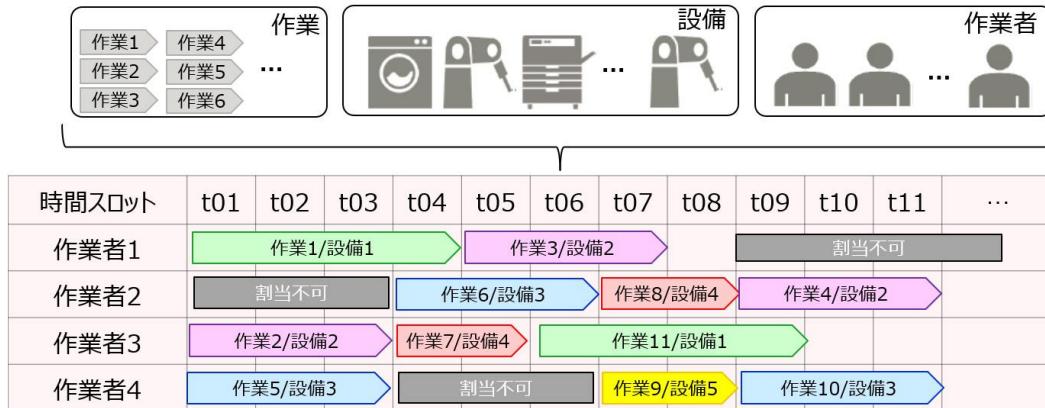


生産計画
最適化

生産スケジューリングの最適化

FUJITSU

■ 100万ビット級の実用問題を求解



100万ビット問題スケジューリング結果 [100作業×12設備×13人×65スロット]

課題

複数の作業に対し、作業者と各設備を適切な時間スロットに割り当て、更に資格やスキルを条件設定したスケジュールを作成

複雑な制約条件を満足させ
作業順序、設備利用時間に
適切な人員を割り当て

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



最大で
移動距離を
45 %削減

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。

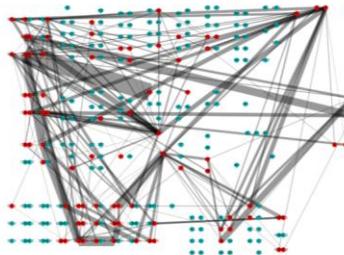


ピッキングルート最適化と組合せて運用していくことで、**ピッキング作業の更なる改善**が可能



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



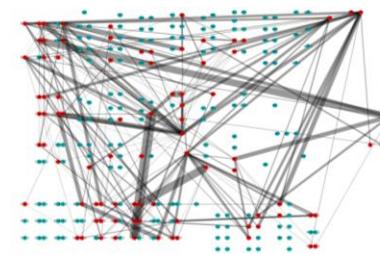
デジタルアニーラクラウドサービス



解を探索

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

デジタルアニーラとは

デジタルアニーラのビジネス展開

デジタルアニーラを軸とする応用事例：金融、情報、エネルギー

金融事例

FUJITSU

メルコインベストメント株式会社 様

運用資産の着実な成長に貢献する ポートフォリオのリスクとリターン分析

- ✓ 従来のコンピューティングでは膨大な計算量のため
事実上不可能であった数百銘柄の組合せ最適化
計算がわずか10分程度で導出
- ✓ 精度の高い計算に基づいた分析結果を
実際の資産運用業務に活用

プレスリリース：2020年2月

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/02/7-1.html>

- 一般的な平均分散ポートフォリオ最適化において、デジタルアニーラ(DA)は商用ソルバに速度面で優位性がある。
- より実用的なモデルのポートフォリオ最適化では、商用ソルバがたどり着けない良解に到達。

平均分散ポートフォリオ最適化

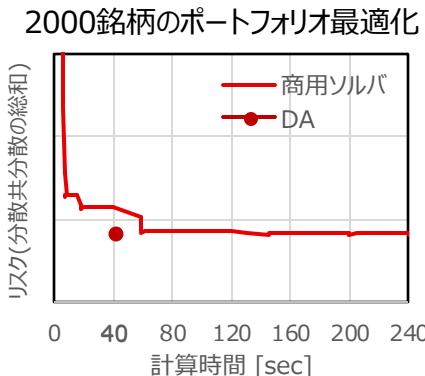
平均分散ポートフォリオ最適化とは…

- 期待収益率が投資家の要求する期待収益率以上であるという制約の下で、リスク(分散)を最小化する資産への投資比率を求める問題。

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T \sigma^2(p) x \\ \text{s. t.} \quad & \bar{r}_p^T x \geq r_E \\ & \sum_i x_i = 1 \\ & x_i \geq 0 \quad (i = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

ベンチマーク結果

- より一般的に銘柄数や取引単位を制約した平均分散モデルで性能測定を実施。
- 商用ソルバもDAも同等の良解を得られた。
- 速度面でDAが優位。



より実用的なモデルのポートフォリオ最適化

- 新たなポートフォリオ構築のため、単純な平均分散ではないポートフォリオ最適化の需要がある。

ベンチマーク結果

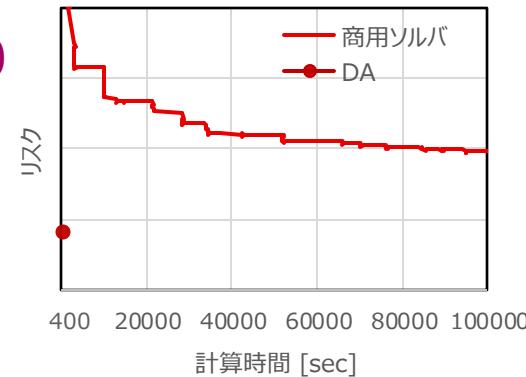
(対商用ソルバ)解精度

商用ソルバがたどり着けない良解

(対商用ソルバ)求解速度

250 倍以上

2000銘柄のポートフォリオ最適化



観客席割当最適化

ベルリンオリンピックスタジアム（ブンデスリーガ）
ニュルブルクリンク（F1, 24hレース）

観客席配置を高速に最適化

コロナ禍のスポーツイベントの安全運営と 収益性向上に寄与

- 従来の2-by-3(2席割当、3席空ける)、市松模様のような固定の割当ではなく、イベントに応じて1～4人のグループ席をソーシャルディスタンスを保って割り当てる観客席割当を高速に計算・最適化
- 観客席割当数を従来に比べ60%増やし、チケット収益の大幅増加が可能なことを確認
- 単純に5割、5000人など固定の制限ではなく、グループ席+ソーシャルディスタンスを日本でも活用できないか？



グループ席 + ソーシャルディスタンスによる
観客席割当

エネルギー事例

ウインドファームレイアウトを最適化

- ✓ 風力発電所の発電量を最大化するため、風車(タービン)の配置を最適化
- ✓ 発電量に大きく影響する上流風車による風向、風量への干渉を考慮し全体の配置を最適化
- ✓ 既存ソルバーと比較し、高速に最適解を求解



背景

● 背景

- 風力発電所の発電量を最大化するため、風向に対する風車（タービン）の配置を最適化したい
- ウィンドファームレイアウト最適化（WFLO）問題と呼ばれ、風車を事前に定義された位置に配置して、総発電量の最大化を目指す

● 課題

- 総発電量は上流の風車による風向風量への干渉に影響を受けやすい
- WFLOの風車位置の最適化アプローチは複数提案されているが、大規模な事例では適用できない



- Design of a new wind farm:
 - N cells: potential turbine locations ($2\text{km} \times 2\text{km}$ 400cell)
 - m turbines to be situated (fixed number)
- **Objective: maximize produced power**
 - **Interferences between turbines**
- Constraints:
 - Proximity (too close is not allowed)
 - Exactly m turbines

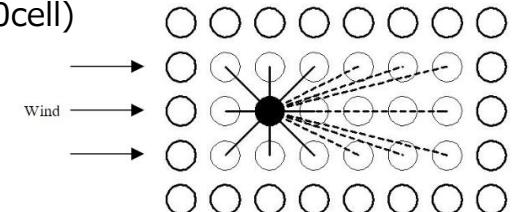
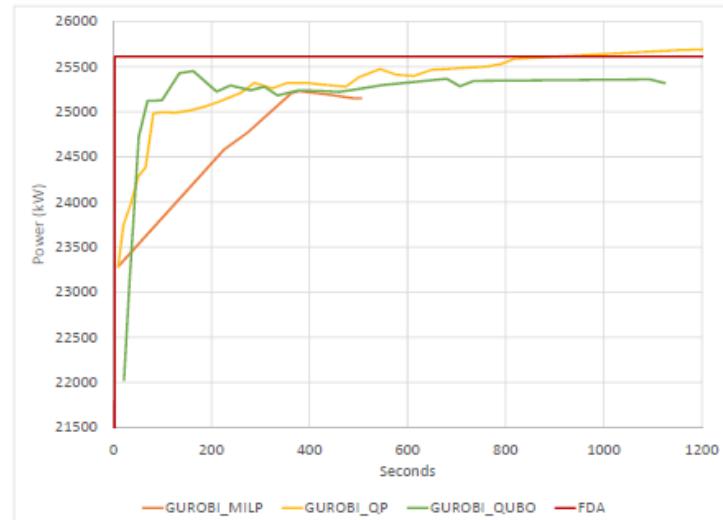


Figure 4.1: Proximity and interference effects.

- 手法（計算使用モデル）
 - QUBOモデル
 - 近接制約（上流風車の干渉の有無）を満たしつつ目的関数（予想発電量）を最大化する風車の配置を求める
 - 二次計画法モデル（QP）
 - 混合整数線形計画法モデル（MILP）
- 使用計算機の種類とモデル
 - GUROBI (GPU & 1200秒の制限時間) : QUBO、QP、MILP
 - FDA (DAU) : QUBO

デジタルアーナー(FDA)が最も短時間で最大発電量となる風車配置を見つけており、WFLOの最適化に有効である



デジタルアニーラとは

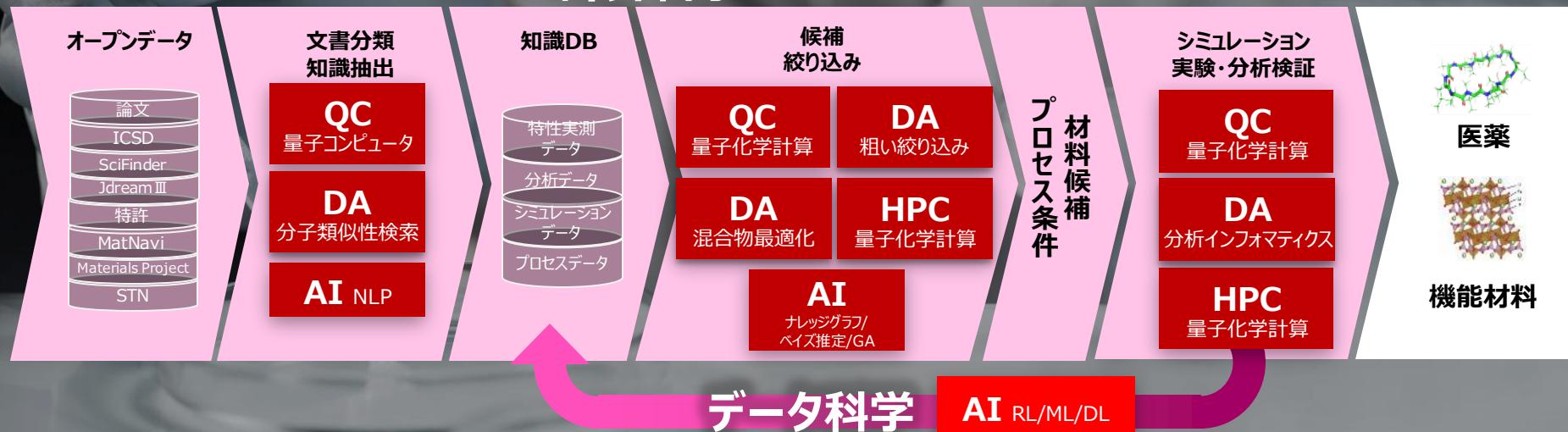
デジタルアニーラのビジネス展開

デジタルアニーラを軸とする応用事例：材料関連

● パーパス

- **デジタルアニーラ(DA)×AI×HPC**を駆使したサービス提供により、新材料開発のアプローチを変え、社会課題解決に繋がるイノベーションをお客様と共に実現する

計算科学



富士通にしかアプローチできない領域まで材料探索の可能性を広げ、研究開発を強化

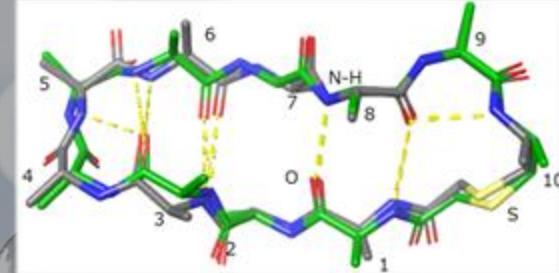
材料設計事例

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試験を2022.3に開始。

緑色：計算結果
灰色：実験結果

FUJITSU

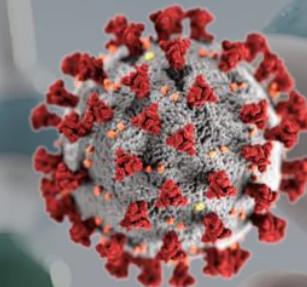


環状ペプチドの実験構造と計算構造の比較

RMSD : 0.73 Å 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

IT創薬プロセスと課題

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(MD計算)の爆発的な増加により、困難**

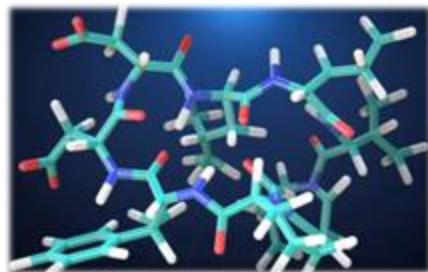
低分子：天然のアミノ酸3個の配列種類は：4200

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

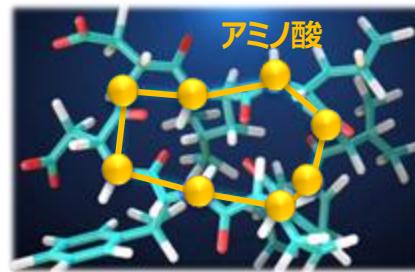
DAによる
高速絞込み技術

デジタルアニーラによる安定構造探索

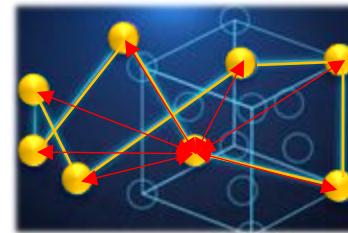
FUJITSU



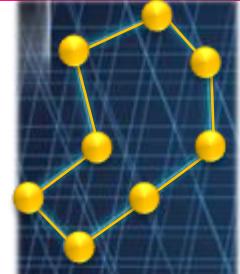
中分子環状ペプチド



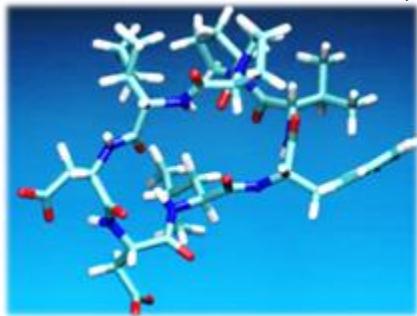
アミノ酸で括って粗視化
アミノ酸間の相互作用をAIでモデル化



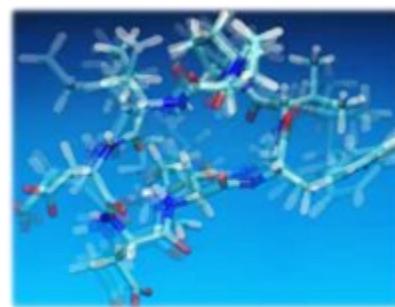
アミノ酸を格子点に配置し
アミノ酸間の相互作用を考慮
デジタルアニーラで構造探索



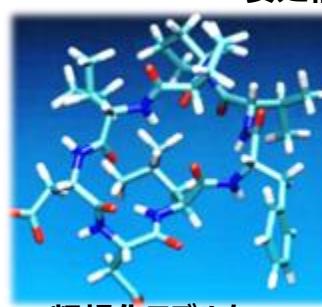
デジタルアニーラで求めた
安定構造



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

材料事例

少量・断片的・偏ったデータを最大限に活かす混合物設計支援

- ✓ 複数の要求特性に対して最適な混合成分・比率・プロセス条件を膨大な組み合わせ候補の中から探索
- ✓ 候補数が多く、複雑な問題でデジタルアニーラが威力を発揮
- ✓ 有機・無機、固体・液体問わず、幅広い混合物に適用可能

関連特許：特開2021-127418



混合・配合条件
最適化

混合成分最適化

FUJITSU

トライアル可

■混合冷媒探索

■低環境負荷冷媒(SF-10)ベースの混合冷媒

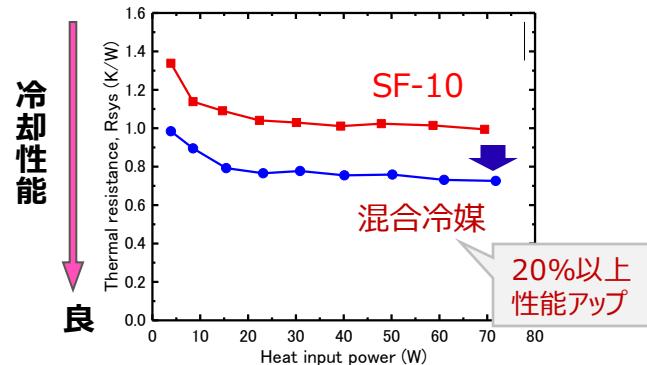
探索条件

混合候補：約40種類
→ 3成分混合

要求特性

- 熱伝導率：高
- 引火点：高
- 比熱：大
- 粘度：低

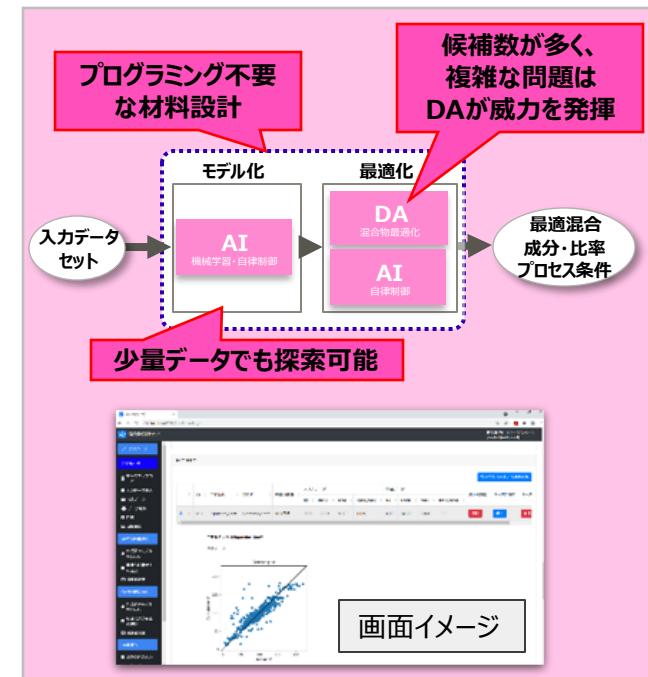
探索結果の実証実験



デジタルアニーラを使うと、膨大な混合・配合条件の組み合わせから高速に最適な解を探索可能

混合物設計ナビ(仮称)

材料開発で重要な「混ぜる」業務を支援する一気通貫型の材料設計ソリューション



材料事例

分子・結晶構造の類似性に着目した 確度の高い材料候補の絞り込み

- ✓ 膨大な候補の中から、高機能・低成本を望める代替材料を構造観点で素早く絞り込む
- ✓ デジタルアニーラ&AI&富士通独自の分子・結晶構造グラフ化技術によって、確度の高い類似度計算を実現
- ✓ 香料分子のクラスタリングや電池材料の設計に適用

関連特許：特願2020-9953

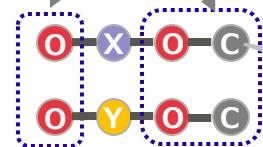


分子構造類似性に着目した材料クラスタリング

FUJITSU

■香料分子のクラスタリング

2分子グラフ間の
最大共通部分構造



+

分子全体を比較して
DAで高速求解

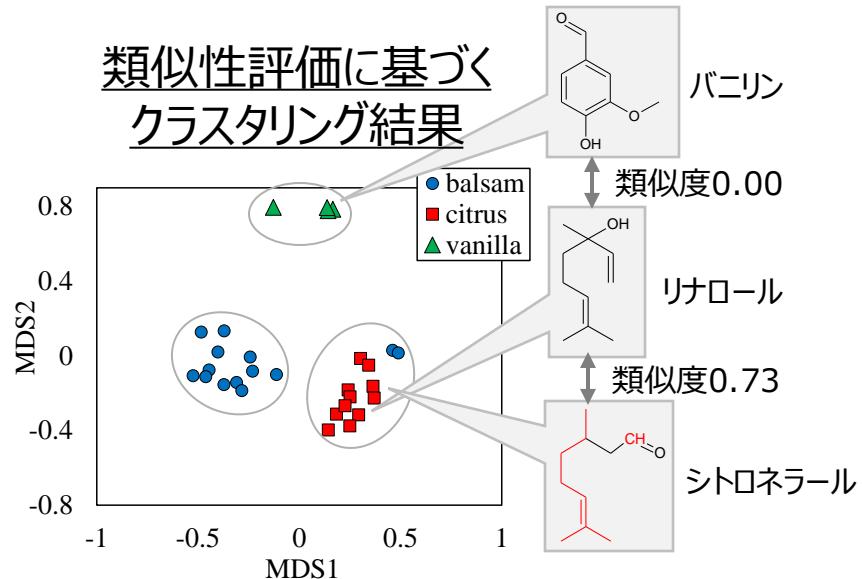
富士通独自
のグラフ化

分子構造から計算される記述子を
自動抽出、あるいはユーザー選択



類似性評価

類似性評価に基づく
クラスタリング結果



| クラスタリング指標 | ARI | SS |
|----------------|-------------|-------------|
| フィンガープリント法(従来) | 0.41 | 0.30 |
| DA利用手法 | 0.76 | 0.69 |

デジタルアニーラを使うと、代替材料の高速&高精度な絞り込みが可能

材料事例

計測スペクトルと材料特性の関係性 抽出を可能にする正則化技術

- ✓ 材料特性に直結するデータ領域を、分析データ(スペクトル・画像)から素早く抽出
- ✓ 抽出結果から特性予測やスクリーニングが可能に
- ✓ ニッケル水素電池用正極材料の開発と特性メカニズムの解明に適用

サンビーム年報・成果集 vol.11 2021

https://sunbeam.spring8.or.jp/top/seika/annual_report/vol11/vol11_2021.pdf (p.31)

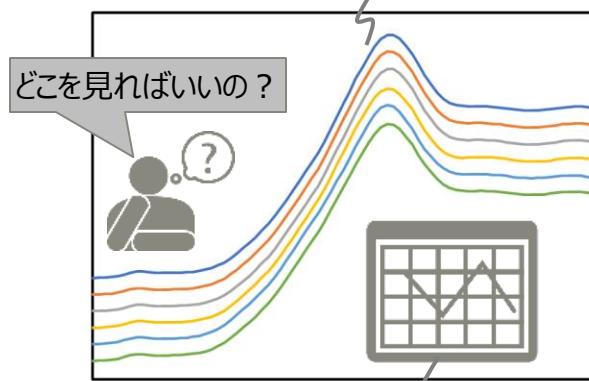


影響因子特定
高精度化

■ニッケル水素電池用正極材料の開発と特性メカニズムの解明

入力(分析・特性データ)

X線吸収スペクトル(行列A)



材料特性データ(行列y)

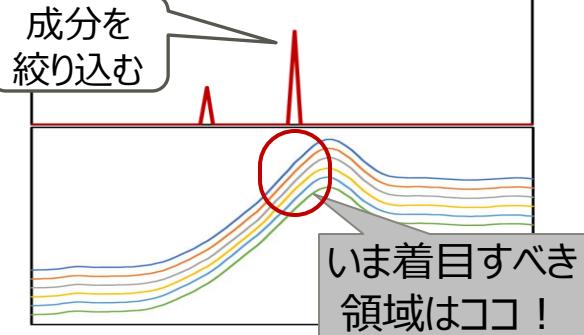
不要成分を除去し
特性に重要な成分を残す

$$\min_x \left\{ \frac{1}{2} \|y - Ax\|_2^2 + \lambda \|x\|_0 \right\}$$

L0正則化

出力(重要データ領域)

抽出結果(係数行列x)



- ・特異な化学状態の検知
- ・抽出結果による予測・スクリーニング

抽出結果の分析により、見落としのない材料開発・品質管理が実現

コンピューティング業界は何を追いかけていくのか？

FUJITSU



今後、必要なのは、…

- 実装技術、ASIC
- CaaSとしてのハイブリッド技術

Thank you

