

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号

特許第7508154号  
(P7508154)

(45)発行日 令和6年7月1日(2024. 7. 1)

(24)登録日 令和6年6月21日(2024. 6. 21)

(51)Int. Cl. F I  
G 0 6 N 99/00 (2019. 01) G 0 6 N 99/00 1 8 0

請求項の数 11 (全 15 頁)

(21)出願番号 特願2023-564044(P2023-564044)  
(86)(22)出願日 令和5年1月12日(2023. 1. 12)  
(86)国際出願番号 PCT/JP2023/000530  
(87)国際公開番号 W02023/162493  
(87)国際公開日 令和5年8月31日(2023. 8. 31)  
審査請求日 令和5年10月18日(2023. 10. 18)  
(31)優先権主張番号 特願2022-30366(P2022-30366)  
(32)優先日 令和4年2月28日(2022. 2. 28)  
(33)優先権主張国・地域又は機関  
日本国(JP)

早期審査対象出願

(73)特許権者 522079366  
乾 幸地  
東京都文京区本郷7-3-1 国立大学法  
人東京大学大学院工学系研究科内  
(74)代理人 110000338  
弁理士法人 HARAKENZO WOR  
LD PATENT & TRADEMA  
RK  
(72)発明者 乾 幸地  
東京都文京区本郷7-3-1 国立大学法  
人東京大学大学院工学系研究科内

審査官 福西 章人

最終頁に続く

(54)【発明の名称】 情報処理装置、情報処理方法、およびプログラム

(57)【特許請求の範囲】

【請求項 1】

操作可能なパラメータを用いて規定された演算子であるハミルトニアンから、当該ハミルトニアンが規定する系の特性量を算出する特性量算出部と、

前記パラメータを引数として含む目的関数であって、前記特性量に関する目的関数の値がより大きくなるように、又は当該目的関数の値がより小さくなるように、前記パラメータを更新する更新部と

を備え、

前記更新部は、前記特性量の微分であって、前記パラメータに関する自動微分を、半導体プロセッサ、及び、半導体メモリによって、実行する微分実行部を有する、情報処理装置。

【請求項 2】

操作可能なパラメータを用いて規定されたハミルトニアンから、当該ハミルトニアンが規定する系の特性量を算出する特性量算出部と、

前記パラメータを引数として含む目的関数であって、前記特性量に関する目的関数の値がより大きくなるように、又は当該目的関数の値がより小さくなるように、前記パラメータを更新する更新部と

を備え、

前記特性量は、物理量に対する特性の依存性を表すスペクトル特性量であり、

前記目的関数は、前記スペクトル特性量と前記スペクトル特性量の目標である目標スペ

クトル特性量との差を前記物理量で積算した関数である、情報処理装置。

【請求項 3】

前記更新の前後のパラメータを比較して、前記パラメータの更新の終了を判定する判定部

を備えている請求項 1 または 2 に記載の情報処理装置。

【請求項 4】

前記特性量算出部は、

前記ハミルトニアンに基づいて、前記系の電子状態を算出する電子状態算出部、を備えている請求項 1 から 3 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 5】

前記パラメータは、前記系を構成する原子の種類、組み合わせ、配置、原子間距離、電子の数、有効結合定数、有効的な重なり積分、有効相互作用、前記系の温度、前記系に印加される磁場、電場、電磁波、音波、又は圧力に対応する、請求項 1 から 4 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 6】

前記特性量は、超伝導転移温度、超伝導ギャップ、熱電効率、太陽光発電効率、又は外場に対する線形または非線形の応答である、請求項 1 から 5 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 7】

前記目的関数は、前記特性量に対して、比例する、請求項 1 から 6 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 8】

前記目的関数は、前記特性量と前記特性量の目標値との差の関数である、請求項 1 から 6 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 9】

前記パラメータの値、前記特性量の値、及び前記目的関数の値の少なくとも何れかを表示する表示部を備える、請求項 1 から 8 の何れか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 10】

操作可能なパラメータを用いて規定された演算子であるハミルトニアンから、当該ハミルトニアンが規定する系の特性量を算出する特性量算出ステップと、

前記特性量算出ステップにて算出した特性量が所望の値に近づくように前記パラメータを更新する更新ステップとを備え、

前記更新ステップは、前記特性量の微分であって、前記パラメータに関する自動微分を、半導体プロセッサ、及び、半導体メモリによって、実行する微分実行ステップを有する、情報処理方法。

【請求項 11】

請求項 1 または 2 に記載の情報処理装置としてコンピュータを機能させるためのプログラムであって、上記特性量算出部、及び上記更新部としてコンピュータを機能させるためのプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、系を最適化するための情報処理装置、情報処理方法、およびプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

物質系を最適化するための技術が知られている。例えば、特許文献 1 は、量子力学的計算に基づいて物質を設計するための技術を開示する。

【先行技術文献】

10

20

30

40

50

**【特許文献】****【0003】****【特許文献1】**日本国特開2016-69302号公報**【発明の概要】****【発明が解決しようとする課題】****【0004】**

しかしながら、系を最適化して、所望の特性を得ることは容易ではない。一般に、物質系を最適化するには、物質系の要素を特定して、量子力学的計算に基づいて、その特性を求めることを繰り返す必要がある。

**【0005】**

本発明の一態様は、系を最適化して所望の特性量を発現する物質やモデルを効率的に探索することと、人が直感的にたどり着けないような物質やモデルの発見をアルゴリズムによって実行することを図った情報処理装置、情報処理方法、およびプログラムを提供することを目的とする。

**【課題を解決するための手段】****【0006】**

上記の課題を解決するために、本発明の一態様に係る情報処理装置は、操作可能なパラメータを用いて規定されたハミルトニアンから、当該ハミルトニアンが規定する系の特性量を算出する特性量算出部と、前記パラメータを引数として含む目的関数であって、前記特性量に関する目的関数の値がより大きくなるように、又は当該目的関数の値がより小さくなるように、前記パラメータを更新する更新部とを備える。

**【発明の効果】****【0007】**

本発明の一態様によれば、系を最適化して所望の特性量を発現する物質やモデルを効率的に探索することと、人が直感的にたどり着けないような物質やモデルの発見をアルゴリズムによって実行することを図った情報処理装置、情報処理方法、およびプログラムを提供できる。

**【図面の簡単な説明】****【0008】****【図1】**本発明の実施形態に係る情報処理装置の構成を示すブロック図である。**【図2】**系の一例を示す図である。**【図3】**本発明の実施形態に係る情報処理装置が実行する最適化処理の流れを示すフロー図である。**【図4】**パラメータと特性量の関係を示す図である。**【図5】**本発明の変形例に係る情報処理装置が実行する最適化処理の流れを示すフロー図である。**【図6】**本発明の実施形態に係る情報処理装置のハードウェア構成例を示すブロック図である。**【発明を実施するための形態】****【0009】****〔実施形態〕**

以下、本発明の一実施形態について、詳細に説明する。本実施形態に係る情報処理装置は、所望の特性量を得られるように系の最適化を図る。

**【0010】****（情報処理装置）**

図1を参照して情報処理装置の構成について具体的に説明する。図1は、本実施形態に係る情報処理装置1の構成を示すブロック図である。図1に示すように、情報処理装置1は、制御部10、記憶部20、及び入出力部30を備えている。

**【0011】****（記憶部）**

10

20

30

40

50

まず、図1を参照して記憶部20に格納された各種データについて説明を行う。図1に示すように、記憶部20には、パラメータ、ハミルトニアン $H$ 、特性量 $P$ が格納されている。

【0012】

パラメータは、所定の系 $S$ において操作可能なパラメータである。系 $S$ は、種々の系、例えば、物質系、光学系等、任意の物理系又は化学系を含む。系 $S$ は、基本的には、原子(分子を含む)、またはその組み合わせによって構成される。

【0013】

図2は、系 $S$ の一例を示す図である。ここでは、系 $S1$ および $S2$ を示す。系 $S1$ は、サイトA、B、Cを組み合わせた $ABX_3$ の単位格子を表す。サイトA、B、Cに配置される原子(分子)は互いに異なる。サイトAには、例えば、 $CH_3NH_3^+$ 、 $Cs^+$ 、または $HC(NH_2)_2^+$ が、サイトBには、例えば、 $Pb^{2+}$ 、または $Sn^{2+}$ が、サイトXには、 $I^-$ 、 $Br^-$ 、または $Cl^-$ が、配置される。このように、格子によって、原子(ここでは、イオン)の種類、配置を表すことができる。系 $S2$ は、原子 $Mg$ 、およびBの立体的な配置を表す。

10

【0014】

系 $S$ は、パラメータを用いて規定される。パラメータは、系 $S$ の特性に影響を与え、かつ数値で規定される可変要素である。パラメータの一例として、系 $S$ の温度、系 $S$ に印加される磁場、電場、または圧力を挙げることができる。また、原子の種類、組み合わせ、配置、原子間距離、価数(電子の数)も、数値で表されればパラメータとして扱うことができる。すなわち、パラメータは、例えば、系 $S$ を構成する原子の種類、組み合わせ、配置、原子間距離、電子の数、系 $S$ の温度、系 $S$ に印加される磁場、電場、及び圧力の少なくとも何れかに対応する。

20

【0015】

ハミルトニアン $H$ は、系 $S$ のエネルギーに対応する演算子であり、系 $S$ と密接不可分の関係にある。ハミルトニアン $H$ は、後述の電子状態算出部によって、系 $S$ の電子状態を算出するために用いられる。ハミルトニアン $H$ は、例えば、次の式(1)のように表される。

【数1】

$$\hat{H}\Psi = \left[ \hat{T} + \hat{V} + \hat{U} \right] \Psi = \left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \right) + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i<j}^N U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \Psi = E\Psi,$$

【0016】

式(1)は、第1原理のハミルトニアン $H$ を含む波動関数の方程式(シュレーディンガー方程式)である。ハミルトニアン $H$ は、運動エネルギー $T$ 、ポテンシャルエネルギー $V$ 、および相互作用エネルギー $U$ の和として表される( $H = T + V + U$ )。なお、 $r_i$ 、 $r_j$ は、電子の位置に対応する。

【0017】

式(1)のハミルトニアン $H$ にパラメータによって変動する項を追加するか、又は、運動エネルギー $T$ 、ポテンシャルエネルギー $V$ 、および相互作用エネルギー $U$ の少なくとも何れかにおいてパラメータの影響を考慮することによって、パラメータの関数として、ハミルトニアン $H$ を表すことができる。一例として、系 $S$ の温度、系 $S$ に印加する磁場、電場、電磁波、音波、圧力が変化することで、系 $S$ のエネルギー状態は変化する。また、系 $S$ を構成する原子の種類、組み合わせ、配置、原子間距離、価数も、系 $S$ のエネルギー状態を変化する要因となり、パラメータとして、ハミルトニアン $H$ に組み込むことができる。このように、パラメータは、系 $S$ (すなわち、ハミルトニアン $H$ )の要素から、選択される、連続的な数値を取り得る変数である。

40

【0018】

ここで、式(1)に示される第1原理のハミルトニアン $H$ に替えて、式(2)のように簡略化されたモデルハミルトニアンを用いてもよい。

50

【数 2】

$$\mathcal{H} = \sum_{k\mu\nu} t_{k\mu\nu} c_{k\mu}^\dagger c_{k\nu} + \sum_{\substack{k_1 k_2 k_3 k_4 \\ \mu\nu\xi\lambda}} V_{k_1 k_2 k_3 k_4} c_{k_1\mu}^\dagger c_{k_2\nu} c_{k_3\xi}^\dagger c_{k_4\lambda} \\ + \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q + \sum_{qk\mu} g_q (c_{k+q\mu}^\dagger c_{k\mu} a_q + c_{k\mu}^\dagger c_{k+q\mu} a_q^\dagger)$$

【0019】

モデルハミルトニアンにおいて、電子間のホッピング項、電子・電子相互作用項、電子と格子の相互作用項、有効結合定数（ハミルトニアンの3次以上の項の係数）、有効的な重なり積分（電子軌道の重なりによって生じる項）、および有効相互作用（第一原理のハミルトニアンから導出されるスピン間相互作用などのモデル化された相互作用）をハミルトニアン $\mathcal{H}$ （ ）のパラメータ とすることができる。

10

【0020】

記憶部20には、このようなハミルトニアン $\mathcal{H}$ （ ）を規定する各種の関数及び当該関数の複数のパラメータ が格納されている。

【0021】

特性量 $P$ （ ）は、系 $S$ の特性（特徴）を表す量であり、パラメータ によって変動する。すなわち、特性量 $P$ （ ）は、パラメータ の関数である。特性量 $P$ （ ）の例として、超伝導転移温度、超伝導ギャップ、熱電効率、太陽光発電効率、及び外場（例えば、磁場、電場、電磁波、音波、圧力）に対する線形または非線形の応答（一例として、ホール係数）を挙げることができる。記憶部20には、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ から導出される系 $S$ の電子状態に基づいて、このような特性量 $P$ （ ）を導出するための各種の方程式が格納されている。

20

【0022】

（入出力部）

入出力部30は、情報処理装置1の外部からデータを受け付けたり、情報処理装置1の外部にデータを出力したりする。一例として、入出力部30は、キーボードやタッチパッド等の入力デバイスを備え、これらの入力デバイスを介してデータの入力を受け付ける。そして受け付けたデータを制御部10に供給する。また、一例として、入出力部30は、表示パネルを備え、制御部10から供給されたデータを当該表示パネルを介して表示する。このとき、入出力部30は、表示部として機能し、パラメータ の値、特性量 $P$ の値、及び後述の目的関数 $L$ の値の少なくとも何れか、例えば、パラメータ と特性量 $P$ （ ）の関係を表示する。

30

【0023】

（制御部）

続いて、図1を参照して、情報処理装置1が備える制御部10の構成について説明する。図1に示すように、制御部10は、特性量算出部11、更新部12、判定部13を備えている。特性量算出部11は、電子状態算出部14を、更新部12は微分実行部15を備える。

40

【0024】

特性量算出部11は、次に示すように、操作可能なパラメータ を用いて規定されたハミルトニアン $\mathcal{H}$ （ ）から、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ （ ）が規定する系 $S$ の特性量 $P$ （ ）を算出する。

【0025】

まず、特性量算出部11の電子状態算出部14は、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ （ ）に基づいて、系 $S$ の電子状態を算出する。式（1）で示される第1原理のハミルトニアン $\mathcal{H}$ の場合、電子状態算出部14は、例えば、ハートリーフォック近似法、密度汎関数法を用いて電子状態を計算する。式（2）で示されるモデルハミルトニアンの場合、電子状態算出部14

50

は、一般的な数値計算を用いて、系 S の電子状態を算出する。

【 0 0 2 6 】

次に、特性量算出部 1 1 は、算出された電子状態に基づいて、特性量 P を算出する。例えば、電子状態に基づいて、バンド構造、格子配置、フォノン分散、またはフォースフィールドを求めることで、特性量 P を算出することができる。特性量 P の算出に線形応答や非線形応答を用いてもよい。例えば、バンド構造から線形応答理論を用いて算出されるホール係数、バンド構造から非線形応答理論を用いて算出される非線形光学伝導度などを特性量 P とすることができる。また、バンド構造とフォノン分散などから算出される超伝導ギャップを特性量 P としてもよい。

【 0 0 2 7 】

更新部 1 2 は、パラメータ P ( ) を引数として含む目的関数 L ( P ( ) ) であって、特性量 P ( ) に関する目的関数 L ( P ( ) ) の値がより大きくなるように、又は当該目的関数 L ( P ( ) ) の値がより小さくなるように、パラメータ を更新する。

【 0 0 2 8 】

目的関数 L ( P ) は、特性量 P ( ) の目標に応じて、次のように、設定することができる。

【 0 0 2 9 】

特性量 P を大きくしたい場合、または小さくしたい場合、目的関数 L ( P ) を特性量 P に対して、比例する関数とする (  $L = A \cdot P$ 、A : 正または負の比例定数)。特性量 P を大きくしたい場合、比例定数 A を正とする (例えば、 $A = 1$  として、 $L ( P ) = P$ )。一方、特性量 P を小さくしたい場合、比例定数 A を負とする (例えば、 $A = -1$  として、 $L ( P ) = -P$ )。

【 0 0 3 0 】

特性量 P を目標値  $P_t$  に近づけたい場合、例えば、目的関数 L ( P ) を、特性量 P と特性量 P の目標値  $P_t$  との差の関数とする (  $L = \text{function} ( P - P_t )$  )。具体的には、「 $L ( P ) = ( P - P_t )^2$ 」とする。

【 0 0 3 1 】

特性量 P が物理量 x に対する特性の依存性を表すスペクトル特性量 P ( x ) であり、スペクトル特性量 P ( x ) を目標スペクトル特性量  $P_t ( x )$  に近づけたい場合がある。この場合、例えば、目的関数 L ( P ) は、スペクトル特性量 P ( x ) とスペクトル特性量の目標である目標スペクトル特性量  $P_t ( x )$  との差を物理量 x で積算した関数とする (  $L ( P ) = \int ( P ( x ) - P_t ( x ) ) dx$  )。

【 0 0 3 2 】

微分実行部 1 5 は、特性量 P ( ) の微分であって、パラメータ に関する微分 (  $P /$  ) を実行する。すなわち、微分実行部 1 5 は、微分 (  $P /$  ) の値 ( 微分値 ) を算出する。この微分値 (  $P /$  ) は、パラメータ の更新に用いられる。具体的には、微分実行部 1 5 は、次のように、自動微分 (  $P /$  ) を実行する。

【 0 0 3 3 】

すなわち、解析的な微分が可能なレベルに分解された各計算プロセスにおいて、その微分値をメモリに保持しておく。これを用いて、自動微分の手法を使うことによって、 $P /$  を算出する。

【 0 0 3 4 】

なお、自動微分を実行するための具体的なアルゴリズムは本実施形態を限定するものではない。一例として、微分実行部 1 5 は、ニューラルネットワークの誤差逆伝搬法 ( Back Propagation ) において用いられている微分アルゴリズムを実行することによって自動微分を行う構成とすることができる。

【 0 0 3 5 】

更新部 1 2 は、目的関数 L ( P ( ) ) の値がより大きくなるように、又はより小さくなるように、パラメータ を更新する。パラメータ を値  $i$  から値  $i+1$  に更新する場合、例えば、最速降下法を用いて、式 ( 3 ) に示すように、値  $i$  から値  $i+1$  を導

10

20

30

40

50

出することができる。式(3)は、微分実行部15が算出した微分( P/ )の値を用いて、パラメータを更新することができることを示す。

【0036】

$$\begin{aligned}
&= \alpha \cdot [ -L'(P(i)) / P ] \cdot P(i) \\
&= \alpha \cdot [ -L'(P) / P ] \cdot P(i) \dots\dots\dots (3)
\end{aligned}$$

α : 比例定数

【0037】

より好ましくは、更新部12は、確率的勾配降下法(Stochastic Gradient Descent: SGD)、Adam、RMSProp、K-Fac、EK-Facなどの最適化手法を用いる。いずれにしても、更新部12は、微分実行部15が算出した微分 L/ の値を用いて、パラメータを更新することができる。

10

【0038】

判定部13は、更新の前後のパラメータ(値  $P_{i+1}$ 、 $P_i$ )を比較して、パラメータの更新の終了を判定する。この判定は、パラメータの収束の判定を意味する。例えば、次の式(4)に基づき、パラメータの更新の終了を判定できる。

【0039】

$$|P_{i+1} - P_i| < Th \dots\dots\dots \text{式(4)}$$

【0040】

すなわち、判定部13は、更新前後のパラメータの値  $P_{i+1}$ 、 $P_i$ の差の絶対値が閾値Th以下であるとき、パラメータの更新を終了すると判定し、この差の絶対値が閾値Thより大きいとき、パラメータの更新を終了しないと判定する。

20

【0041】

以下、情報処理装置1の動作を説明する。図3は、本発明の実施形態に係る情報処理装置が実行する最適化処理の流れを示すフロー図である。

【0042】

(1)パラメータ、特性量P( )、ハミルトニアンH( )、及び目的関数L(P( ))の決定(ステップS101)

【0043】

パラメータ、特性量P( )、およびハミルトニアンH( )の決定は、記憶部20に格納されているパラメータ、ハミルトニアンH( )、特性量P( )の組み合わせを選択することを意味する。この結果、所望の特性Pを探索する対象としてハミルトニアンH( ) (結局は、系S)が選択されることになる。

30

【0044】

目的関数L(P( ))は、既述のように、特性量P( )に対する目標に基づいて、特性量P( )の関数として適宜に選択できる。

【0045】

(2)パラメータの値  $P_i$ の設定(ステップS102)

パラメータに値  $P_i$ を設定する。値  $P_i$ として、適宜に初期値を設定できる。

【0046】

(3)ハミルトニアンH(  $P_i$  )に基づく、特性量P(  $P_i$  )の値  $P_i$ の算出(ステップS103, S104)

40

電子状態算出部14は、ハミルトニアンH( )に基づいて、系Sの電子状態を算出する。特性量算出部11は、算出された電子状態に基づいて、特性量Pの値  $P_i$ を算出する。ステップS104は、操作可能なパラメータを用いて規定されたハミルトニアンH( )から、ハミルトニアンH( )が規定する系Sの特性量P( )を算出する特性量算出ステップに対応する。

【0047】

(4)目的関数L(P(  $P_i$  ))の値の算出(ステップS105)

関数L(P)に特性量Pの値  $P_i$ を代入することで、関数L(P)の値  $L_i$ を算出する

50

。

## 【0048】

(5) パラメータ に対する特性量  $P$  の目的関数  $L(P)$  の微分値  $L'(P)$  / の算出 (ステップ S106)

微分実行部 15 は、パラメータ に関する特性量  $P$  ( ) の微分値  $P/$  を算出する。更新部 12 は、微分値  $P/$  に基づいて、微分値  $L'(P)$  / を算出する ( $L'(P) / = [L(P) / P] \cdot [P( ) / ]$ 、式 (3) 参照)。ステップ S106 は、特性量算出ステップにて算出した特性量  $P$  が所望の値に近くようにパラメータ を更新する更新ステップに対応する。

## 【0049】

10

(6) 関数  $L(P)$  を極大、極小化するためのパラメータ の値  $i+1$  の算出 (ステップ S108)

更新部 12 は、例えば、式 (3) に基づいて、パラメータ を値  $i$  から値  $i+1$  へと更新する。

## 【0050】

(7) パラメータ の更新終了の判断 (ステップ S109)

判定部 13 は、パラメータ の更新終了の可否を判断する。すなわち、関数  $L(P)$  が収束状態かが評価される。具体的には、値  $i+1$  と値  $i$  との差が閾値  $Th$  以下であれば、収束状態とし、差が閾値  $Th$  より大きければ非収束状態と判断する。

## 【0051】

20

収束状態の場合、最適化処理は終了する。このときのパラメータ の値  $i$  は、系  $S$  の特性量  $P$  を所望の状態とするのに適すると考えられる。

## 【0052】

情報処理装置 1 は、このようにして得られたパラメータ の値  $i$ 、特性量  $P(i)$ 、又は目的関数  $L(P(i))$ 、又は、これらの関係を入出力部 30 を介して表示させることができる。

## 【0053】

図 4 は、パラメータと特性量の関係を示す図である。ループ変数  $i$  に応じて、パラメータ、特性量  $P$  が変化している。ここでは、ループ変数  $i$  が比較的小さい範囲では、ループ変数  $i$  の増加につれて、パラメータ は増加し、特性量  $P$  は減少している。そして、 $i = n - 2$  から  $i = n - 1$  となったとき、パラメータ、特性量  $P$  はいずれも増加している。その後、 $i = n - 1$  から  $i = n$  となったときに、パラメータ、特性量  $P$  はいずれも減少し、パラメータ は収束したと判定された (ここでは、特性量  $P$  は実質的に極小値)。このように、ループ変数  $i$  の増加に応じて、特性量  $P$  の目標に向かうように、パラメータ は変動を繰り返す。

30

## 【0054】

以上のように、本実施形態によれば、パラメータ を更新することによって、ハミルトニアン  $H()$  (系  $S$ ) を最適化して所望の特性量  $P()$  を得ることが可能となる。

## 【0055】

〔変形例〕

40

以下、本発明の変形例について、説明する。上記実施形態では、パラメータ は、判りやすさのために、1 つとしていたが、複数のパラメータ を用いてもよい。すなわち、複数のパラメータ を変化させて、特性量  $P$  に対して系  $S$  の最適化を図ることができる。このとき、複数のパラメータ を並行して変化させることも可能であるが、複数のパラメータ を順次に変化させてもよい。

## 【0056】

図 5 は、本発明の変形例に係る情報処理装置が実行する最適化処理の流れを示すフロー図である。ここでは、パラメータ として、温度  $T$  を用いた。

## 【0057】

ここでは、パラメータ の値  $i$  の設定 (ステップ S102) の後に、系  $S$  の温度  $T$  の

50

値  $T_1$  を設定し (ステップ  $S_{102a}$ )、他のパラメータの更新ループ 1 が実行される (ステップ  $S_{103a}$ 、 $S_{104} \sim S_{107}$ 、 $S_{108a}$ 、 $S_{109a}$ )。更新ループ 1 において、パラメータの更新の終了が判定されると (ステップ  $S_{108a}$ )、系  $S$  の温度  $T$  の値  $T_2$  を設定し (ステップ  $S_{102b}$ )、パラメータの更新ループ 2 が実行される (ステップ  $S_{103b}$ 、 $S_{104} \sim S_{107}$ 、 $S_{108b}$ 、 $S_{109b}$ )。

【0058】

ここで、ステップ  $S_{108a}$  での終了判定の条件 (例えば、閾値  $T_{h1}$ ) は、ステップ  $S_{108b}$  での終了判定の条件 (例えば、閾値  $T_{h2}$ ) よりも、緩やかであることが好ましい (例えば、 $T_{h1} > T_{h2}$ )。更新ループ 1 は、更新ループ 2 の前段として、更新ループ 2 での探索の範囲を絞るためのものだからである。

10

【0059】

ステップ  $S_{102a}$  で設定される温度  $T_1$  は、ステップ  $S_{102b}$  で設定される温度  $T_2$  より大きい。すなわち、温度を当初よりも下げて、パラメータを収束させている。このような手法は、特性量  $P$  の算出に線形応答や非線形応答を含む場合に有効である。このような場合、微分量  $P/$  が安定せず、パラメータが収束し難いことがある。当初の温度  $T_1$  を高くすることで、安定な微分量  $P/$  が得られ、パラメータの更新、ひいてはその収束が容易になる。

【0060】

ここでは、判りやすさのために、温度を 2 段階に変化させているが、3 段階以上に変化させてもよい。例えば、最初に高温にしておき、ゆっくり温度を下げながら最適化を進めることができる。

20

【0061】

系  $S$  の特性に影響を与え、かつ数値で規定される可変要素であれば、種々の要素をパラメータとすることができる。パラメータとして、次の (1) ~ (3) を挙げるができる。なお、(3) の場合、電子状態算出部 14 は、例えば、VCA (Virtual crystal approximation) を用いて、電子状態を算出できる。

(1) 周波数に依存した磁場、電場、電磁波、および音波など

(2) 原子の組成比 (例えば、分子 ( $A \times B_{1-x}$ )  $CO_3$  の  $x$ )

(3) 2 種類以上の原子の組み合わせ

【0062】

格子の配置をパラメータとしてもよい。また、格子の配置に影響を与えるフォースフィールドをパラメータとしてもよい。この場合、フォースフィールドをパラメータとして、格子の配置を更新することで、格子の構造を最適化することができる。

30

【0063】

(情報処理装置 1 のハードウェア構成例)

図 6 は、情報処理装置 1 として用いられるコンピュータの物理的構成を例示したブロック図である。情報処理装置 1 は、図 6 に示すように、バス 210 と、プロセッサ 201 と、主メモリ 202 と、補助メモリ 203 と、通信インタフェース 204 と、入出力インタフェース 205 とを備えたコンピュータによって構成可能である。プロセッサ 201、主メモリ 202、補助メモリ 203、通信インタフェース 204、及び入出力インタフェース 205 は、バス 210 を介して互いに接続されている。入出力インタフェース 205 には、入力装置 206 および出力装置 207 が接続されている。

40

【0064】

プロセッサ 201 としては、例えば、CPU (Central Processing Unit)、マイクロプロセッサ、デジタルシグナルプロセッサ、マイクロコントローラ、GPU (Graphic Processing Unit)、TPU (Tensor Processing Unit)、またはこれらの組み合わせ等が用いられる。

【0065】

主メモリ 202 としては、例えば、半導体 RAM (Random Access Memory) 等が用いられる。

50

## 【 0 0 6 6 】

補助メモリ 2 0 3 としては、例えば、フラッシュメモリ、H D D ( Hard Disk Drive )、S S D ( Solid State Drive )、またはこれらの組み合わせ等が用いられる。補助メモリ 2 0 3 には、上述した情報処理装置 1 の動作をプロセッサ 2 0 1 に実行させるためのプログラムが格納されている。プロセッサ 2 0 1 は、補助メモリ 2 0 3 に格納されたプログラムを主メモリ 2 0 2 上に展開し、展開したプログラムに含まれる各命令を実行する。

## 【 0 0 6 7 】

通信インタフェース 2 0 4 は、ネットワーク N に接続するインタフェースである。

## 【 0 0 6 8 】

入出力インタフェース 2 0 5 としては、例えば、U S B インタフェース、赤外線や Bluetooth ( 登録商標 ) 等の近距離通信インタフェース、またはこれらの組み合わせが用いられる。

## 【 0 0 6 9 】

入力装置 2 0 6 としては、例えば、キーボード、マウス、タッチパッド、マイク、又はこれらの組み合わせ等が用いられる。出力装置 2 0 7 としては、例えば、ディスプレイ、プリンタ、スピーカ、又はこれらの組み合わせが用いられる。

## 【 0 0 7 0 】

この例で、プロセッサ 2 0 1 は制御部 1 0 を実現するハードウェア要素の一例である。また、主メモリ 2 0 2 及び補助メモリ 0 3 は、記憶部 2 0 を実現するハードウェア要素の一例である。また、入出力インタフェース 2 0 5、入力装置 2 0 6 及び出力装置 2 0 7 は、上述した入出力部 3 0 を実現するハードウェア要素の一例である。

## 【 0 0 7 1 】

〔ソフトウェアによる実現例〕

情報処理装置 1 の機能は、当該装置としてコンピュータを機能させるためのプログラムであって、当該装置の各制御ブロック ( 特に制御部 1 0 に含まれる各部 ) としてコンピュータを機能させるためのプログラムにより実現することができる。

## 【 0 0 7 2 】

この場合、上記装置は、上記プログラムを実行するためのハードウェアとして、少なくとも 1 つの制御装置 ( 例えばプロセッサ ) と少なくとも 1 つの記憶装置 ( 例えばメモリ ) を有するコンピュータを備えている。この制御装置と記憶装置により上記プログラムを実行することにより、上記各実施形態で説明した各機能が実現される。

## 【 0 0 7 3 】

上記プログラムは、一時的ではなく、コンピュータ読み取り可能な、1 または複数の記録媒体に記録されていてもよい。この記録媒体は、上記装置が備えていてもよいし、備えていなくてもよい。後者の場合、上記プログラムは、有線または無線の任意の伝送媒体を介して上記装置に供給されてもよい。

## 【 0 0 7 4 】

また、上記各制御ブロックの機能の一部または全部は、論理回路により実現することも可能である。例えば、上記各制御ブロックとして機能する論理回路が形成された集積回路も本発明の範疇に含まれる。

## 【 0 0 7 5 】

また、上記各制御ブロックの機能の一部または全部は、上記制御装置で動作するものであってもよいし、他の装置 ( 例えばエッジコンピュータまたはクラウドサーバ ( cloud server ) 等 ) で動作するものであってもよい。

## 【 0 0 7 6 】

〔まとめ〕

上述した実施形態の一部又は全部は、以下のようにも記載され得る。ただし、本発明は、以下の記載する態様に限定されるものではない。

## 【 0 0 7 7 】

本発明の態様 1 に係る情報処理装置 ( 1 ) は、操作可能なパラメータ ( ) を用いて規

10

20

30

40

50

定されたハミルトニアン ( $H(\ )$ ) から、当該ハミルトニアンが規定する系 ( $S$ ) の特性量 ( $P(\ )$ ) を算出する特性量算出部 (11) と、前記パラメータを引数として含む目的関数 ( $L(P)$ ) であって、前記特性量に関する目的関数の値がより大きくなるように、又は当該目的関数の値がより小さくなるように、前記パラメータを更新する更新部 (12) とを備えている。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、系の特性量の最適化を図ることができる。

**【0078】**

本発明の態様 2 に係る情報処理装置は、上記態様 1 において、前記更新部は、前記特性量の微分であって、前記パラメータに関する自動微分 ( $P/$ ) を実行する微分実行部 (15) を備えてもよい。上記の構成によれば、更新前のパラメータの値 ( $i$ ) での微分値 ( $P/ i$ ) を用いて、更新後のパラメータの値 ( $i+1$ ) を算出できる。

10

**【0079】**

本発明の態様 3 に係る情報処理装置は、上記態様 1 または 2 において、前記更新の前後のパラメータを比較して、前記パラメータの更新の終了を判定する判定部 (13) を備えてもよい。上記の構成によれば、パラメータの収束を判定し、その更新を終了できる。

**【0080】**

本発明の態様 4 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 3 の何れかにおいて、前記特性量算出部は、前記ハミルトニアンに基づいて、前記系の電子状態を算出する電子状態算出部 (14)、を備えてもよい。上記の構成によれば、算出した電子状態に基づいて、特性量を算出できる。

20

**【0081】**

本発明の態様 5 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 4 の何れかにおいて、前記パラメータは、前記系を構成する原子の種類、組み合わせ、配置、原子間距離、電子の数、有効結合定数、有効な重なり積分、有効相互作用、前記系の温度、前記系に印加される磁場、電場、電磁波、音波、又は圧力に対応してもよい。上記の構成によれば、系を構成する原子、系に印加される圧力等をパラメータとして用いることができる。

**【0082】**

本発明の態様 6 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 5 の何れかにおいて、前記特性量は、超伝導転移温度、超伝導のギャップ関数、熱電効率、太陽光発電効率、又は外場に対する線形または非線形の応答であってよい。上記の構成によれば、超伝導転移温度等を特性量として算出できる。

30

**【0083】**

本発明の態様 7 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 6 の何れかにおいて、前記目的関数は、前記特性量に対して、比例してもよい。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、特性量を大きく、または小さくすることができる。

**【0084】**

本発明の態様 8 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 6 の何れかにおいて、前記目的関数は、前記特性量と前記特性量の目標値との差の関数であってよい。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、特性量を目標値に近づけることができる。

**【0085】**

本発明の態様 9 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 6 の何れかにおいて、前記特性量は、物理量に対する特性の依存性を表すスペクトル特性量であり、前記目的関数は、前記スペクトル特性量と前記スペクトル特性量の目標である目標スペクトル特性量との差を前記物理量で積算した関数であってよい。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、スペクトル特性量を目標スペクトル特性量に近づけることができる。

40

**【0086】**

本発明の態様 10 に係る情報処理装置は、上記態様 1 から 9 の何れかにおいて、前記パラメータの値、前記特性量の値、及び前記目的関数の値の少なくとも何れかを表示する表示部 (入出力部 30) を備えてもよい。上記の構成によれば、更新によるパラメータ、特性量、及び目的関数のいずれかの推移を表すことができる。

50

## 【0087】

本発明の態様11に係る情報処理方法は、操作可能なパラメータを用いて規定されたハミルトニアンから、当該ハミルトニアンが規定する系の特性量を算出する特性量算出ステップと、前記特性量算出ステップにて算出した特性量が所望の値に近づくように前記パラメータを更新する更新ステップとを備えている。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、系の特性量の最適化を図ることができる。

## 【0088】

本発明の態様12に係るプログラムは、態様1の情報処理装置としてコンピュータを機能させるためのプログラムであって、上記特性量算出部、及び上記更新部としてコンピュータを機能させるためのプログラムである。上記の構成によれば、パラメータを更新することで、系の特性量の最適化を図ることができる。

10

## 【0089】

本発明は上述した各実施形態に限定されるものではなく、請求項に示した範囲で種々の変更が可能であり、異なる実施形態にそれぞれ開示された技術的手段を適宜組み合わせ得られる実施形態についても本発明の技術的範囲に含まれる。

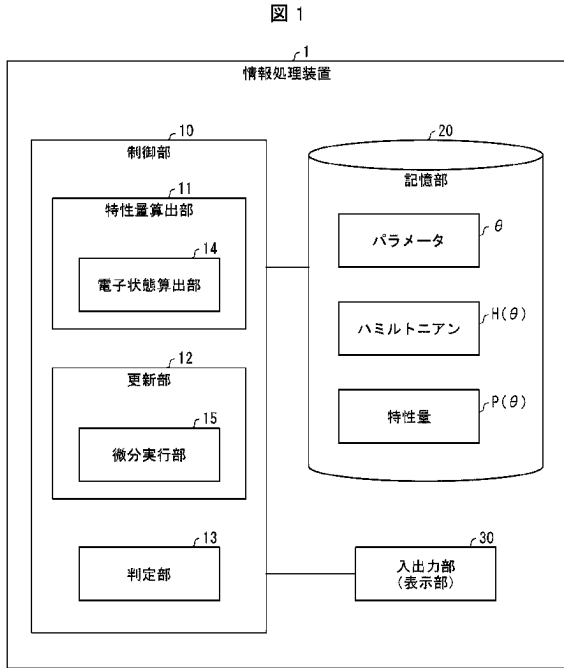
## 【符号の説明】

## 【0090】

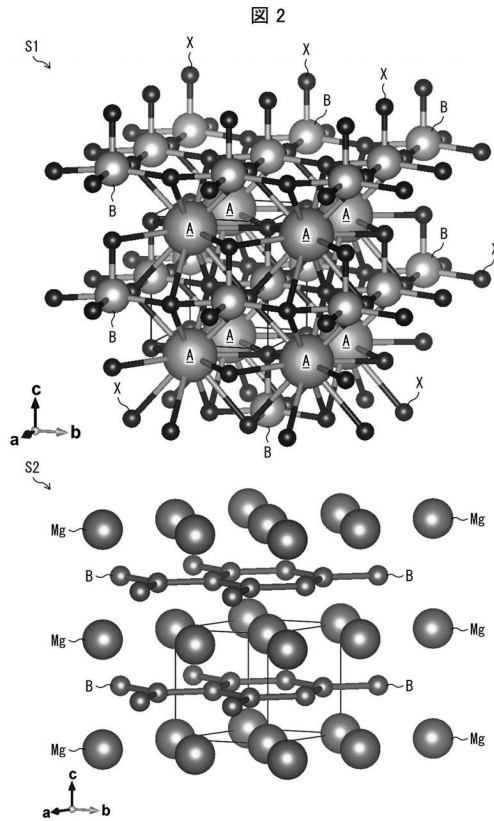
- 1 情報処理装置
- 10 制御部
- 11 特性量算出部
- 12 更新部
- 13 判定部
- 14 電子状態算出部
- 15 微分実行部
- 20 記憶部
- 30 入出力部

20

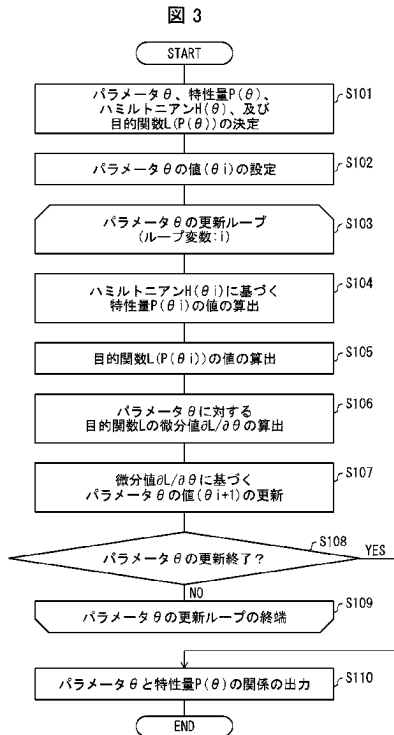
【図1】



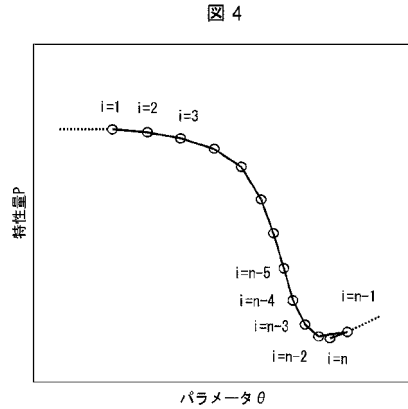
【図2】



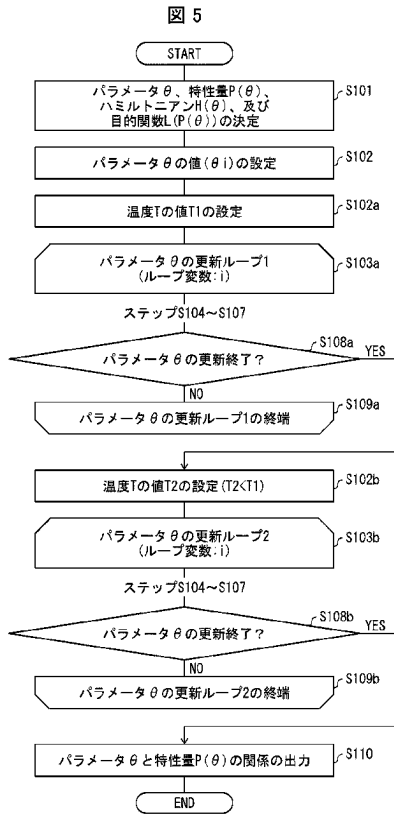
【図3】



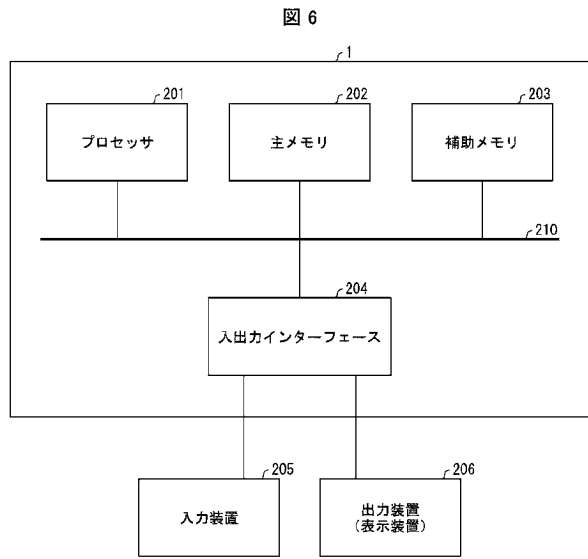
【図4】



【 図 5 】



【 図 6 】



---

フロントページの続き

(56)参考文献 特開 2 0 2 0 - 2 0 1 5 6 6 ( J P , A )

特開 2 0 1 2 - 0 1 5 4 2 7 ( J P , A )

PERUZZO, Alberto et al. , A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor , nature communications [online] , 2014年07月23日 , pp.1-7 , [検索日 2024.01.17]、インターネット<URL:https://www.nature.com/articles/ncomms5213>

ZHANG, Yu et al. , Variational Quantum Eigensolver with Reduced Circuit Complexity , arXiv [online] , 2021年06月14日 , p.1-12 , [検索日 2023.03.10]、インターネット:<URL:https://arxiv.org/pdf/2106.07619v1.pdf>

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)

G 0 6 N 3 / 0 0 - 9 9 / 0 0

G 0 6 F 1 8 / 0 0 - 1 8 / 4 0