

01

量子コンピュータを用いた処方生成アルゴリズムの開発

～HSPを基にした組合せ最適化による自動処方生成技術のクレンジングオイル処方への応用～

帯金 駿*1 / 吉川 健太郎*1 / 笹木 亮*1 / 中村 理恵*1

1. はじめに

近年、量子コンピュータやGPU (Graphics Processing Unit) に代表される計算機の進歩により、大規模な計算が可能になり、様々な分野と情報工学が融合した新しい分野が生まれている。Materials Informatics (MI) やProcess Informatics (PI) に代表される人間の研究・開発プロセスと情報工学を掛け合わせた研究領域¹⁾²⁾は化粧品業界にも影響を与え始めており、今後一層注目を集める分野である。その事例となるのが、製品の品質や機能の評価プロセスを、統計モデルや機械学習モデルを用いてシミュレーションする取り組み^{3~5)}である。これらは実務者の開発過程を支援することを目的とするシステムであり、この先に広がる技術が、本研究の主題となる開発者の思考を模倣する自動処方生成技術となる。

化粧品の処方設計プロセスは単純に考えると、候補となる原料とその配合比を膨大な選択肢の中から選択し、1つの処方として組合せを評価することを目標品質に達するまで繰り返すことである。自動処方生成を実現するためにはこれらのすべてのプロセスを計算機上で表現することが必要とな

る。本研究では、処方の評価プロセスには、計算機との相性が良いHSP (Hansen Solubility Parameters)を採用し、処方開発のプロセスでは、組合せ最適化問題の考え方をを用いて定式化を行うことで、自動処方生成技術の開発を試みた。

自動処方生成技術の最大の課題の1つが、原料とその配合比の選択肢が膨大に存在することである。計算科学的に考えた際に、現実的な時間では扱えないような膨大な数となる。この課題を解決するために、本研究では、量子コンピュータと古典コンピュータによって処方の組合せ最適化問題を解くアルゴリズムを新たに開発した。このアルゴリズムは、化粧品開発者の作業の効率化のみならず、開発者が持つ経験やノウハウからは考えつかないような、全く新しい処方を生み出す可能性があることを確認している。

本論文では、初めに、HSPを目標品質のための評価値として用いた自動処方生成アルゴリズムの開発手法と、量子コンピュータを用いたアルゴリズムの高速化について紹介する。続いて、実際の化粧品処方へ適用例として、角栓の高い溶解機能を目指したクレンジングオイルの新たな処方開発の事例を紹介する。

2. 方法

2.1. HSP

HSP (Hansen Solubility Parameters)⁶⁾ は、Charles M. Hansenによって提唱された物質の溶解性を予測するためのパラメーターである。「Like dissolves like」という考えに基づき、分子間の相互作用が似ている2つの物質は互いに溶けやすいということを意味している。HSPは凝集エネルギー密度の平方根で表される物性値であり、3つのパラメーター(単位: MPa^{1/3}) から構成される。これらのパラメーターは、分子間の分散力によるエネルギー(δD)、双極子間力によるエネルギー(δP)、水素結合力によるエネルギー(δH)である。これら3つのパラメーターは3次元空間(ハンセン空間)のベクトルとして見ることができる。加えて、物質を混ぜ合わせた場合のHSPは、体積比率の単純な総和によって求められる。これらの性質は後に述べる量子コンピュータでの計算において、非常に便利な性質となる。

2.2. HSPを指標とした組合せ最適化問題への定式化

HSPを用いて、2つの物質の溶解性について、それぞれのHSPの値の近さ(距離)によって定義することで評価ができる。“溶解”は化粧品の基本的な機能の1つであり、溶かしたい対象物のHSPがわかれば、開発する化粧品が目標とする品

$$Ra = \sqrt{4(\hat{y}_{\delta D} - y_{\delta D})^2 + (\hat{y}_{\delta P} - y_{\delta P})^2 + (\hat{y}_{\delta H} - y_{\delta H})^2}$$

このHSPを用いた溶解性の評価の仕組み、すなわち、 Ra が最小になるようにすることは、計算科学において、汎用的な考えの1つであり、膨大な候補となる原料の組合せの中から目的のHSPの値に近い処方を見つける最適化の問題として設定できる。つまり、情報工学の分野のトピックである「組合せ最適化問題」という、様々な制約条件のもとで膨大な選択肢の中から目的の指標にとって最適な組合せを見つける問題として扱うことができる。

2.3. 古典コンピュータとのハイブリッドアルゴリズム

ここで、課題となるのが、化粧品処方においては、原料とその配合量の組合せは、候補となる原料の種類を増やしていくと容易に数千億といった膨大な数の選択肢が生まれることである。すべての選択肢を計算するためには、現実的な時間で解けない「組合せ爆発」と呼ばれる現象が起きてしまう。そのため、効率的な計算技術が求められる。本研究では、このような組合せ計算と相性の良い量子コンピュータを適用することによって、この問題を解決した。

量子コンピュータには、量子ゲート方式⁹⁾と量子アニーリング方式^{10) 11)}の代表的な2タイプの方式が存在する。本研究では、組合せ最適化問題

これ以降の閲覧を希望の場合は、本誌をご購読ください。