

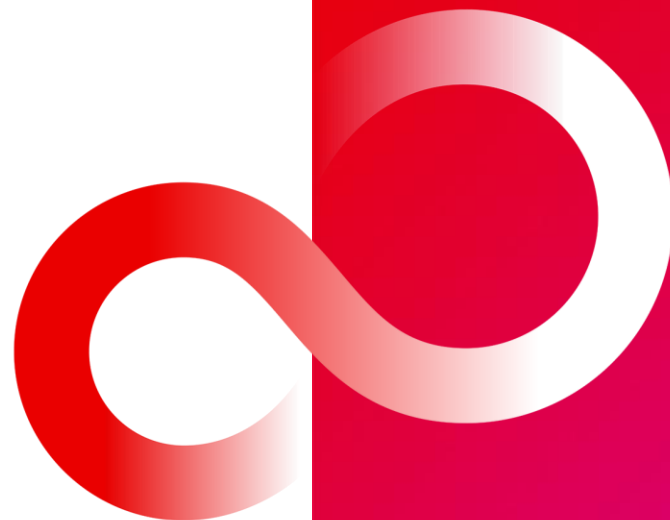
# デジタルアニーラとその応用

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

## ■ 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 of 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……  
デジタルアニーラ

# デジタルアニーラとは

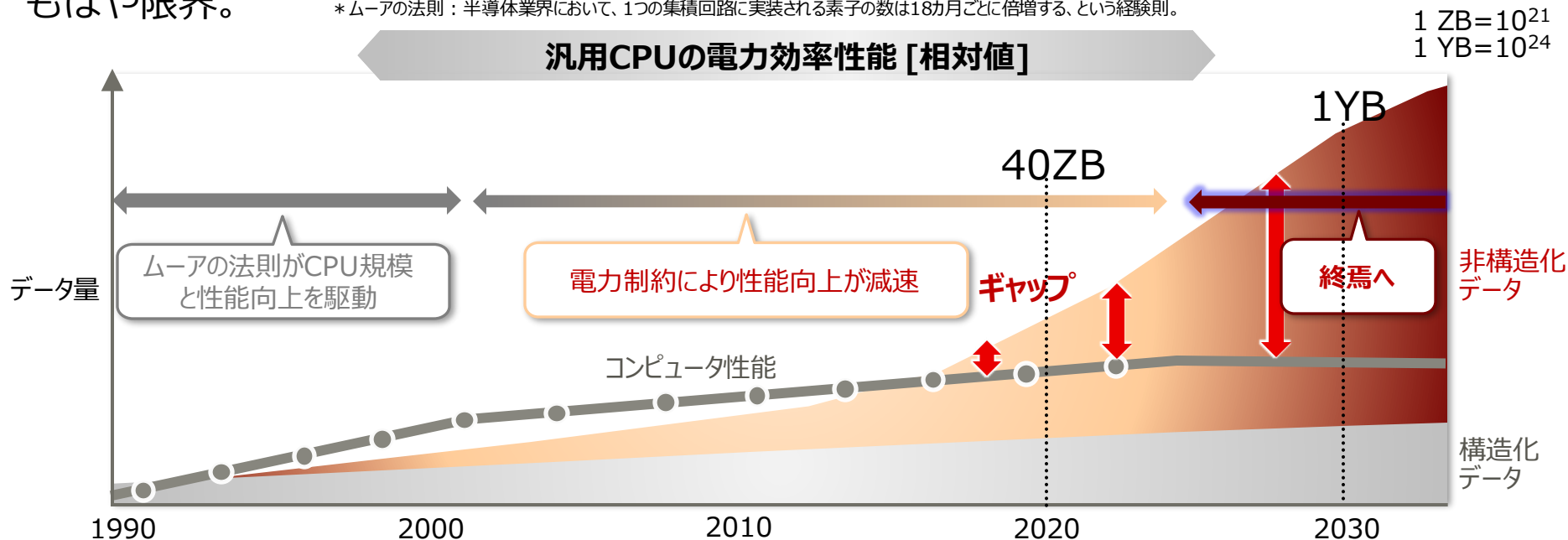
デジタルアニーラのビジネス展開

デジタルアニーラを軸とする応用事例

# 従来コンピュータの限界

- 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カ月ごとに倍増する、という経験則。

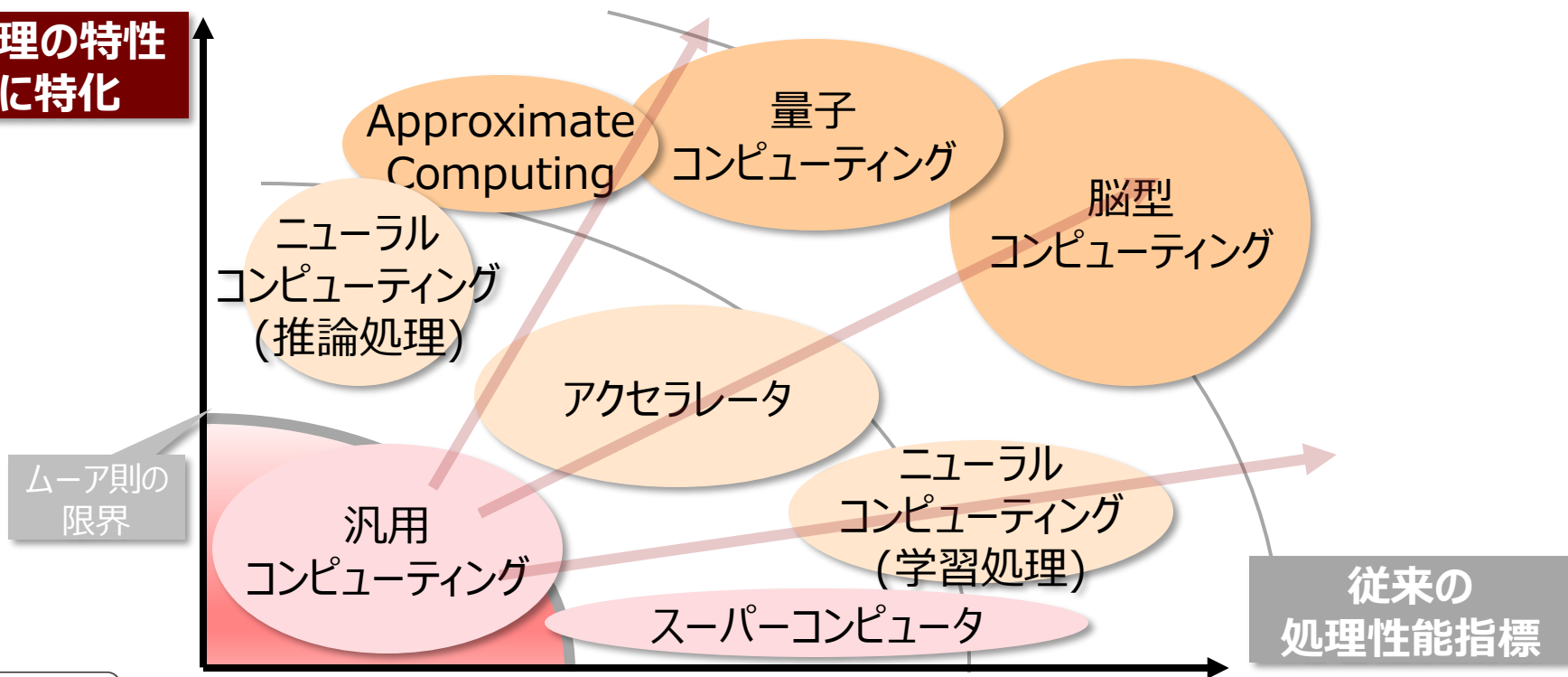


次世代コンピュータとしての方向性と有力候補は？

# ドメイン指向コンピューティング

- 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

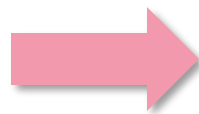


# 進化を実現する方向性

## 従来のアーキテクチャ

## これからのアーキテクチャ

汎用



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

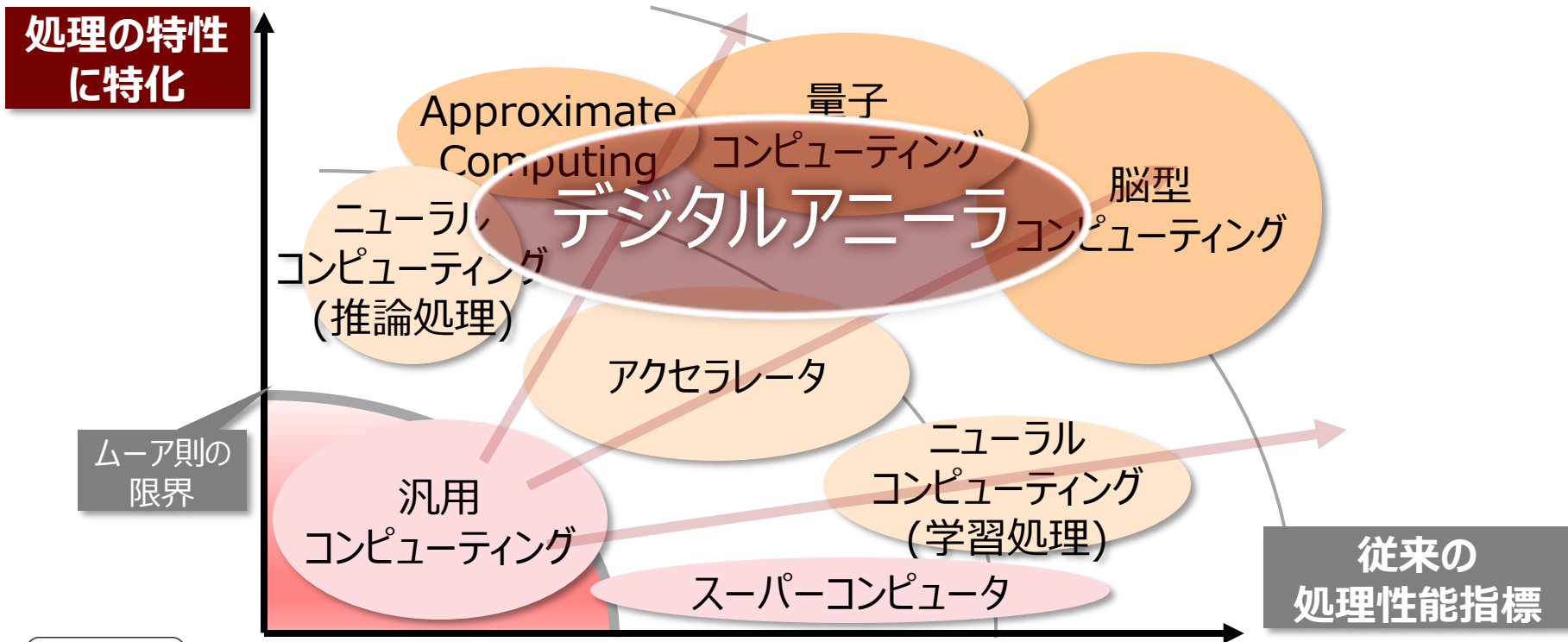


処理に応じた精度

“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メーション



## ■ デジタルアニーラ

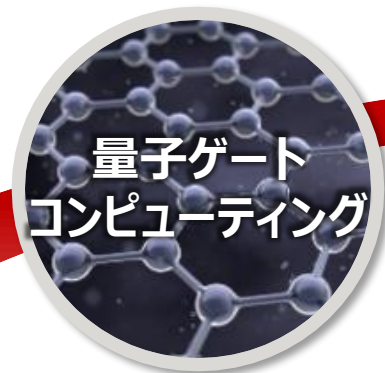
- 物理学の磁性体簡易モデルであるイジングモデルの最適化問題に特化したコンピューティング
- 組合せ最適化問題に能力を発揮

## ■ 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



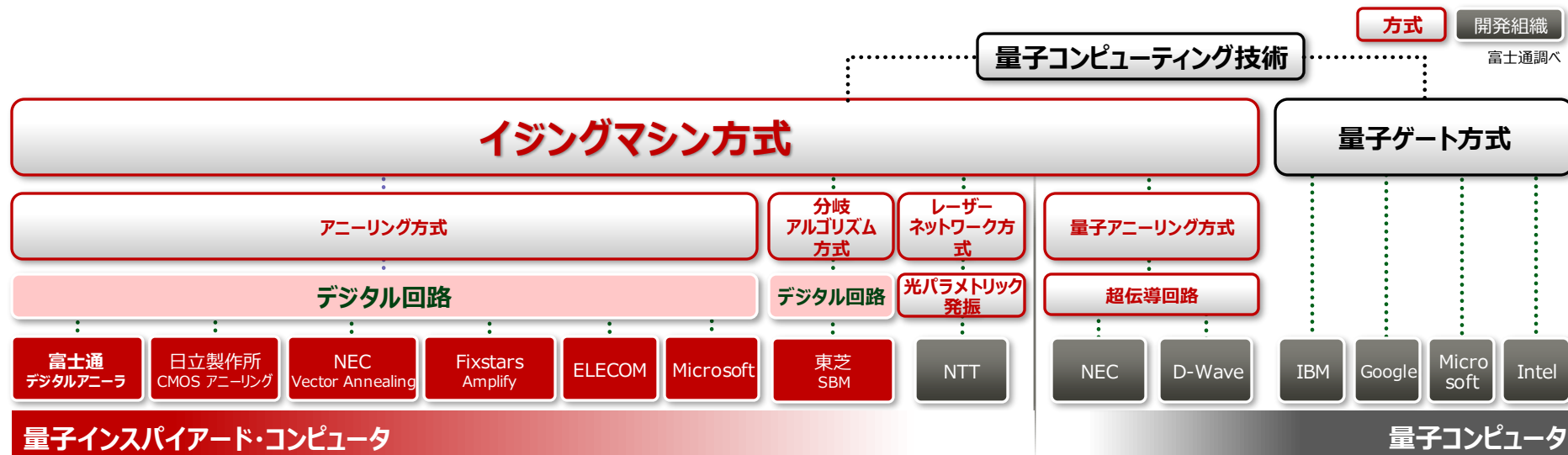
創薬・材料分野



金融分野

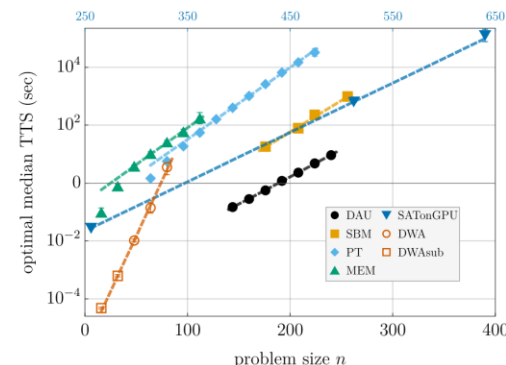


- イジングマシン方式の多くは、量子インスパイアード、日本が先行
- 量子ゲート方式は、各社開発途上（規模、誤り耐性）



## 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  
\*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](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-annealing-service/index.html?nid=jpntop211051>

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

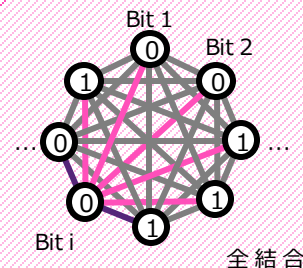
## 既存のシリコン半導体技術をベースに実問題を解決

### 量子アニーリング

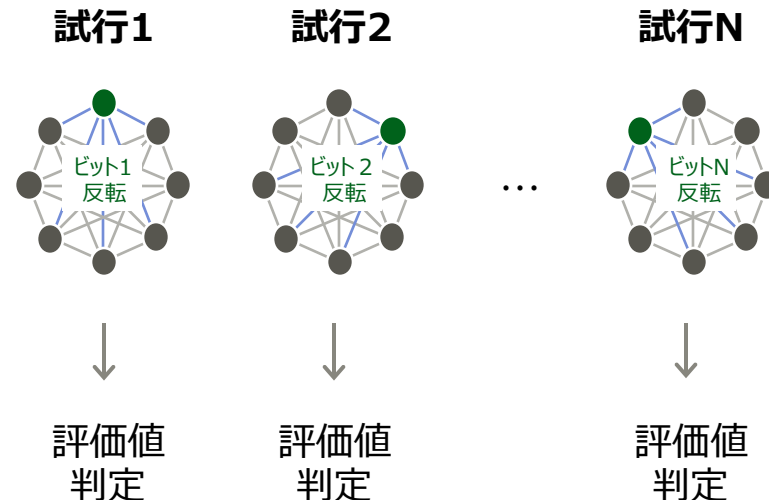
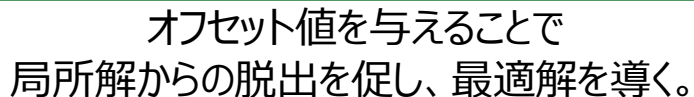
- 量子状態維持のため超低温冷却の大型装置が必要（超低温動作、大規模化が困難）
- 量子ビットが物理結合であり、結合数が少ない（複雑な実問題を求解できない）

### 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）



## 並列評価により高速に最適解を求める



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

適用分野



県域配送



全国配送



中分子医薬



金融ポートフォリオ



要員計画

**第1世代**  
規模 1024bit

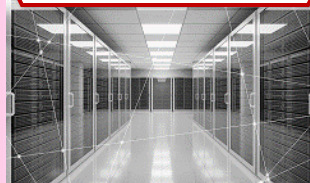
**第2世代**  
規模 8192bit



**第3世代**  
・規模 100kbit  
・実問題の制約に対応

**第4世代**  
◆ 大規模アニーリングコア搭載（マルチGPU実装）  
◆ 第3世代比で  
最大10倍高速化

**次世代**  
◆ 多目的最適  
◆ ユースケース特化型



～2018年度

2020年度

2022年度

2023年度～

# 「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

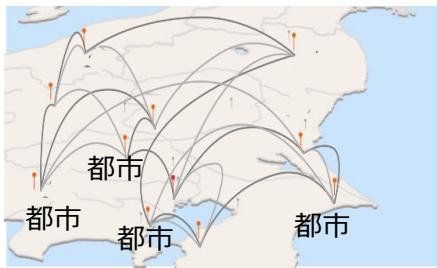
各都市を**必ず1回だけ通る**という制約のもとで、  
**距離が最小**となる巡回ルート（**最短経路**）を見つける問題

### N個の都市



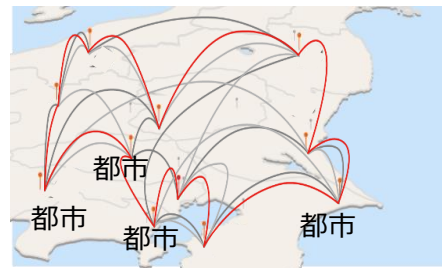
選択枝：都市の数

### 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  
デジタルアニメ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

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)

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

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

	A市 0	B市 1	C市 2	D市 3	E市 4
0	0	1	0	0	0
1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	1	0
3	0	0	1	0	0
4	0	0	0	0	1

①は、  
1番目にB市を訪問  
2番目にA市を訪問  
を意味する。

- ・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

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

$t, i, j$  : 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い

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

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



金融



材料開発



創薬

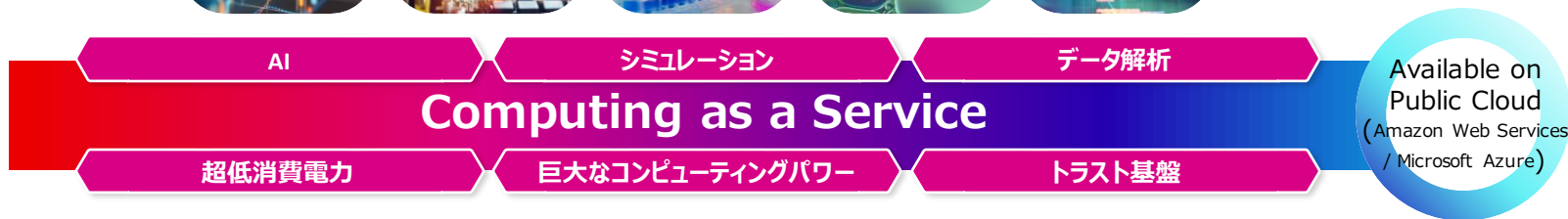


自然科学



計算科学

プラットフォーム



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  
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



コンサルティングサービス

- お客様の要望確認と提案
- コンピューティング活用計画の策定
- 課題に対する解決策の提示

チューニングサービス

- ソフトウェアやライブラリの導入支援
- チューニング指針の提示
- ボトルネックの特定と解決

- ・ 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

## As Is

お客様が課題の実現手段を検討の上で活用

お客様  
エンジニア



リソース活用

**HPCクラウド**

- ・ PRIMEHPC FX1000
- ・ x86、GPU 等

リソース活用

**DAクラウド**

- ・ デジタルアニーラ  
(量子インスパイアード)

リソース活用

**AIクラウド**

## To Be

課題の実現手段を**共に検討し、最適なリソース組合せ**にてご提案  
従来解決が難しかったユースケースの解決ご支援

お客様  
エンジニア



FJ業務  
エンジニア



協議  
課題定義



業務適用  
ご提案

FJ  
ソリューション  
アーキテクト



今後、自動化・  
API提供を  
予定

**HPCクラウド**

- ・ PRIMEHPC FX1000
- ・ x86、GPU 等

×

**DAクラウド**

- ・ デジタルアニーラ  
(量子インスパイアード)

×

**AIクラウド**



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



## 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（量子インスパイアード、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](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](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://prtimes.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](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：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

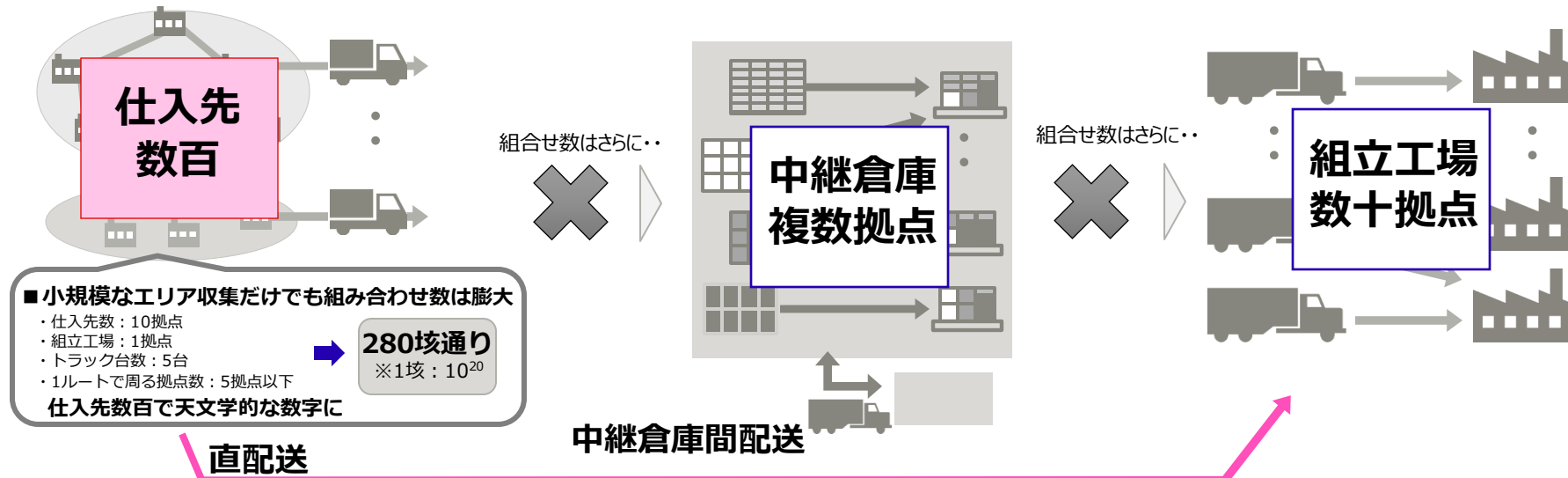


## ●大規模な物流ネットワークのコスト最小化

### 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

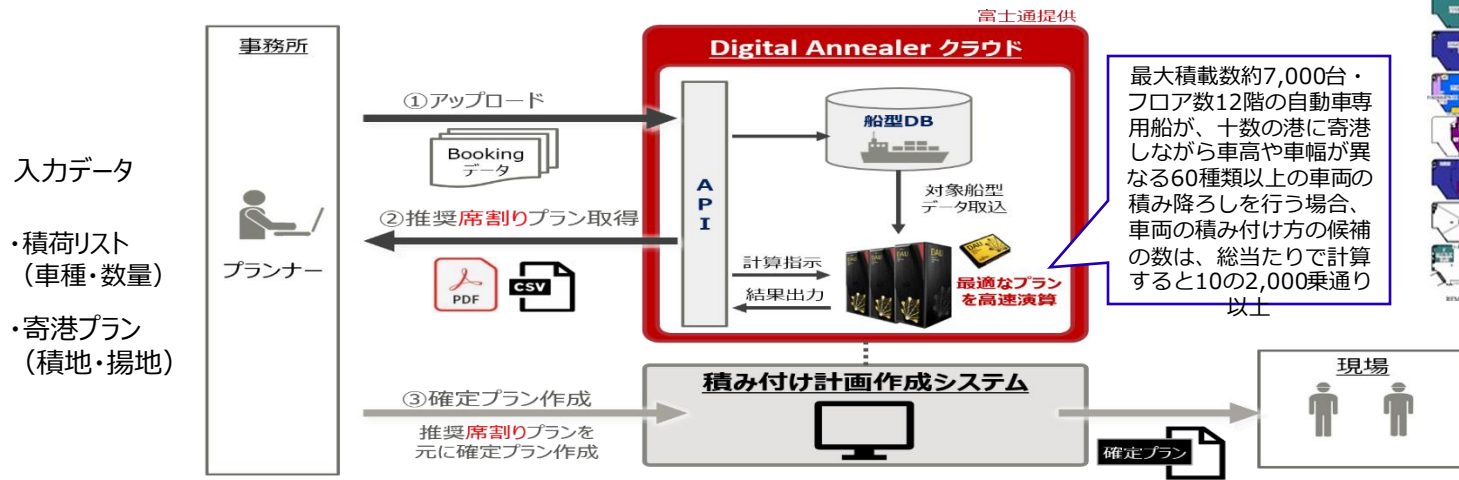
## 自動車専用輸送船への車両の 積み付けプランを最適化

- 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、  
プランの品質バラツキの防止も実現

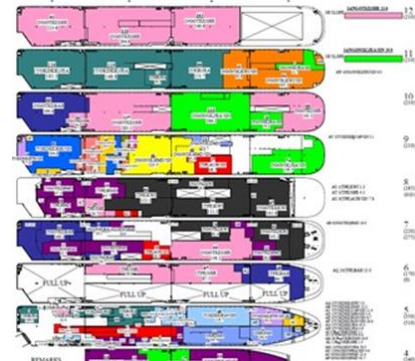


## ● 自動車専用船の積み付け計画作成業務を効率化

- 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



出カプラン（席割りプランの例）



最大積載数約7,000台・フロア数12階の自動車専用船が、十数の港に寄港しながら車高や車幅が異なる60種類以上の車両の積み降ろしを行う場合、車両の積み付け方の候補の数は、総当たりで計算すると10の2,000乗通り以上

**年間4,000時間以上の労働時間の削減を実現**

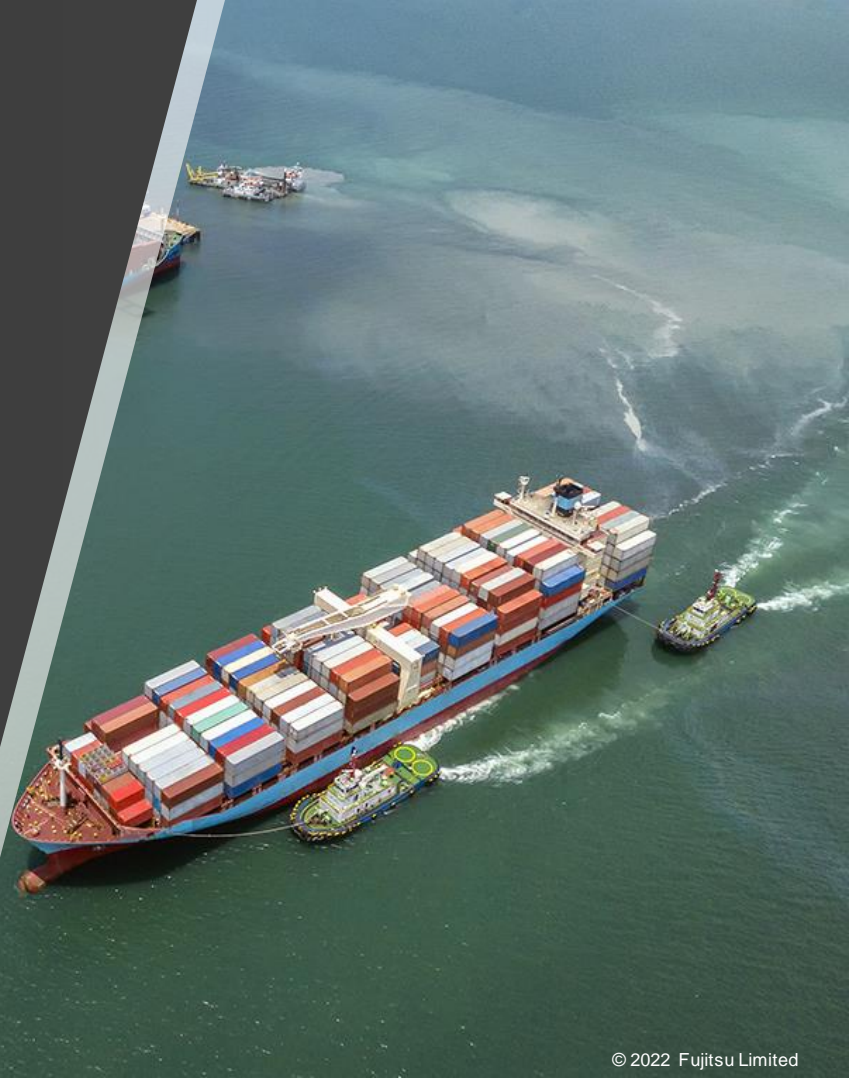
物流事例（海運）

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





## 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・船の運航ルートのを算出



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

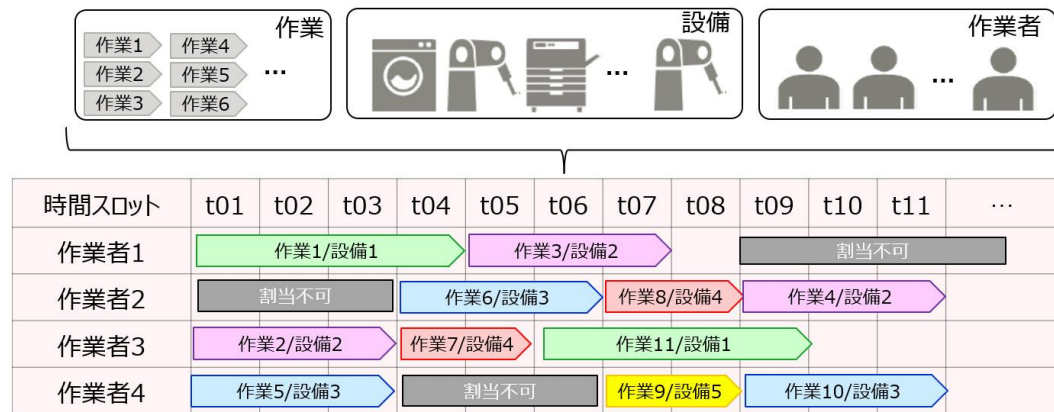
FUJITSU



生産計画  
最適化

# 生産スケジューリングの最適化

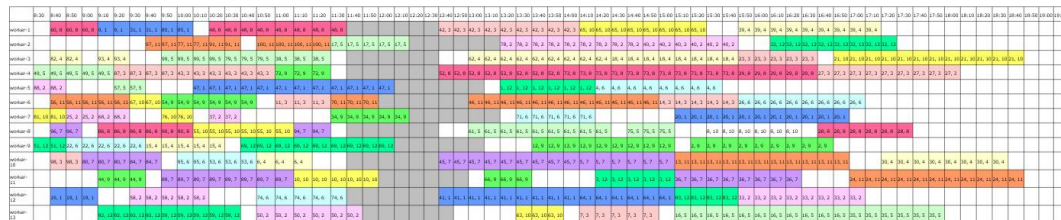
## 100万ビット級の実用問題を求解



### 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

### 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]



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

FUJITSU



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

- 最適化したピッキングルートから**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。

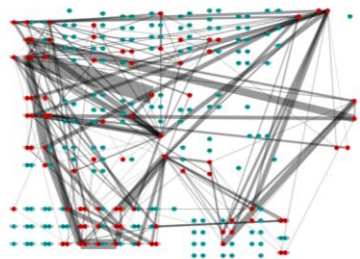


ピッキングルート最適化と組合せて運用していくことで、**ピッキング作業の更なる改善**が可能



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



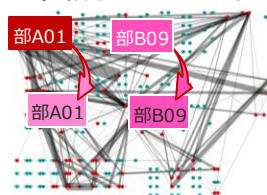
部品需要を考慮せず商品棚を設置しているため、ピッキング作業も効率的でなく、ピッキングルートも最適化されない。

- 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



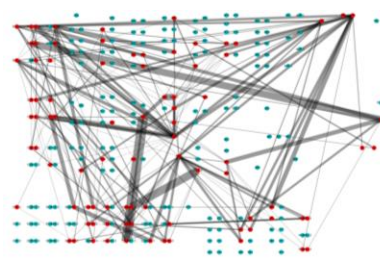
## デジタルアニーラクラウドサービス



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



## メルコインベストメンツ株式会社 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>

# ポートフォリオ最適化 – デジタルアニーラの優位性 FUJITSU

- 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

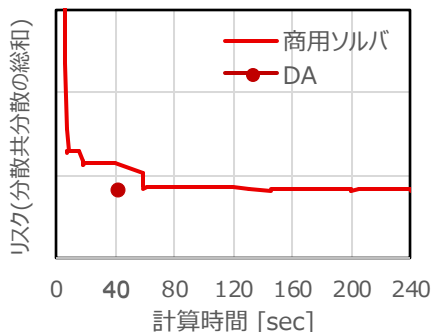
平均分散ポートフォリオ最適化とは…

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

### 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。

2000銘柄のポートフォリオ最適化



## より実用的なモデルのポートフォリオ最適化

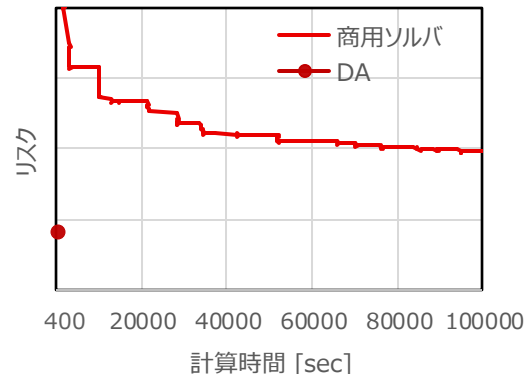
- ・ 新たなポートフォリオ構築のため、単純な平均分散ではないポートフォリオ最適化の需要がある。

### 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





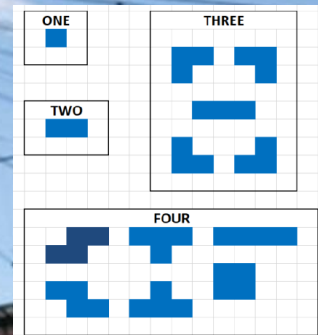
# 観客席割当最適化

ベルリンオリンピックスタジアム（ブンデスリーガ）  
ニュルンブルクリンク（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



観客席割当

最適化

# エネルギー事例

## ウィ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

FUJITSU



ウィンドファーム  
レイアウト  
**最適化**

## ● 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 (2km x2km 400cell)
  - $m$  turbines to be situated (fixed number)
- **Objective: maximize produced power**
  - **Inteferences between turbines**
- Constraints:
  - Proximity (too close is not allowed)
  - Exactly  $m$  turbines

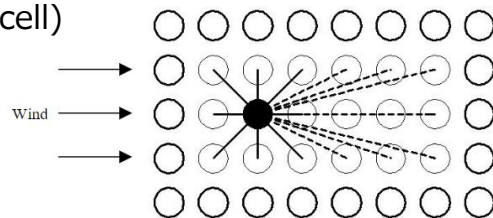
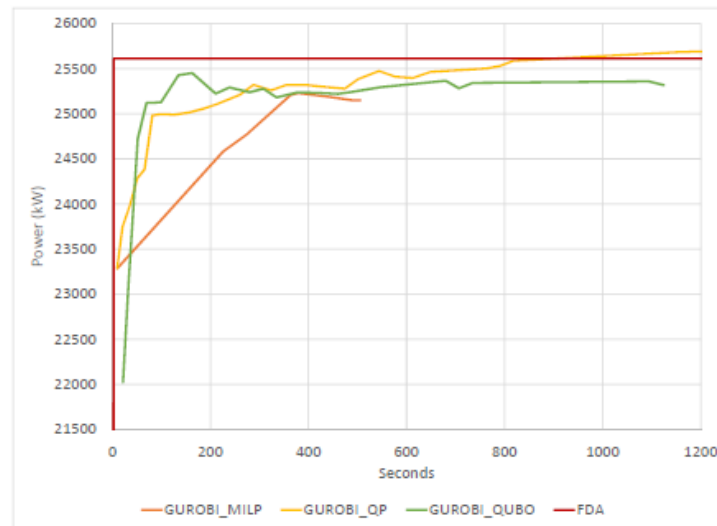


Figure 4.1: Proximity and interference effects.

- 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

デジタルアニーラ(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

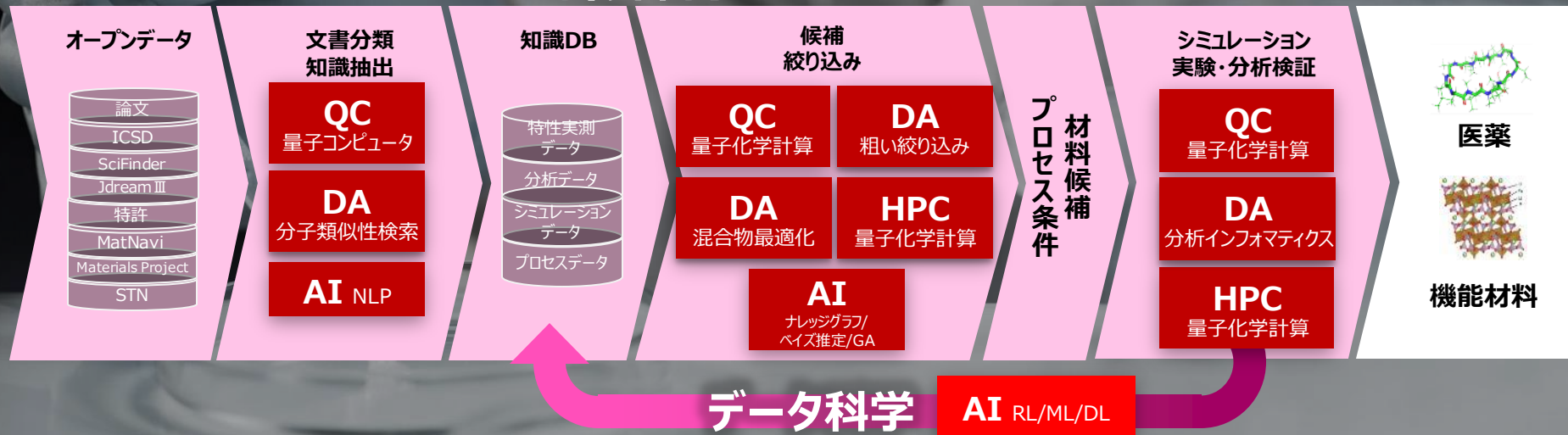
デジタルアニーラのビジネス展開

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



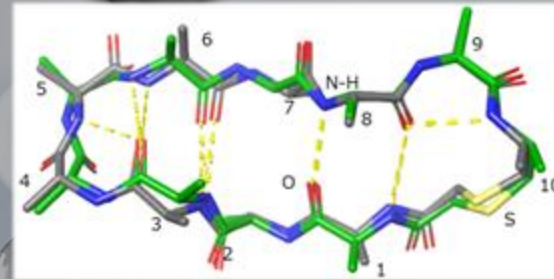
# 材料設計事例

## 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。

FUJITSU

緑色：計算結果  
灰色：実験結果

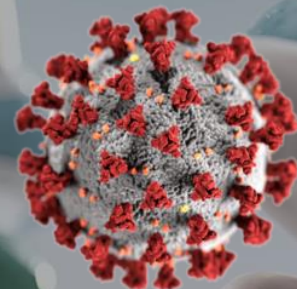


環状ペプチドの実験構造と計算構造の比較

**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



**新型コロナウイルス感染症治療薬を  
含む、新薬の開発を加速**





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……

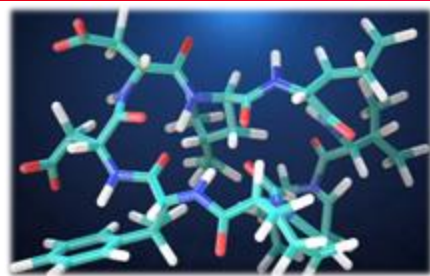
■ 低分子医薬(アミノ酸2～4個)から副作用のリスクが低い中分子医薬(アミノ酸5～50個)へシフト

■ 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

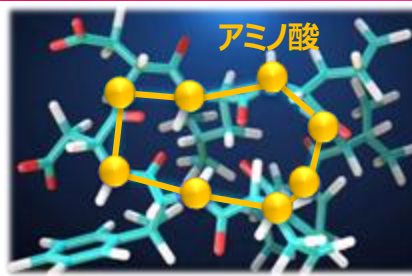
低分子：天然のアミノ酸3個の配列種類は：4200

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

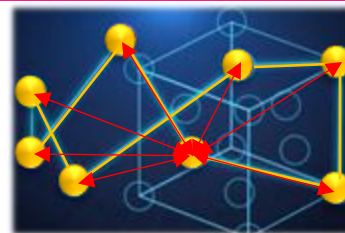
# デジタルアニーラによる安定構造探索



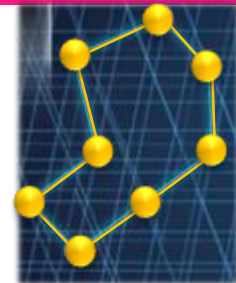
中分子環状ペプチド



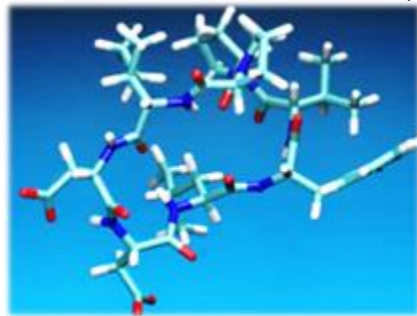
アミノ酸で括って粗視化  
アミノ酸間の相互作用をAIでモデル化



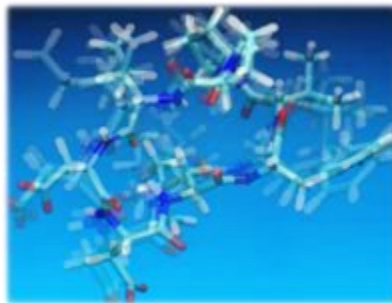
アミノ酸を格子点に配置し  
アミノ酸間の相互作用を考慮  
デジタルアニーラで構造探索



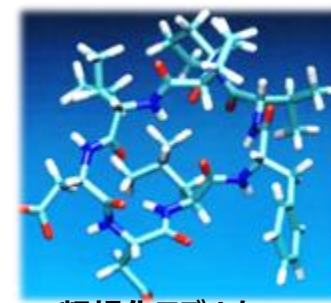
デジタルアニーラで求めた  
安定構造



求まった安定構造  
(実験構造と1 Å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

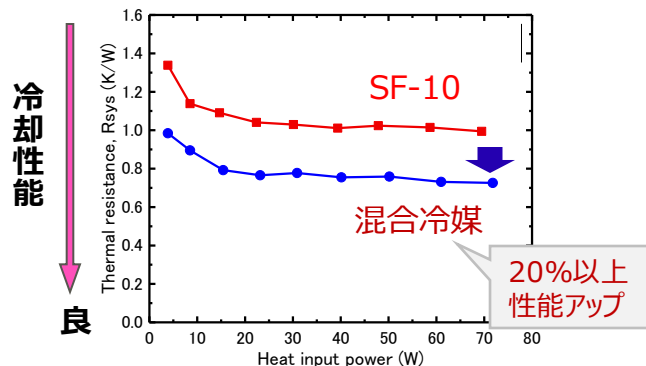
探索条件

混合候補：約40種類  
→ 3成分混合

要求特性

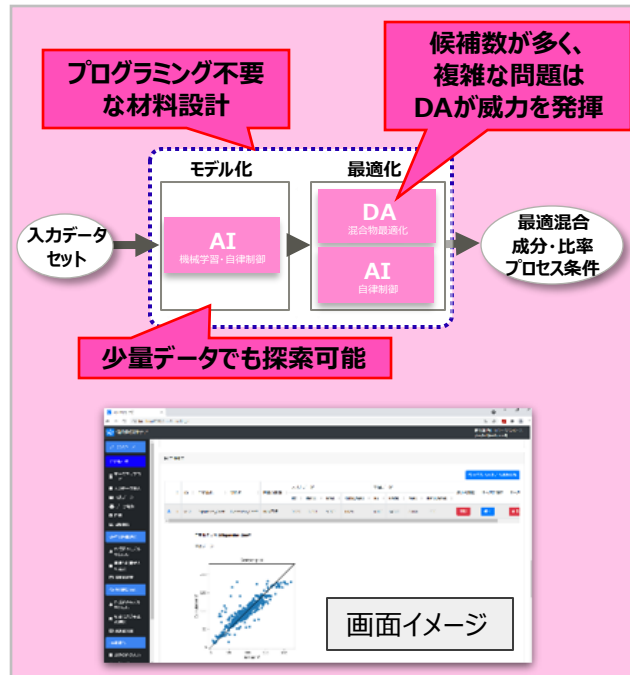
- ・ 熱伝導率：高
- ・ 引火点：高
- ・ 比熱：大
- ・ 粘度：低

探索結果の実証実験



## 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



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




# 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、高性能・低コスト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

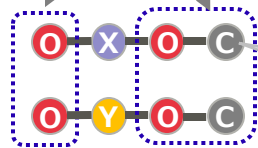
関連特許：特願2020-9953



材料候補  
スクリーニング  
高精度化

## 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

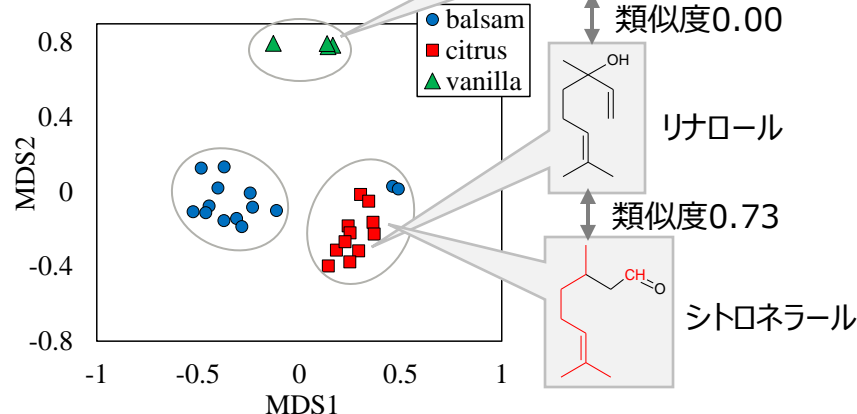
+

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
<b>DA利用手法</b>	<b>0.76</b>	<b>0.69</b>

調整ランド指数(ARI),  
シルエットスコア(SS)

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

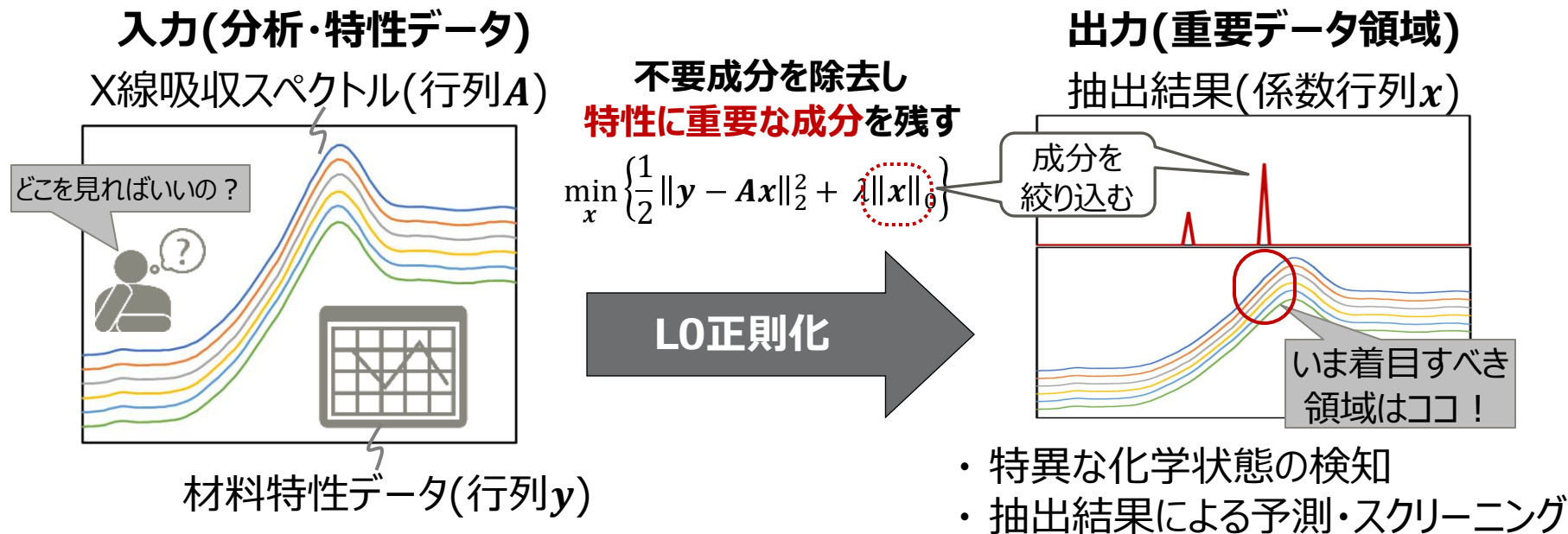
[https://sunbeam.spring8.or.jp/top/seika/annual\\_report/vol11/vol11\\_2021.pdf](https://sunbeam.spring8.or.jp/top/seika/annual_report/vol11/vol11_2021.pdf) (p.31)



影響因子特定  
高精度化

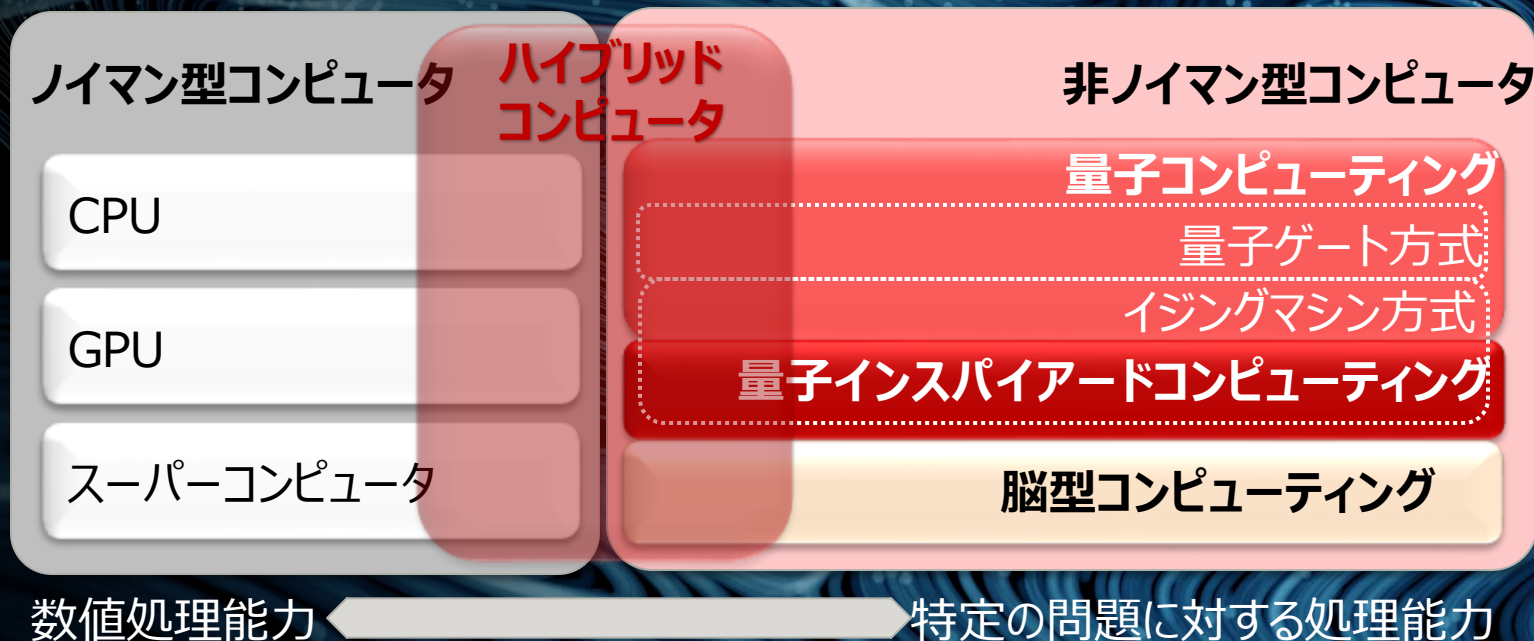


## ■ ニッケル水素電池用正極材料の開発と特性メカニズムの解明



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？



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**

