

K y u r i z u k a i

新版

窮理図解

2024 September
no.

40

慶應義塾大学理工学部広報誌

<https://www.st.keio.ac.jp/education/kyurizukai/>

English versions are also available:

<https://www.st.keio.ac.jp/en/kyurizukai/>

慶應理工の 量子アニーリング

物理学と情報工学のフロンティアに挑む

物理情報工学科
た な か し ゅ う

田中 宗

(准教授)



物理と情報の間の 新領域を切り拓く面白さ

量子という物理現象の本質を申し分なく
コンピューティングに生かしていく

“モノを扱う物理の言葉で、コトを扱う情報を理解できる”、これをあるときに知った学部時代の感動が、田中さんの研究の原点だ。今や物理と情報の境界は科学の最先端にある。田中さんは、量子ゆらぎを使ったアニーリングによる計算手法で、組合せ最適化問題を解き、配送計画、生産システム、新材料開発など様々な分野の効率を画期的に高めようとしている。

世界は組合せ最適化問題で できている？

朝起きて、今日はどの服を着るのか、朝食は何を食べるのか、学校や仕事場までどういう道筋でいくのかなど、私たちは様々な選択肢から、格好よさ、コストパフォーマンス、安全など、いろいろな評価基準をもとに次々と選択している。「このように、多数の選択肢から評価基準に基づいて最もよい選択肢を選ぶコトを、『組合せ最適化問題』といいます」と田中さんは説明を始める。

仕事や産業の場にも、荷を配る、機械や機器を動かすなど、各種の工程におけ

る効率的な順番といった組合せ最適化問題が無数にある。この問題の難点の1つは、荷を届ける場所が多くなると、組合せの選択肢の数が爆発的に増えてしまうことだ。「そこで、工夫された問題の解き方(アルゴリズム)が必要になります。その中で最近注目を集めているのが、組合せ最適化問題を高速に解くことが期待されている量子アニーリングの出番になることです」(図1)。

物理現象を計算手法として使う

量子アニーリングは、最適化問題に対する効率の良い計算方法として知られている。現在注目を集めている量子コンピューティングの一種であり、物理学と情報工学の境界領域に位置づけられている。

「最適化するということは、何かを『最大化』あるいは『最小化』することです。どちらも数学的には取り扱い方は同じです。ここでは、最小化する場合を考えてみましょう。一般に物理学では、エネルギーが低い状態を安定状態とみなします。量子アニー



図1 荷の配送計画の最適化

量子アニーリングを用いることで、「どのような順番で荷を配送すれば効率が良いか」といった解を高速に探索することが期待されている。

リングと呼ばれる計算手法は、この考え方を組合せ最適化問題に適用するように作られています。つまり、エネルギーが低い安定状態を探索することで、組合せ最適化問題の最適解を探索する、という考え方です。

アニーリングを日本語訳すると“焼きなまし”のことであり、材料工学で使われる用語である。合金を生成する際、合金の成分である金属原子を熱によってバラバラにし、温度をゆっくり下げていく。この工程によって安定した原子配列が生成される。このような現象から着想を得た計算方法がシミュレーテッドアニーリングと呼ばれる方法である。シミュレーテッドアニーリングでは熱を用いるが、量子アニーリングでは熱の代わりに量子ゆらぎを用いる。量子ゆらぎがある場合、量子ビットに書き込まれた値は0と1の量子重ね合わせになる。その状態から量子ゆらぎを弱めていくと、0あるいは1に収束して安定な状態になり、その時に示される値が組合せ最適化問題の解となる。

「量子アニーリングは、私が2002年に卒業研究のために入った東京工業大学(2024年10月より東京科学大学)西

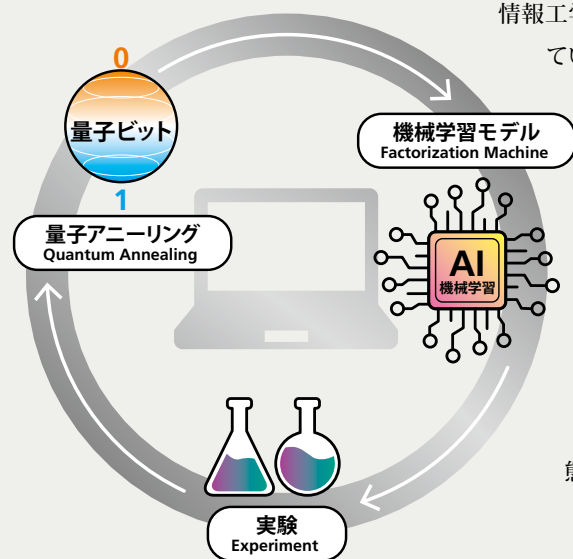
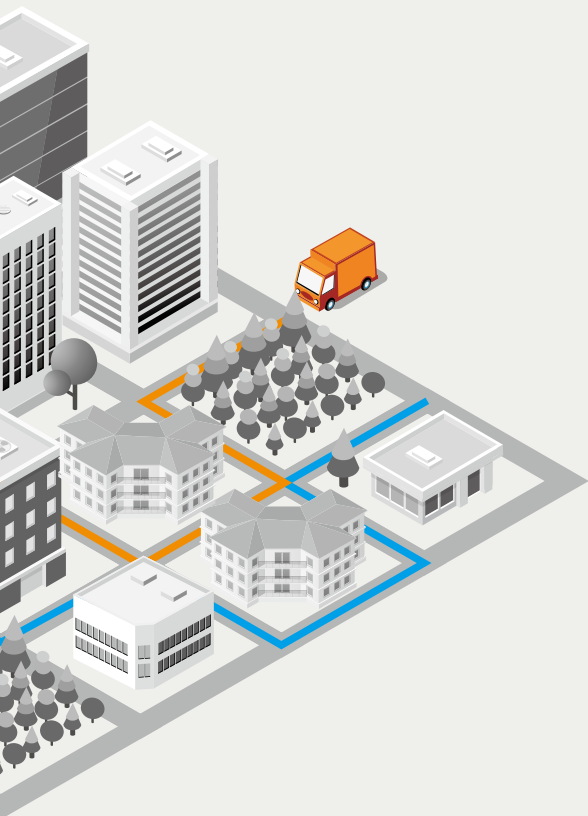


図2 量子アニーリングとAIとを組み合わせた新たな計算手法であるFMQA

いくつかの実験結果をもとに機械学習を用いてイジングモデルあるいはQUBO形式の関数にし、量子アニーリングマシンで計算する。すると、その時点の良い解が出てくる。この解は次に実験すべき実験条件を示している。この過程を何度か繰り返して、望む性能を実現する実験条件を得ることが期待される。



森研究室の西森秀穂^{ひでと}先生のグループが1998年の論文で示した計算手法です。まさに西森研究室は物理で情報を扱う研究室でした。

量子アニーリングなど自然現象のメカニズムを計算手法とするものは自然計算(Natural Computing)と呼ばれている。中でも量子アニーリングは、2011年にカナダのD-Waveが世界初の量子アニーリングマシンの商業化に用いた計算手法ということもあり、注目度は高い。

AIと量子アニーリングの融合

量子アニーリングという計算手法を使

うには、問題を「イジングモデル」あるいは「Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO)」と呼ばれる形式の関数にしなければならない。しかし、これらの関数にするのが簡単な問題であれば、難しい問題もある。そもそも関数として表現できない問題もある。

「社会課題に関連する組合せ最適化問題に取り組むときには、まず、問題ごとにすでに決まった型のようなものがあるので、類似の型がないか過去の研究事例を参考にしたり、それをさらに発展させたりして、最適化する関数を構築します。また、まったく新しいタイプの組合せ最適化問題に出合ったとき、どのように関数を構築するかを考える能力が、私たちプロの研究者の大きな強みだと思っています」。田中さんは、その豊かな経験と鋭い勘どころで、広告配信、旅行計画、交通、集積回路設計などの最適化のアプリケーションを、様々な企業と組んで実現してきた。そして、今、田中さんが力を入れているのがAI(機械学習)と量子アニーリングの融合だ。これに目を向けたのは博士課程の時だという。

「情報工学の研究を進めていた友人と『機械学習と量子アニーリングを組合せたら面白いことができるのでは……』と話したのが始まりです。2009年には、これに関して、人工知能系の国際学会で発表しました。学位を取得してからしばらくは、ほとんど量子アニーリングの研究をしていなかったのですが、この論文に興味を持った企業の方からの連絡が、量子アニーリング研究復活の端緒になりました」。

そして、東京大学や物質・材料研究機構の先生方などと研究に関する議論を重ね、「問題をイジングモデルやQUBO形式の関数にする」ところを機械学習で行う「FMQA (Factorization Machine with Quantum Annealing)」の発想に行き着き、その計算方法を構築することに成功した。現在、FMQAを使った各種アプリケーション開発や、FMQAのさらなる発展を目指した研究開発を精力的に行っている(図2)。

「例えば、複数の物質を混ぜることで、電気がよく流れる新規物質を開発したい時、実験科学者なら、まずは複数の物質を様々な割合で混ぜて電流を測定し、この配合比ではこれだけ電気が流れるというデータをいくつか出すでしょう。FMQAでは、このいくつかのデータをもとに機械学習でイジングモデルやQUBO形式の関数を作ります。そして量子アニーリングマシンでこの関数の最適解を探索する。この時に出てくる解は、次に実験で試すべき配合比を表しています」。

いわば、実験結果を見て次の実験に繋げる実験科学者の「勘どころ」を量子アニーリングが代替しているわけだ。これに従って行った実験結果をもとに再びFMQAを実行する。この過程を繰り返すと関数の精度がしだいに高くなっていき、最終的に望む性能をもつ材料の配合比を探索することが可能になると期待される。

「この方法を使った様々な材料探索やその他のアプリケーション開発に、企業や大学と一緒に取り組んでいます」(図3)。

FMQAの論文は2020年に発表されたが、材料分野はもちろんのこと、いろいろな分野の人が興味をもっているようだ。

「『まだ発表できませんが、FMQAを使った研究を手がけています』と声をかけてくださる企業の方が結構いらっしゃいます」。FMQAは、実験やシミュレーションといった試行錯誤を繰り返し、これを繋げながら実態を解明していくもの、いわばブラックボックスに対する最適化のツールだという。「FMQAを通じて、様々なブラックボックスの最適化の事例が出てくることを、私自身非常に楽しみにしています」。

(取材・構成 由利伸子)

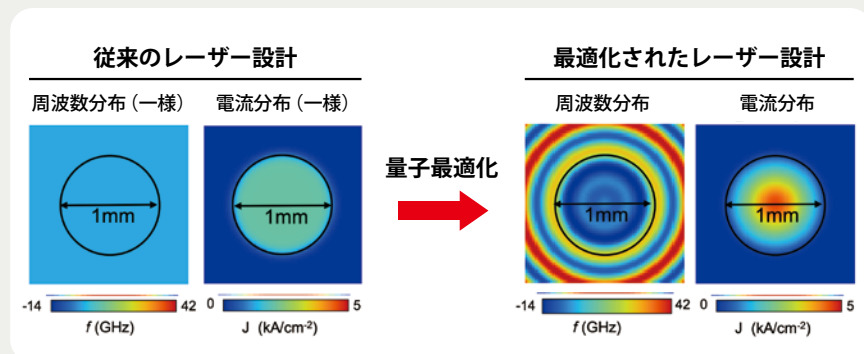


図3 量子アニーリングによるフォトニック結晶レーザーの構造最適化の結果

従来設計の場合(左図)と量子アニーリングを利用した場合(右図)とでは、周波数分布と注入電流分布がまったく異なっており、非自明な空間分布をもつデバイス構造が得られていることが分かる。



うまくいかないと感じた時も 「ここでできることは何か?」と考え 多くの貴重な経験を積んできた

「パーマネントの研究職に就くまでに、あちこち渡り歩いてきました」と話す田中さん。そんな不安定な境遇さえも味方にして、ついには「量子アニーリング」という新しい研究分野で独自の世界を築くことになった。研究室の主宰者になった現在、「人生はそんなに甘くない」と厳しい一面を見せながらも、異なった背景をもつ学生たちがそれぞれに力を発揮して活躍してくれることを願っている。

——田中さんは、江戸っ子だそうですね。

東京都江戸川区の出身で、高校は都立の両国高校でした。芥川龍之介は大先輩です。細かいことを気にしない性格が、自分でも“江戸っ子なのだな”と思うところですかね。大学は東京工業大学(東工大、2024年10月より東京科学大学)に、大学院は東京大学(東大)に進学しました。経済的に十分な余裕がなかったので、国公立の教育機関を勉強の場を選びました。

大学に入った頃のことでよく覚えているのは、都心の私立高校を出た友人たちがみな物知りで早熟だったことです。自分がすごく遅れていると感じて焦りました。今にして思うと、みんな必死に背伸びをしていたのかな?と思います。ただ、焦りは若い頃に多くの人が多少なりとも抱く感情でしょう。結局は焦っても仕方がなくて、まずは何より大学生としての本分をしっかり果たすことが、その後の人生では大切なのだとわかってきました。

——大学、大学院では何を学ばれたのでしょうか?

一貫して物理を学びました。中学生か高校生かの頃に、超伝導体の上に磁石が浮く写真や映像を見て物理に強くひかれるようになりました。「物理を学んだ先にはこういう現象も理解できるんだ!」と思うようになり、以来、物理学に進もうと考えていました。

大学4年生(2002年)で最初に所属したのは、東工大の西森

秀稔^{ひでとし}先生の研究室でした。物理学の研究室で、西森先生は当時すでに量子アニーリングを研究していました。ところが、当時の私は量子アニーリングについては興味がなかったので、結局、物理学を志す多くの人が憧れる「紙とペンだけで問題に挑む」というテーマを選んで研究しました。大学4年生ですから、既存の論文に掲載されている物理学の関係式をなぞった程度でした。それでも非常に高度な数学が求められました。

現在、学生たちが物理学の計算で音を上げているのを見ると、「解けるだけありがたいんだよ。研究とは解けるかどうかかわからない問題に挑戦しなくてはならないんだから」と思わず言ってしまうのは、当時のことを思い出すからです。

——研究紹介でお話いただいた「量子アニーリング」を研究するようになったのは?

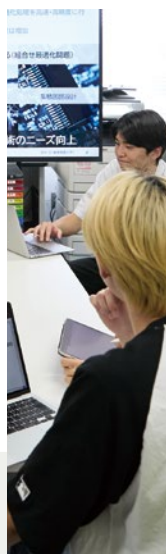
博士課程の頃のことです。東大の宮下精二先生の下で研究をしていましたが、ある時、量子アニーリングに関する論文を見つけて非常に興味深いと思いました。そのことを宮下先生に話したら、「研究してみるといいよ」と背中を押してくださったのです。物理は物の理(ことわり)と書くように、普通は「実体のあるモノ」を扱いますが、「情報のようなコトを量子アニーリングという物理現象で取り扱う」ことができるのですから、それはもう驚きでした。

——その後、量子アニーリングの研究を続けてこられたのでしょうか?

実は、そうではありません。私は長い間パーマネントの職に就けず、いろいろな大学を渡り歩きました。それぞれの大学で出会った研究テーマに取り組んできたため、量子アニーリングだけに長年取り組んできたというわけではないのです。

学生時代を過ごした東工大と東大の研究室を入れると、慶應義塾大学理工学部物理情報工学科は私にとって10カ所目の学科です。特に、2010年4月からの近畿大学のポストが決まったのは、着任の約40日前の2月15日ごろでした。ここまで職が決まらないことで、29歳の私は心が折れそうでした。

博士号を取得してからサイドワークとして取り組んできた





量子アニーリングの研究に集中するようになったのは、京都大学にいた2014年頃からです。2009年に発表していた機械学習と量子アニーリングを組み合わせた研究に関する論文に、ある企業の方が興味を持ってくださったことがきっかけとなり、量子アニーリングの研究に本腰を入れるようになりました。

——そういう時代だったとは言え、卒業後はずいぶんど苦労されたんですね。

確かにたいへんではありましたが、就職氷河期時代に就職活動で苦労していた友人たちを見ているし、それほどくじけることなくその時々境遇を自分なりに生かしてこれたと思っていますよ。卒業後のキャリアでは、主にスーパーコンピュータなどを使って、新規物質の性質を解明するためにシミュレーションを行っていました。ところがある時、「実際に物質をつくり出す実験」を知らないといくれないのではないかなと思うようになりました。そして東大の理学部化学科の大越研究室にいた頃には、化学実験の研修を受けさせてもらって、測定や合成が実際にどのように行われているかを学びました。

このように積極的に他分野のことを吸収してきたこと、そして何よりもすぐ隣に他分野の研究者がいて日常的に話ができたことで、自分の中に多様性が育まれました。異分野に飛び込んで研究をするのは、カルチャーの違いを乗り越えるのが大変だったりましたが、そこで、洞察力やコミュニケーション力を培ったと思っています。そうした経験が、国家プロジェクトの代表やベンチャー企業QuanmaticのCTO (Chief Technical Officer, 最高技術責任者)などを務める際にも生きていると感じます。

——いろいろな経験をさせてきた田中さんの目から見て、慶應義塾大学はどのような場所でしょうか。

学生の境遇はそれぞれ違いますが、慶應義塾大学という場所は非常にいい環境が整っていると思います。日吉キャンパスは理系に限らず様々な分野の学生が通っています。そこで若いあ

る時期を過ごすことで、広い視野が培われます。そして学年が上がって理系の矢上キャンパスに移ってからは、自分の専門に集中する時期になります。

慶應義塾大学には様々な個性をもった教員や仲間がいて、事務部門の人たちもよくサポートしてくれます。何らかの事情で、国外留学へ行くことができなかったり、何か特別なことをすることができなかったりしても、慶應義塾大学の学生はたくさんのことを学んだり経験したりできる良い環境に身を置いているのです。まずは、その中で吸収できることを存分に身につけて、将来、大いに活躍してほしいと願っています。そして私も、その一端でもお手伝いできたらと思うのです。

◎ちょっと一言◎

学生さんから：

● 先生から「納得がいくまで何度でも見学に来てみたら？」と言われて通ううちに、先生や先輩方との距離感がよくて「ここしかない！」と思うようになりました。大学院に進学し、この世界でもっと自分を成長させたいと思っています(学部4年生)。

● 田中研の1期生です。勉強はあまり得意でない学生でしたが、勉強と研究の違いについて教えてくださり、親身にご指導いただきました。就職も考えましたが、博士課程に進み、日々、研究しています(博士1年生)。

● 民間企業で働きながら、2023年に田中研で博士号を取得しました。初めての物理分野の研究ですが、先生は、私が無理だと考える理由をすべて解消して、新しい道に進ませてくださいました。学生思いの方で、どんなに忙しくても週に1回は研究室の学生全員と個別に話をされています(特任助教)。

(取材・構成 池田亜希子)

さらに詳しい内容は
<https://www.st.keio.ac.jp/education/kyurizukai/>

「問題が解ける」ことのありがたさは 先の見えない研究を始めるとわかる

田中 宗

Shu Tanaka

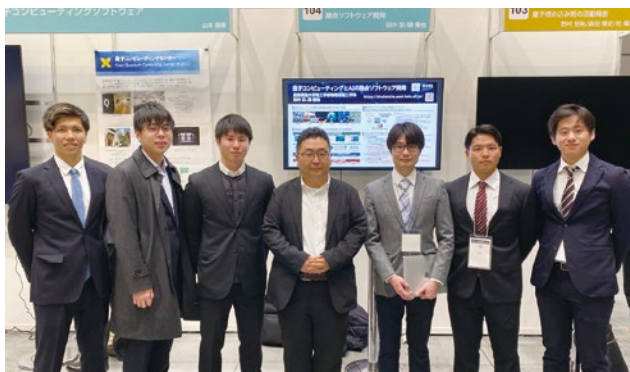
専門は量子アニーリングをはじめとしたイジングマシン、統計力学、計算物理学、物性理論。2003年東京工業大学理学部物理学科卒業。2008年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。博士(理学)。東京大学物性研究所、近畿大学量子コンピュータ研究センター、東京大学理学部化学科、京都大学基礎物理学研究所、早稲田大学高等研究所、早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構を経て、2020年より現職。2022年より慶應義塾大学ヒト生物学・微生物・量子計算研究センター(Bio2Q)副拠点長、ならびに創業したスタートアップ企業QuanmaticのCTOを兼務。2024年よりサステナブル量子AI研究センターセンター長を兼務。





研究室立ち上げ時に導入した椅子と机。
ここから私の研究室が始まりました。

KEIO TECHNO MALL 2023 (2023年12月15日) にて。



田中 宗の ON と OFF

連続する ON と OFF



2024年3月の卒業式。
2020年に研究室を開室
して、初めて就職する
学生を送り出しました。

ミュンヘン工科大学から交換
留学で研究室に来てくれた
Victor Fischer さんの送別会。



イギリス・グラスゴーで開催された国際会議に、修士課程以上の
研究室メンバー全員で参加しました。国際会議最終日の夕食。



オーストリア・インスブルックにて開催された国
際会議。国際会議のために訪れる様々な国の建造
物を見るのは、ちょっとした楽しみです。



量子スタートアップQuanmatic創業
メンバー全員で。大学での仕事とは異
なる側面があり、日々学びがあります。



研究室の様子。明る
く意欲に満ち溢れた
学生のみなさんや、
素晴らしい研究員のみ
なさんに囲まれて
います。

私の My favorite books 本棚



●『キングダム』

(原 泰久 著 集英社)

中国の春秋戦国時代末期を舞台とした漫画で、大ベストセラー作品なので多くの方々に知られた作品だと思います。漫画ですので、登場人物の個性がかなり強調されているものの、こんなキャラの人が周りにいるよね、このキャラのこの部分は共感できるな、と思いつつ読んでいます。多くの登場人物が出てきて人間ドラマを繰り広げる作品が好きなので、何度も読んで楽しんでいる愛読作品の一つです。ビジネスパーソンにも人気である理由が納得できます。(iPhoneのKindleアプリで見えています。)

●『解像度を上げる—曖昧な思考を明晰にする 「深さ・広さ・構造・時間」の4視点と行動法』

(馬田 隆明 著 英治出版)

ある方から頂いたご縁で著者の馬田さんと面識があり、それがきっかけで手に取った書籍です。思考過程が言語化されており、良い気付きが得られました。私は大学発スタートアップであるQuanmaticに創業当時からChief Technology Officer (CTO) として携わり、大学での仕事とは別の頭の使い方をする必要があります。この書籍に限らず、ビジネスの考え方に関する書籍にも興味を持って読んでいます。こうしたきっかけで読んだ何冊かの書籍が研究(室活動)に生かされており、多様な経験は重要であることを身にしみて感じています。(ちなみにこうした書籍を読む場合は主にiPadのKindleアプリを利用しています。)

●『ノンデザイナーズ・デザインブック』

(Robin Williams 著 吉川 典秀 訳 マイナビ出版)

学部生のときに友人から紹介されて手に取った書籍です。書名が表すように、デザイナーではない人向けにデザインの考え方が豊富な実例とともに紹介されています。デザイナーではない人向けなので、「最低限これを守ると良い」という指針が記されており、たいへん勉強になります。研究活動における口頭講演やポスター講演の準備や教育活動における配布資料の準備でデザインを気にすることがあるので、たまに眺め直して、自身の仕事に役立てています。

●『量子アニーリングの物理』

(田中 宗・田村 亮 共著 訳 Bikas K.Chakrabarti 共著 森北出版)

日本語による専門的な書籍を自身ではじめて執筆しました。もともとは自身で執筆した英語の書籍を翻訳したものです。「量子アニーリング」やその周辺の専門的知識をどのようにまとめていくか、たいへん苦労した経験が今でも思い出されます。非常に専門的な内容であり、研究室の学生指導や物理情報工学科の講義『量子コンピューティング』の準備をする際に役立てています。

●『理科系の作文技術』

(木下是雄 著 中公新書)

言わずと知れた名著です。大学生協の書籍コーナーに平積みになっていたの、学部1年生のときに手に取りました。入学当初の私にとっては実はとても難しかったのですが、研究活動を通じて文章を書く機会が増えた大学院生の頃に再び読み直し、少しは理解できるようになりました。現在、仕事で様々な文章を書く機会が増え、また、研究室の学生の皆さんの文章に対するフィードバックを行うことも増えてきたので、再度読み直しています。文章を書く方法についてコーチングする際にもっとも大切にしている書籍の一冊です。

環境と出会いに感謝

田中 宗

2020年4月に慶應義塾大学理工学部物理情報工学科にて研究室を立ち上げ、早くも5年目となりました。2024年3月には研究室第一期生をはじめて送り出し、研究室の様々なイベントがやっと一巡したと言ってもよいでしょう。また、このタイミングで『新版 窮理図解』で紹介される機会を頂き、これまでの私自身のキャリアパスについて振り返ることができました。そして、「現在の状況でなすべきことをなし、そこでの出会いに感謝する」という考えを持つことの重要性に改めて気づきました。

学生時代から現在の職に就くまで多くの紆余曲折がありました。しかし、持ち前のポジティブ思考で、心が折れずにこま

でこられたと思っています。もちろん、その過程は全くカッコいいものではなく、他者と比較することもたびたびありましたし、多くの人たちに心配や迷惑をおかけしてきました。ただ一つ大切にできたことは、周りの素晴らしい方々に支えていただきながら、その場その場で与えられた環境を活かし、なすべきことに懸命に取り組むことでした。

私が学生時代の頃に比べると現在は情報過多で、輝いているように感じられる他の人たちがまぶしく映りがちです。そのため人によっては、何か特殊な経験を積まなければならない、そのように焦ってしまう場合も多々あるでしょう。何かに突き動かされることは良いことですが、発想を変えて少し落ち着いて考えてみることも良いと思います。「現在の環境をフル活用したら、何か得られるのではないかと」。何らかの理由で、特殊な経験を積むことがで

きない場合もあります。そうした場合にもこの考え方は有効です。現在そこにある環境をフル活用することは一見地味ですが、それが様々なスキルを養うことにつながり、将来の仕事における力強い礎になると考えます。

私自身、現在は研究室を主宰する立場、各種の研究開発プロジェクトを取りまとめる立場、また、創業したスタートアップ企業QuanmaticのCTOといういろいろな立場で様々な仕事に取り組んでいます。これらの仕事をなんとか進めることができているのは、周りの方々に支えていただいていることに加え、これまでに置かれた環境を活かして経験を積んできたからだ実感しています。そして現在、素晴らしい環境に身を置かせていただいていることに感謝しながら、数年後、あるいはその先の未来の大きな仕事に繋がる礎を築いていきたいと思っています。

理 工 学 Information

創立100年に向けた行動目標として"KeiDGs"を推進しています



アーティスト：Ryoko Utsunomiya
アートディレクション：TokyoDex

慶應義塾大学理工学部・理工学研究科は、2039年の創立100年に向けた行動目標として、Keio Diversity, Equity, and Inclusion Goals (KeiDGs) を推進しています。KeiDGsは、近年その重要性が増しているDE&I (ダイバーシティ・エクイティ&インクルージョン) の概念を、塾祖・福澤諭吉の精神と照らし合わせつつ、理工学部・理工学研究科の教育と研究に落とし込んだ行動目標です。

この行動目標をもとに、理工学部・理工学研究科に設置されたワーキンググループを中心として、様々な施策やイベントの実施を活発に検討しています。理工学部・理工学研究科は、来る創立100年にとどまらず、さらにその先の時代においても輝き続けるために、KeiDGsを強力に推進してまいります。

KeiDGsに関する具体的な活動内容等については、下記のホームページをご確認ください。



<https://dei.st.keio.ac.jp/>

新版 窮理図解



No.40 2024 September

編集 新版窮理図解編集委員会
写真 邑口京一郎
デザイン 八十島博明、石川幸彦 (GRID)
編集協力 サイテック・コミュニケーションズ
発行者 村上俊之
発行 慶應義塾大学理工学部
〒223-8522 横浜市港北区日吉 3-14-1
問い合わせ先 (新版窮理図解全般)
kyurizukai@info.keio.ac.jp
問い合わせ先 (産学連携)
kll-liaison@adst.keio.ac.jp

web 版
<https://www.st.keio.ac.jp/education/kyurizukai/>

編集後記

この『新版 窮理図解』40号では、「量子アニーリング」「量子コンピューティング」を研究している田中宗准教授を特集しました。組合せ最適化の実用範囲や、その社会的影響に思いを馳せると、明るい未来に自然と夢が膨らむのではないのでしょうか。

インタビューや、学生からの「ちょっと一言」を通して、田中先生が研究室の一人ひとりに対して真摯に向き合われている様子が伝わるといいます。学生もそれに応えてか、研究室は先生を囲むように温かな雰囲気満ちていました。

(杉原 史)