

AI 特許紹介(31)

AI 特許を学ぶ！究める！

～量子コンピュータを用いた最適化～

2021 年 8 月 10 日

河野特許事務所

所長 弁理士 河野英仁

「AI 特許紹介」シリーズは、注目すべき AI 特許のポイントを紹介します。熾烈な競争となっている第 4 次産業革命下では AI 技術がキーとなり、この AI 技術・ソリューションを特許として適切に権利化しておくことが重要であることは言うまでもありません。

AI 技術は Google, Microsoft, Amazon を始めとした IT プラットフォーマ、研究機関及び大学から毎週のように新たな手法が提案されており、また AI 技術を活用した新たなソリューションも次々とリリースされています。

本稿では米国先進 IT 企業を中心に、これらの企業から出願された AI 特許に記載された AI テクノロジー・ソリューションのポイントをわかりやすく解説致します。

1.概要

特許出願人 IBM

出願日 2019 年 6 月 17 日

公開日 2020 年 12 月 17 日

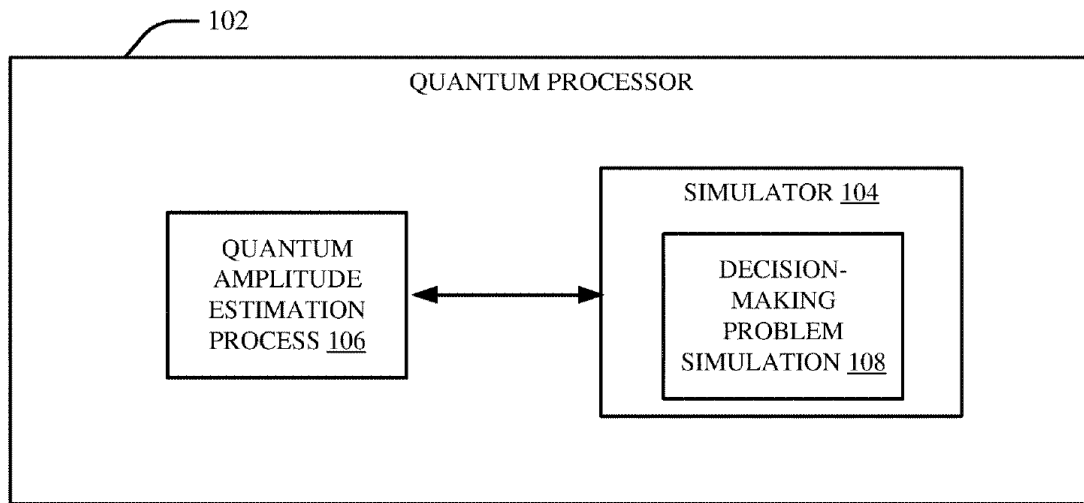
公開番号 US2020/0394276

発明の名称 量子コンピュータでのシミュレーションベースの最適化

276 特許は、量子コンピュータによる量子振幅推定を用いて、意思決定問題をシミュレートする技術に関する。具体的には、量子コンピュータは量子振幅推定を用いて目的関数を古典的プロセッサに提供し、古典的プロセッサは機械学習ベースの技術を用いた最適化プロセスにより、目的関数を最大化または最小化する最適なパラメータを、量子コンピュータに提供する技術に関する。

2.特許内容の説明

図 1 は、量子コンピュータ上でのシミュレーションベースの最適化のためのシステム 100 のブロック図を示す。



システム 100 は、量子プロセッサ 102 を含む。量子プロセッサ 102 は、意思決定問題シミュレーション 108 を介してシミュレーションを実行するために量子振幅推定プロセスを使用するシミュレータ 104 を含む。意思決定問題シミュレーション 108 は、量子振幅推定プロセス 106 を含むことができる。

量子プロセッサ 102 は、量子物理学の原理に基づいて一連の計算を実行する機械である。例えば、量子プロセッサ 102 は、量子ゲートのセットに関連する 1 つまたは複数の量子計算を実行する。さらに、量子プロセッサ 102 は、量子ビットを使用して情報を符号化する。

量子プロセッサ 102 は、意思決定問題シミュレーション 108 を容易にするために、量子振幅推定プロセス 106 を実行する。例えば、量子プロセッサ 102 は、量子振幅推定プロセス 106 に関連する命令スレッドのセットを実行する。

量子振幅推定プロセス 106 は、例えば、古典的なアルゴリズムと比較して二次高速化を達成することができる量子アルゴリズムである。量子プロセッサ 102 は、意思決定問題に関連する確率分布に基づいて、量子振幅推定プロセス 106 を実行する。例えば、量子振幅推定プロセス 106 は、意思決定問題に関連するデータの確率的分布を採用する。

量子振幅推定プロセス 106 は、意思決定問題に関連するデータの確率的分布をサンプリングする。例えば、意思決定問題のパラメータは、量子プロセッサ 102 に関連する量子状態の振幅に適合させることができる。量子振幅推定プロセス 106 は、意思決定問題のための量子探索アルゴリズムに関連する成功の確率を推定することができる。

意思決定問題に関連する技術的アプリケーションは、サプライチェーン管理アプリケーション、ロジスティクスアプリケーション、製造アプリケーション、設計アプリケーション（たとえば、コンピュータ設計アプリケーション、回路設計アプリケーション、製品設計アプリケーションなど）、財務アプリケーション、または別のタイプの技術アプリケーションである。

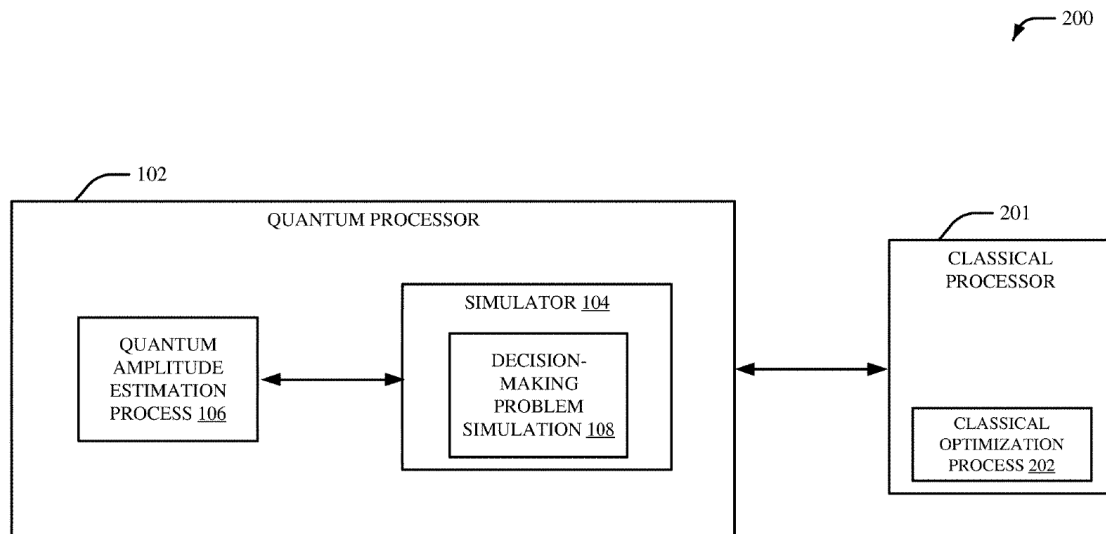
量子振幅推定プロセス 106 は、意思決定問題に関連する目的関数を決定することができる。目的関数は、意思決定の問題を説明する変数、値、および/または記号の組み合わせに関連する関係式である。

量子振幅推定プロセス 106 は、意思決定問題の目的関数に関連する最小値または最大値を推定することができる。一例では、目的関数は、量子プロセッサ 102 に関連付けられた量子コンピューティングプロセスの損失関数（例えば、コスト関数）である。さらに、目的関数は、量子プロセッサ 102 に関するエネルギーに関連付けられる。例えば、目的関数は、量子プロセッサ 102 の全エネルギーを符号化するハミルトニアン値（例えば、ハミルトニアンデータ行列）である。

シミュレータ 104 は、量子振幅推定プロセス 106 を介して意思決定問題シミュレーション 108 を実行することができる。例えば、シミュレータ 104 の意思決定問題シミュレーション 108 は、量子振幅推定プロセス 106 に基づいて意思決定問題をシミュレートおよび最適化する。

量子振幅推定プロセス 106 のパラメータ化された演算子を使用して、意思決定問題シミュレーション 108 を介して意思決定問題をシミュレートおよび最適化する。シミュレータ 104 の意思決定問題シミュレーション 108 は、意思決定問題に関連する意思決定変数のタイプに基づく古典的な最適化プロセス（たとえば、古典的最適化プロセスに関連するデータを使用して）を使用して、意思決定問題をシミュレートおよび最適化することができる。

図 2 はシステム 200 のブロック図である。



システム 200 は、量子プロセッサ 102 および古典的なプロセッサ 201 を含むことができる。古典的なプロセッサ 201 は、量子プロセッサ 102 に通信可能に結合することができる。例えば、古典的なプロセッサ 201 は、シミュレータ 104 に通信可能に結合することができる。

古典的なプロセッサ 201 は、量子振幅推定プロセス 106 および意思決定問題シミュレーション 108 からデータを受信することができる。さらに、古典的なプロセッサ 201 は、量子振幅推定プロセス 106 および意思決定問題シミュレーション 108 にデータを提供することができる。

量子プロセッサは、シミュレータ 104 を含むことができる。量子プロセッサ 102 はまた、量子振幅推定プロセス 106 を実行することができる。シミュレータ 104 は、意思決定問題シミュレーション 108 を実行することができる。古典的なプロセッサ 201 は、古典的最適化プロセス 202 を実行することができる。古典的なプロセッサ 201 は、2 進数とトランジスタに基づいて一連の計算を実行するマシンである。

古典的なプロセッサ 201 は、例えば、古典的なオプティマイザである。古典的最適化プロセス 202 は、古典的計算技術を使用して、量子プロセッサ 102 によって解決される意思決定問題のためのデータのシミュレーションベースの最適化を容易にすることができる。

古典的な最適化プロセス 202 は、任意の適切な機械学習ベースの技術、統計ベースの技術、および確率ベースの技術を採用することができる。例えば、古典的な最適化プロセス 202 は、エキスパートシステム、ファジー論理、SVM、隠れマルコフモデル (H

MM)、グリーディ検索アルゴリズム、ルールベースのシステム、ベイジアンモデル（例えば、ベイジアンネットワーク）、ニューラルネットワーク、他の非線形トレーニング技術、データ融合、ユーティリティベースの分析システム、ベイジアンモデルを採用したシステムなどを採用することができる。

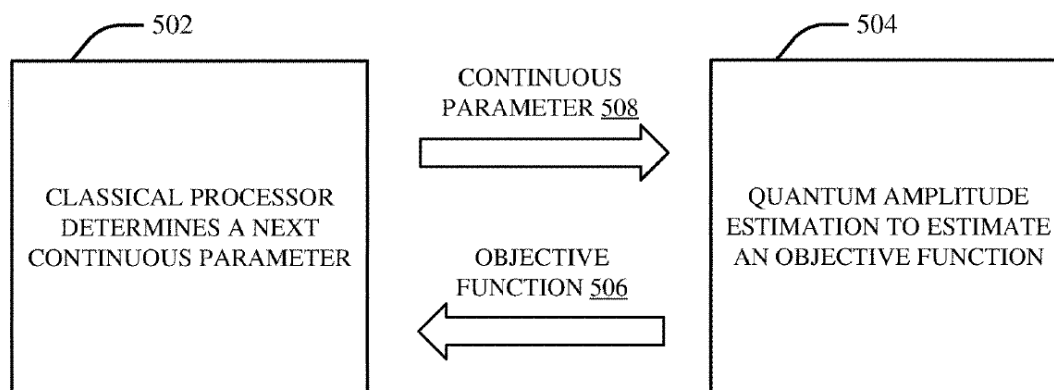


図 3 はシステム 500 のブロック図である。

システム 500 は、古典的なプロセッサが次の連続パラメータを決定するプロセス 502 を含む。システム 500 はまた、目的関数を推定するために量子振幅推定を使用するプロセス 504 を含む。例えば、量子振幅推定を使用するプロセス 504 は、プロセス 502 に目的関数 506 を提供する。プロセス 502 は、目的関数 506 を使用して、プロセス 504 に連続パラメータ 508 を提供する。一実施形態では、プロセス 502 は、古典的プロセッサ 201、古典的最適化プロセス 202、によって実行することができる。

さらに、プロセス 504 は、量子プロセッサ 102 の量子振幅推定プロセス 106 によって実行することができる。目的関数 506 は、意思決定問題に関連付けることができる。例えば、目的関数 506 は、意思決定問題を説明する変数、値、および記号の組み合わせに関連する関係式である。

プロセス 504 は、量子振幅推定を使用して、目的関数 506 を推定することができる。さらに、プロセス 502 は、古典的なオプティマイザを使用して、目的関数 506 を最大化または最小化する最適なパラメータ（例えば、連続パラメータ 508）を決定することができる。したがって、プロセス 504 は、量子振幅推定を使用して、意思決定問題の目的関数 506 に関連する最小値または最大値を決定することができる。

図 4 は量子振幅推定システムを示すブロック図である。

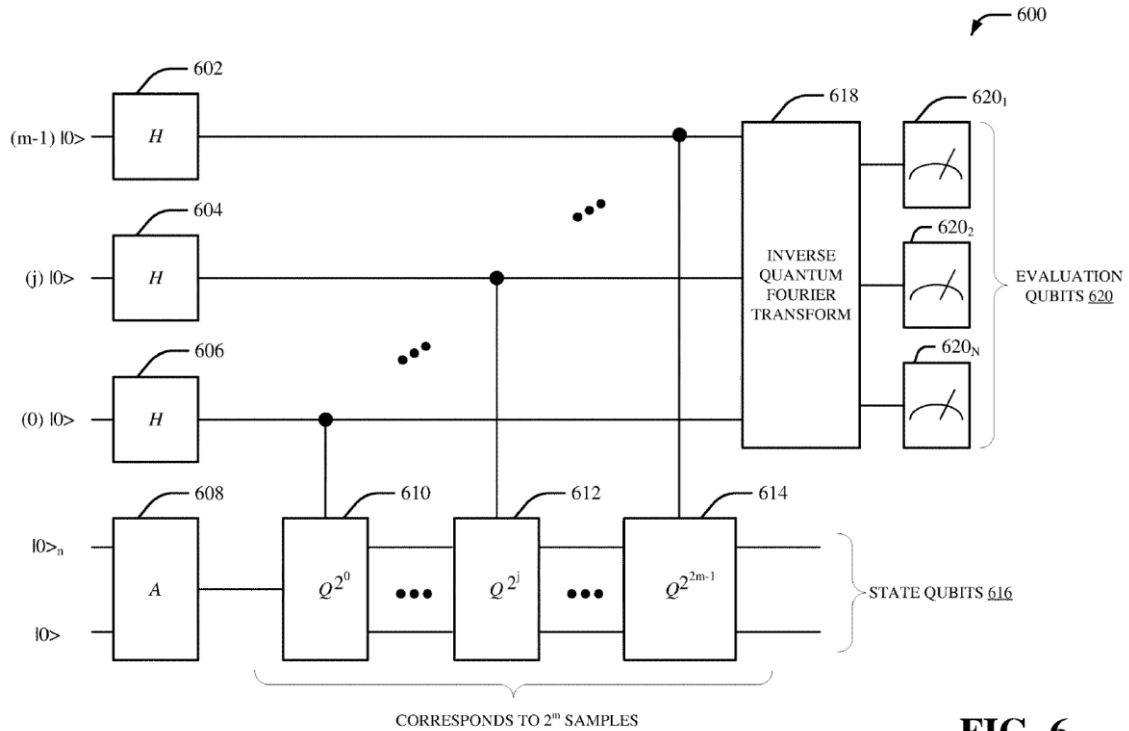


FIG. 6

システム 600 は、意思決定問題に関連する未知のパラメータを推定する量子振幅推定システムである。例えば、システム 600 は、量子振幅推定に関連する量子回路で表現できる。システム 600 は、ゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 を含む。例えば、ゲート 602 は、第 1 のアダマールゲートであり、ゲート 606 は、第 2 アダマールゲートであり、ゲート 606 は、第 3 アダマールゲートである。

システム 600 はまた、演算子 608 を含むことができる。演算子 608 は、量子サンプルに関連付けられた演算子である。例えば、演算子 608 は、量子サンプル (A) の演算子 A である。演算子 608 は、1 つまたは複数の変換に関連付けることができる。演算子 608 は、 $2m$ のサンプルを提供することができ、ここで、 m は整数である。

例えば、演算子 608 は、サンプル 610、サンプル 612、およびサンプル 614 を提供する。一態様では、 $2m$ サンプル (例えば、サンプル 610、サンプル 612、および/またはサンプル 614) は、状態量子ビット 616 を提供することができる。

状態量子ビット 616 は、例えば、量子ビットのセットによって表される量子ビット状態値を表すことができる。一例では、状態量子ビット 616 は、ゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 の状態に関連する x 成分測定、 y 成分測定、および z 成分測定に関連

する情報を含む。

ゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 の値は、逆量子フーリエ変換 618 で処理される。例えば、逆量子フーリエ変換 618 は、ゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 の測定値を提供するために、ゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 に適用される。

逆量子フーリエ変換 618 をゲート 602、ゲート 604、およびゲート 606 に適用して、キュービット測定 620 1、キュービット測定 620 2、およびキュービット測定 620 N を含む評価キュービット 620 を提供する。ここで、Nは、整数である。例えば、量子ビット測定 620 1 は、第 1 の量子ビット測定を表すことができ、量子ビット測定 620 2 は、第 2 の量子ビット測定を表すことができ、量子ビット測定 620 N は、N 番目の量子ビット測定を表すことができる。

3.クレーム

276 特許のクレーム 1-9 は以下の通りである。

1. システムにおいて、

意思決定問題に関連する確率分布に基づいて量子振幅推定プロセスを実行する量子プロセッサを備え、該量子プロセッサは、量子振幅推定プロセスに基づいて意思決定問題をシミュレートするシミュレータを含む。

2. クレーム 1 のシステムにおいて、

シミュレータは、意思決定問題に関連する意思決定変数のタイプに基づく古典的な最適化プロセスを使用して、意思決定問題をシミュレートする。

3. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、意思決定問題が連続的な意思決定変数に関連付けられているという決定に応答して、古典的な最適化プロセスを使用して意思決定問題をシミュレートする。

4. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、意思決定問題が整数の決定変数に関連付けられているという決定に応答して、組み合わせ最適化のための古典的な処理技術を使用して意思決定問題をシミュレートする。

5. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、意思決定問題が離散決定変数に関連付けられているという決定に応答して、ハイブリッド量子/古典的変分プロセスお

よび古典的最適化プロセスを使用して意思決定問題をシミュレートする。

6. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、意思決定問題が離散決定変数に関連付けられているという決定に応答して、変分量子固有ソルバーと古典的な最適化プロセスを使用して意思決定問題をシミュレートする。

7. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、古典的な最適化プロセスを使用して意思決定問題をシミュレートし、量子振幅推定プロセスに 1 つまたは複数のパラメータを提供する。

8. クレーム 1 のシステムにおいて、シミュレータは、意思決定問題に関連する連続決定変数を、量子プロセッサのそれぞれの量子状態にマッピングする。

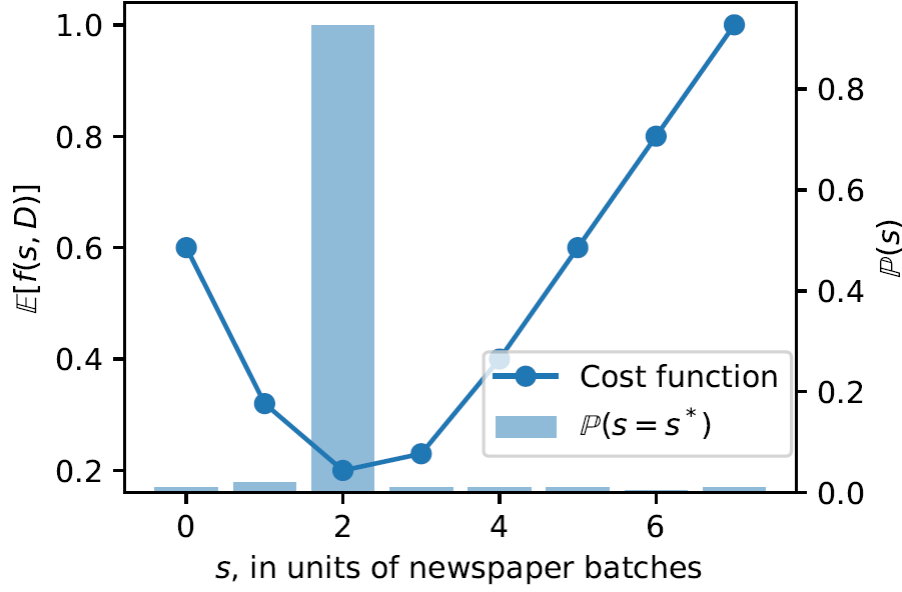
9. クレーム 1 のシステムにおいて、量子振幅推定プロセスのパラメータ化された演算子を構築する古典的なオプティマイザを更に備える。

4. 本特許に関する論文

本特許に関連する論文¹「Quantum-Enhanced Simulation-Based Optimization」が Julien Gacon 氏らにより発表されている。

本論文では、量子振幅推定を用いてニュースベンダー問題を最適化している。

¹Julien Gacon, Christa Zoufal, Stefan Woerner 著 “Quantum-Enhanced Simulation-Based Optimization” arXiv:2005.10780v1 [quant-ph] 21 May 2020



上記図は、量子振幅推定を使用して評価されたニュースベンダーの目的関数を示す。ニュースベンダーの問題では、ニュースベンダーは、取得する新聞のバッチの最適な量を探す。これにより、不確実な顧客の需要が満たされ、1日の終わりに残されるコピーができるだけ少なくなる。

残りの新聞の費用は、超過費用と機会費用によるコピーの不足による未実現収入によって表される。購入するバッチの最適な量を見つける問題は、式1と式2で与えられる。
式1

$$s^* \in \operatorname{argmin}_{s \in \mathbb{N}_0} \mathbb{E}[f(s, D)],$$

式2

$$f(s, d) = \begin{cases} f_{\text{opp}}(s, d) = (d - s)(p_{\text{sell}} - p_{\text{buy}}) & \text{if } d \geq s \\ f_{\text{over}}(s, d) = (s - d)p_{\text{buy}} & \text{if } d < s \end{cases}$$

ここで、 D は不確実な需要を表す確率変数を示し、新聞の各バッチは価格 P_{buy} で購入され、 P_{sell} で販売される。区分的線形関数 f の評価は、比較演算子を使用して実現できる。ニュースベンダーのコスト関数を計算するために、 f を条件付き加算として再定式化する。

$$f(s, d) = f_{\text{over}}(s, d) + \delta(d \geq s)(f_{\text{opp}} - f_{\text{over}})(s, d),$$

最初のステップでは、値 f_{over} が目的のキュービットの振幅に回転する。次に、比較演算を使用して、 δ を補助比較キュービットに評価する。最後に、第 2 項の $f_{\text{opp}} \cdot f_{\text{over}}$ が、比較量子ビットの制御された演算として量子ビットの振幅に追加される。

本例では、需要は正規分布 $D \sim N(2,1)$ でモデル化され、 $n=3$ キュービットで表され、 $\Omega D = [0,7]$ に切り捨てられる。決定変数 s は、 $k=3$ キュービットにエンコードされ、本論文の図 3 に示されている試行状態を 2 回繰り返して使用してパラメータ化される。

区分的線形目的で比較するために 1 つの追加の補助量子ビットが必要なため、 A は合計 8 つの量子ビットに作用する。購入価格と販売価格は、新聞のバッチごとにそれぞれ 0.2 と 0.5 となる。

下記式は、ニュースベンダー問題の目的関数と、確率密度関数として解釈される最適化の結果状態を示している。

$$\mathbb{P}[s = s^*] = |\langle \hat{s} | s(\theta^*) \rangle|^2$$

上記図に示すように、コスト関数は、サンプリング確率がほぼ 1 で最も高いストックサイズである $s=2$ のストックサイズで最小であることがわかる。このように、最適化ルーチンは最適なソリューションを正常に識別している。一般に、解 $|s(\theta^*)\rangle$ は可能な解 s の重ね合わせ状態にある。最適化中、確率分布 $P[s = s^*]$ のピークは、最適なストック値で顕著になる。

その他、本論文ではニュースベンダー問題に加えて、資産のポートフォリオ最適化に関するシミュレーションも示されている。

以上

著者紹介

河野英仁

河野特許事務所、所長弁理士。立命館大学情報システム学博士前期課程修了、米国フランクリンピアースローセンター知的財産権法修士修了、中国清華大学法学院知的財産夏季セミナー修了、MIT(マサチューセッツ工科大学)コンピュータ科学・AI 研究所 AI コース修了。

AI 特許コンサルティング、医療 AI 特許コンサルティングの他、米国・中国特許の権利化・侵害訴訟を専門としている。著書に「世界のソフトウェア特許(共著)」、「FinTech

特許入門」、「[AI/IoT 特許入門 2.0](#)」、「[ブロックチェーン 3.0\(共著\)](#)」がある。