

量子アニーリングによる組合せ最適化

大関 真之

量子アニーリングは、組合せ最適化問題を解く汎用的解法として提案された。その背景には量子力学によるダイナミクスを活用しているため、その実現には量子力学に基づくデバイスを利用する必要がある。量子コンピュータの開発が急速に進むなか、一つの実験的到達点として D-Wave Systems 社が実装に成功して世間を賑わせた。本稿では、組合せ最適化問題を、どのようにして量子アニーリングで実行するのか、その流れを概説しながら D-Wave Systems 社のマシンを始めとする量子アニーリングの研究の展望について紹介する。

キーワード：組合せ最適化、量子アニーリング、スピングラス、機械学習

1. はじめに

「彼方立てれば此方が立たぬ」

競合する複数の要素がある場合に、最善の選択が行えない状態を指す言葉である。組合せ最適化問題の難しさを端的に表す非常によい表現である。この状況を数式に示してみることにしよう。喩え話として次のような状況を考えてみよう。あるグループで旅行の計画をしながら、そのグループの中で誰が行くのか、希望者を募ったとする。ある人物 i が旅行に行くのかどうかを示す二値変数 $\sigma_i = \pm 1$ を用意する。行くこととした場合には $\sigma_i = 1$ として、行かないことにした場合には $\sigma_i = -1$ とする。各個人が独立して意思をもち考えている場合には、それぞれの考えの傾向を示す h_i により σ_i がどのような値を取るかが調整されるモデルを作ることを考えよう。ここで次のようなコスト関数を考える。

$$E(\sigma) = - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \quad (1)$$

ここで $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ であり N は人数とする。このコスト関数はそれぞれの個人が自分の意思に従って二値変数 σ_i を変化させる様子を表している。各個人の意思を表す h_i が正の値を取るとき、 σ_i も $+1$ を取れば、コスト関数が減少する。そこでコスト関数の最小化問題を考えれば、 h_i の符号に合わせて、 σ_i が決まる。

さてここに互いの影響を考慮することとしよう。つまり人間関係である。本来であれば旅行に行きたい

($h_i > 0$) ののだが、彼が行くのであれば遠慮しておく。彼女が行くのであれば一緒に行きたい。さまざまな思いが交錯する状況だ。その互いの影響を示すパラメータとして結合定数 J_{ij} を導入して、コスト関数に組み入れる。

$$E(\sigma) = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \quad (2)$$

ここで J_{ij} が正の値を取るとき、コスト関数を減少させるには $\sigma_i \sigma_j > 0$ となるほうが好ましい。 σ_i と σ_j が同符号になるということだから、 i 君が行くのであれば、 j 君も行こうと考えるようになる。逆に i 君が行かないのであれば、 j 君も行かないという判断が変わるということを示している。それでは J_{ij} が負の値をもつとどうだろうか。 $\sigma_i \sigma_j < 0$ であるから σ_i と σ_j が異符号を取ることだ。 i 君が行くならば j 君は行かないし、 i 君が行かないならば j 君は行くという傾向を示している。

この単純なコスト関数の最小化を考えるだけで、多彩なドラマを描くことができる。上記の例であれば、人間関係を考慮に入れたうえで、できるだけ各個人の意思を尊重しながら旅行に同行するか否かの決定をする問題と言える。直感的にこの最適化問題が非常にややこしいことは理解していただけるだろう。特に難しい部分は、 J_{ij} の存在により生じた競合状態である。ごくごく単純な状況を考えてみよう。 $N = 3$ 人の状況で J_{ij} がそれぞれの間で、 $J_{12} > 0$ 、 $J_{23} > 0$ 、そして $J_{31} < 0$ という場合を考える。単純のため $h_i = 0$ としよう。図 1 に示すように、実は三つ巴の状況となることがわかる。1 君が行くと答えば、2 君も同様にいくと答えるだろう。3 君も 2 君に追従して行くと答える。しかし 3 君と 1 君の間には確執があったのだろうか、絶対に同行したくないというわけだ。そうすると

おおぜき まさゆき
 東北大学大学院情報科学研究科 量子アニーリング研究開発センター
 〒 980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3-09

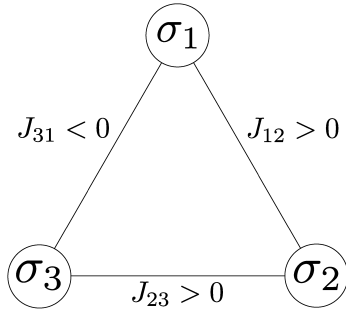


図1 競合状態が発生する状況

1君は引き下がるかもしれない。そうなると2君と行くという願望を叶えることができない。こういった競合状態がしばしば発生する。

2. 社会に有用な問題

コスト関数の最小化問題を考えるというのだから、最適化問題の一種であり、特に扱う変数が離散的なものであるから、組合せ最適化問題に分類される。上記の人間関係を考慮する組合せ最適化問題も十分に役立つものであるが、ここでコスト関数 $E(\sigma)$ を社会に有用な問題に対応づけることを考えてみよう。

2.1 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題は、よく知られた組合せ最適化問題の代表例であろう。名前のとおり、訪問すべき地点が用意されて、それらの地点を一度訪問して、引き返すことなく最短経路で結ぶという問題だ。始点と終点は同じものとして閉路を作ることを考える。始点終点を除いて訪れる場所が N 個ある場合とする。点には添え字 μ などギリシャ文字を割り当てる。点同士を結ぶ辺には距離などに対応するコスト $J_{\mu,\nu}$ が割り当てられている。つまり辺は道を表すと考えよう。また引き返すことがないようにという条件を反映させるため、時間という概念を用意する。こうすることで、ある時刻 t に点 μ にいるという形式で移動の様子を表現することができる。簡単のため時刻 t によりコストが変動しない場合を考える。移動のコスト C についてまず考えると、

$$D(\mathbf{q}) = \sum_{t=1}^{N-1} \sum_{\mu=1}^N J_{\mu,\nu} q_{\mu,t} q_{\nu,t+1} + \sum_{\nu=1}^N J_{0,\nu} q_{\nu,1} + \sum_{\mu=1}^N J_{\mu,0} q_{\mu,N} \quad (3)$$

とすれば選んだ経路にかかったコストの総和を計算することができる。第二項と第三項は始点と始点に戻る際に

かかるコストである。ここで便利のために $q_{\mu,t} = 0, 1$ という二値変数を用いている。先ほどのような二値変数 $\sigma_{\mu,t} = \pm 1$ との対応関係は、

$$q_{\mu,t} = \frac{1}{2}(1 + \sigma_{\mu,t}) \quad (4)$$

である。同じ点を訪問してはいけないので、全時刻を見渡してもある点には一度きり訪問するように制約条件をかける必要がある。

$$\sum_{t=1}^N q_{\mu,t} = 1 \quad (\mu = 1, 2, \dots, M) \quad (5)$$

また全時刻にわたり一つの点のみを訪問しているように制約条件を課す。

$$\sum_{\mu=1}^N q_{\mu,t} = 1 \quad (t = 1, 2, \dots, T) \quad (6)$$

ただしこれらの制約条件を先ほどの例と同じように記述することはできない。そこで罰金法を用いて、等式制約条件を取り込む。

$$E(\sigma) = D(\mathbf{q}) + \frac{\lambda_1}{2} \sum_{\mu=1}^N \left(\sum_{t=1}^N q_{\mu,t} - 1 \right)^2 + \frac{\lambda_2}{2} \sum_{t=1}^N \left(\sum_{\mu=1}^N q_{\mu,t} - 1 \right)^2 \quad (7)$$

このようにすれば $q_{\mu,t}$ の二次式で書くことができる。少し書き換えれば $\sigma_{\mu,t}$ の二次式で書くこともできる。ただし等式制約条件を満たすように、罰金係数 λ_1 および λ_2 は、非常に大きな値を取ることが理論的には要求される。

2.2 交通量最適化問題

ほかにも2017年にフォルクスワーゲン社が、本稿の後半で述べられる量子アニーリング技術を用いて解いて見せた最適化問題も二値変数の二次式で書くことができる[1-3]。問題設定は複数の車 $\mu = 1, 2, \dots, M$ が用意されており、それぞれが目的地に向かってさまざまな経路を選択して走っている状況を考える。経路上にはさまざまな道路区間 s が含まれているとしよう。経路 i を選択したときに通る道路区間 s には1を、通らない場合には0を割り当てた $F_i(s)$ をあらかじめ用意する。この準備には通常のコンピュータ上で、ダイクストラ法などを用いて目的地に対する最短経路や目的に見合った経路を複数個用意しておく。そうやって用意した複数の経路からなる基本的な経路のセットを地図情報などから事前に用意しておき、その経路ごとに通る道路区間はどれなのかということを辿り、 $F_i(s)$

を設計する。次に道の混み具合を示すコスト関数を定義しよう。

$$C(\mathbf{q}) = \sum_s \left(\sum_{\mu} \sum_{i \in I_{\mu}} F_i(s) q_{\mu i} \right)^2 \quad (8)$$

ここで $\sum_i F_i(s) q_{\mu i}$ は、車 μ が経路 i を選択すれば $F_i(s)$ に従って、経路 i に沿って道路 s を通ったかどうかを示す関数が残るように設定されている。また i についての和が、車 μ ごとに事前に用意される経路 I_{μ} が異なることに注意したい。さらに車に関する和を取れば、ある道路 s に何台車が通ったかを示すようにできる。二次式にして台数が多ければ多いほどコストが大きくなるように設定する。これをすべての道路について和を取ることで、同じ道路に複数台車が存在すると大きなコストをもつような関数を設計することができる。ただしそれぞれの車は用意された経路の一つだけを取るという制約条件が働くため

$$\sum_{i \in I_{\mu}} q_{\mu, i} = 1 \quad (\mu = 1, 2, \dots, M) \quad (9)$$

を満たす必要がある。先ほどの巡回セールスマン問題の時と同様に罰金法を利用することで、

$$E(\sigma) = C(\mathbf{q}) + \frac{\lambda_3}{2} \sum_{\mu} \left(\sum_{i \in I_{\mu}} q_{\mu, i} - 1 \right)^2 \quad (10)$$

として再び $q_{\mu, i}$ ないしは $\sigma_{\mu, i}$ の二次関数でコスト関数を書き下すことができる。先ほどの例と同様に罰金係数 λ_3 は、非常に大きな値を取ることが要求される。ここまでくると雰囲気がわかってくるだろう。最適化したいコスト関数に制約条件がかかり、これらが競合することで最適化が難しくなっている。これらの例に代表されるような最適化問題をできるだけ簡単に解きたい、それが目標となる。

3. シミュレーテッド・アニーリング

ただか σ_i についての二次項までのコスト関数の最小化問題であっても、競合状態を含むために容易には最小解を得ることができないものとなる。この最も単純で魅力的な構造をもつコスト関数は、物理学の統計力学と呼ばれる多数の要素が複雑に絡み合う諸問題を扱う方法論の研究対象として登場した。元々は J_{ij} や h_i が添え字 i と j によらずに一様なものの場合について研究が始まった。イジング模型と呼ばれる磁性体の振る舞いを記述する数理的な模型である。そこで二値変数 σ_i は電子の磁気モーメントの向きを示す微視的変

数として利用される。子供の頃に遊んだ磁石は、この微視的変数の集合体として理解される。上記のコスト関数を物理学に通じる人間は特にエネルギーと呼ぶので、今後関連する分野とお付き合いするときに参考にしてもらいたい。合金の一部では、混ざり物の効果により J_{ij} に不均一性をもつものが存在して、先ほどの事例に挙げた競合状態が磁気モーメントの間で生じることを主要な理由として、集団としての振る舞いが通常の磁石とは異なる極めて非自明なものとなることがあり、それを特にスピングラスと呼ぶ。そのような経緯から、上記で用意されたコスト関数は、統計力学の分野でスピングラス模型と呼ばれる。

このコスト関数の最小化問題を再び考えてみよう。一つひとつ端から決めていくような方法では、先ほどの競合状態をもつのでうまく決めることができなくなる。そこでヒューリスティックな手法としてシミュレーテッド・アニーリング（焼きなまし法）が提案された。微視的変数として考察されるような非常に小さい対象物は温度 T により決まる強さで乱雑な変動をすることが知られている。熱揺らぎと呼ばれる。よく知られた例が、水面上に浮いた花粉の動きから発見されたブラウン運動である。花粉ほどの微小な粒子は、水面上にある水分子の熱揺らぎに伴う振動を受けて、ランダムに動く。その熱揺らぎによる影響により、微視的変数は確率変数として振舞うことになり、もはやコスト関数は確定的な値とならない。微視的変数が従う確率分布関数は、ギブスボルツマン分布と呼ばれ、以下の形をとる。

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{E(\sigma)}{T} \right) \quad (11)$$

ここで T は熱揺らぎの程度を決めるパラメータとなる温度である。また Z は規格化定数であり、分配関数と呼ばれる。温度が 0 となる極限 ($T \rightarrow 0$) では、エネルギーが最も低い状態でピークをもつような分布関数となり、温度が非常に高い極限 ($T \rightarrow \infty$) では一様分布となり、さまざまなエネルギーをもつ状態が出現することがわかる。この熱揺らぎによる変動をマルコフ過程でシミュレーションをしながら、温度を下げていくことにより、エネルギーが最も低い状態が高確率で実現することを利用して、コスト関数の最小化を行う方法が前述したシミュレーテッド・アニーリングだ。Geman らは有限次元のマルコフ連鎖において十分にゆっくりと温度を変化させた場合には、必ずエネルギーの最も低い状態に到達することを示した [4]。その条件

は温度を

$$T(t) = \frac{c}{\log(t+1)} \quad (12)$$

というスケジュールで減少させていくというものである。実際には、最悪評価であるためコスト関数によっては、もっと早く温度を下げて構わない。

さてシミュレーテッド・アニーリングを実行して最適化問題を解くということを実際に考えてみよう。ここでシミュレーテッド・アニーリングを知っている読者は、頭の中でコンピュータを思い描いて、ある人はプログラムを組み始めているかもしれない。申し訳ないが、それは前時代的な発想であるということ指摘したい。逆に知らない読者も、文字どおり読めば、これまでの研究があるのだから、それをなぞってマルコフ連鎖を利用すればよいのだな、マルコフ連鎖は確率的なダイナミクスを記述するものだからコンピュータ上で乱数によるシミュレーションを行えばよいのではないかと考えたかもしれない。

本稿では、そういった発想法から脱却した新たなパラダイムが形成されつつあるということを指摘したい。おそらくそれは最適化問題を解くという計算を実行するということと、物理的過程を実行するということの距離感の問題である。計算を実行するためには、その計算を行うための手続きとしてのアルゴリズムが存在して、それを実現するための指令としてプログラムが存在する。しかしそのアルゴリズムどおりに動作するものが物理的実体として存在しているのであれば、プログラムをする必要はない。物理的実体が動作するのは、自然法則に基づいた運動を行うためである。たとえばものが落ちるのはニュートンの運動方程式に従って動作しているからだ。このような自然界にあるようなルールは、自然界に埋め込まれたプログラムと言える。複雑なスピングラス模型で記述されるような組合せ最適化問題を自然界に施されたプログラムをそのまま転用することを考えてはどうだろうか。

そもそもシミュレーテッド・アニーリングは、自然の法則に従うと微視的変数は確率分布に従うという事実から考案された方法である。微視的変数のエネルギーがコスト関数どおりに設計できるのであれば、自然に任せておきながら、実際の温度を低くすることで実行することができる。そうすれば自動的に最適解を得ることができる。ここで問題は、微視的変数のエネルギーを自由自在に、解きたい最適化問題に対応させて設定できるかどうか、である。それができるようになったのが現代なのだ。プログラムの必要がなく、最適化問

題を自動的に解くことができる。自然の力に任せて難しい問題の解決を迎える。このようなパラダイムを形成するきっかけと与えたのが、量子アニーリングであり、それを実現した D-Wave Systems 社のメンバーの貢献である。

4. 量子アニーリング

量子アニーリングとは、その名のとおりに、量子力学を利用した計算手法である。耳学問程度であっても量子力学を聞きかじったことのある読者は、重ね合わせの状態についてご存知かもしれない。組合せ最適化問題を解く場合には、「彼方立てれば此方が立たぬ」の原則に従い、どこを上向き、下向きにしたらよいか、さまざまな可能性を考慮しなければならない。しかし量子力学の原理に従い、その重ね合わせの原理を利用することができればどうだろう。どちらの向きが適切であるか、うまく検討してくれるのではないだろうか。そういった期待をすることができる。

4.1 重ね合わせの状態

ここで量子アニーリングでは、解きたい最適化問題に対して、重ね合わせの状態を生み出す量子揺らぎを印加する。そのために以下のような手続きを経る。まずスピングラス模型が有する二値変数 $\sigma_i = \pm 1$ をある行列の対角成分と対応づける。ある行列というのは Pauli 行列

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\hat{\sigma}_i^y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$\hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

のセットのうち、 z 成分と呼ばれる $\hat{\sigma}_i^z$ と対応させる。これまでスカラーであると思込んでいた座標や運動量を始め、物理量が行列の対角成分の値となるところが量子力学の出発点である。われわれの常識を一つひとつひっくり返すのが量子力学の、小気味悪さに繋がるかもしれないが、そこが本質的であり面白いところだ。さて行列は対角成分以外にも非対角成分をもちうる。この非対角成分が、量子アニーリングで重要となる、量子揺らぎを生み出す。たとえば $|0\rangle = (1, 0)^T$ と $|1\rangle = (0, 1)^T$ は $\hat{\sigma}_i^z$ の固有ベクトルとなるが、 σ_i^x をかけると $|0\rangle$ から $|1\rangle$ 、逆も然りといったように反転する

ことがわかる。この $\hat{\sigma}_i^x$ の反転させるような作用は、非対角成分をもっているために生じるものである。しかしこれだけの説明だと、二値変数を次々と反転させていくようなイメージをもつかもされないがそうではない。量子力学では、これらの物理量に関連する行列の固有ベクトルが意味をもつ。Pauli 行列の x 成分の固有ベクトルは、 $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ と二つの異なる状態の線形結合となり、重ね合わせの状態をとる。二つの状態のどちらでもあり、どちらでもない状態を作ることができる。

4.2 量子アニーリングと最適化問題

シミュレーテッド・アニーリングの際には、エネルギーに注目して、その最小化を通して最適化問題への適用を目指した。量子力学を利用した量子アニーリングでも同様に、エネルギーに相当するハミルトニアンと呼ばれる次の行列に注目する。

$$\hat{H} = E(\hat{\sigma}^z) - \Gamma \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \quad (16)$$

第一項が解きたい最適化問題に相当するエネルギーである。ところが二値変数の部分は、Pauli 行列の z 成分で置き換えている。第二項は横磁場と呼ばれる項で、重ね合わせの状態を作り上げる作用をする。量子力学では、物理量に対応する行列を構築して、その対角化を通して実際に観測される物理量の予言を行う。エネルギーについて調べる場合には、それに対応したハミルトニアンを構成する。そしてその対角化をすることで、固有値によりどのようなエネルギーをとるか、固有ベクトルにより、そのエネルギーをもつ状態はどのような重ね合わせの状態が存在しているかを知ることができる。その固有ベクトルで展開することにより得られる係数を確率振幅と呼び、実際に観測される状態の確率と関係づけられる。われわれは量子力学のスキームを通して、観測結果がばらつくこと、そのばらつきが確率分布に従うことまでを予言することができる。実際に観測機器を用意して、エネルギーを計測すると、結果はばらつく。それらの期待値などを確率分布を利用して予言することができる。これまでのところ、量子力学を適切に利用した場合に得られる結果と矛盾した例はない。

一般にハミルトニアンを対角化することは非自明な問題である。しかし横磁場が非常に強く、 $\Gamma \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x$ が支配的な場合について考えてみよう。この行列の最大固有値に属する固有ベクトルは、

$$\otimes_{i=1}^N |+\rangle_i = \otimes_{i=1}^N \frac{|0\rangle_i + |1\rangle_i}{\sqrt{2}} \quad (17)$$

であることから、横磁場が支配的な場合にエネルギーの最小値を取るのは変数ごとに二つのベクトルの線形結合、重ね合わせの状態となることがわかる。これが量子アニーリングの出発点である。量子アニーリングでは重ね合わせの状態を非常に強い横磁場をかけて準備する。その後でゆっくりと横磁場の値を弱めていくことにより、次第にスピングラス模型のエネルギー部分の寄与を大きくしていく。ここで重要となるのが量子断熱時間発展という概念である。エネルギーの最小を取る状態から出発して、非常にゆっくりと時間発展させていくと、常にエネルギーの最小を取る状態にとどまることが可能となる。これを利用すると、横磁場の非常に強い状態から、次第に弱めていくと最終的にスピングラス模型の非自明なエネルギーの最小状態へと到達させることができる。これが量子アニーリングの基本的発想である。そのため断熱量子計算 (Adiabatic Quantum Computing) とも呼ばれる [5]。量子アニーリングの提案当初は、シミュレーテッド・アニーリングのアナロジーからの発想であった。そのため量子断熱時間発展との関係性については、後になって対応づけられた。帰結として最小エネルギーと一つその上のエネルギーとの差であるエネルギーギャップという特徴的な量と、量子断熱時間発展が実現するための操作時間との関係が発見されて、量子アニーリングによって最適化問題を解く際に必要となる計算量の見積もりを可能にした [6]。

実際に量子アニーリングを行うためには、量子力学の原理に従うような微小なスケールのデバイスを設計する必要がある。またそういった装置として実現した場合に、逃れることのできないものが環境との相互作用である。大きな影響を与えるのが熱的な影響であり、熱揺らぎに再び晒される。微視的変数がギブスボルツマン分布に従うことを考慮しなければならない。量子力学に従う微視的変数に対して、ギブスボルツマン分布についてもその形式を改める必要がある。確率分布の代わりに次の密度行列を扱う。

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{E(\hat{\sigma}^z)}{T} + \frac{\Gamma}{T} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \right) \quad (18)$$

確率分布も引数を指定すればただのスカラールであったところが、同様に行列に置き換わるのだ。ここで $\Gamma \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x$ は横磁場と呼ぶ。ギブスボルツマン分布は、量子力学の手続きを経る前は、温度が低いとき ($T \rightarrow 0$) はエネルギーの数値が低いものが登場しやすいという傾向を示している。エネルギーの数値が低いものが登

場するのは指数の肩部分の値が大きいものが確率の数値が大きいためだ。同様に量子力学の手続きを経た後は、温度が低いときは指数の肩部分の「固有値が大きい」ものが登場しやすいという傾向をもつ。

そのため温度を極低温の環境にすることができれば、エネルギーの小さな状態が出てくる傾向は強くなるが、実際にはある程度の温度の効果が残ってしまう。

4.3 D-Wave Systems 社の成し遂げたこと

量子アニーリングの原理は先ほど述べたとおりだ。これを用いることによりスピングラス模型の非自明なエネルギーの最小な状態を得ることができるのではないか。そうすれば組合せ最適化問題を解くことができるのではないか。そういった発想に繋がる。量子アニーリングを実際に搭載したマシンを作ることで、量子力学を利用した最適化問題を解く専用のマシンを作ることができる。

D-Wave Systems 社は、2011 年に D-Wave マシンと総称される世界初の商用“量子コンピュータ”を販売開始した。彼らは超伝導量子ビットを利用することで二つの状態を取る微視的な変数を実現して、見事にスピングラス模型を人工的に作り出したのだ。おそらく“量子コンピュータ”を作り出したという側面ばかりに焦点が当てられて、本当に重要な部分が見過ごされている。やや本論とはそれるが、超伝導体によるコイルを形成すると、そのコイルの穴を貫通する磁束は離散的な値に制限される。ここでコイルの形状を小さいものにして、自己インダクタンスを小さいものにする、磁束が二つの値を取るものに制限されるようになる。この二つの状態を上向きと下向きの二つの方向だけを向く $\sigma_i = \pm 1$ に対応させることで、スピングラス模型の σ_i を準備することができる。これを超伝導量子ビットと呼ぶ。量子と呼ばれるのは、この超伝導コイル内に生じる磁束が、離散的な値を取り、重ね合わせの原理に代表される量子力学のルールに従うものであるためだ。電気回路であるから電磁誘導を介して、複数のコイルの磁束同士で相互作用を発生させることが可能だ。特にコイルに生じるエネルギーは電磁気学の基本的な知識からも理解できるように $E = LI^2/2$ であり、電流 I がコイル内の磁束に比例することから、2 次関数で構築可能な範囲であれば、コイルの形状や組み方によりコイルの自己インダクタンス L を変更しながら、比較的自由にエネルギーを設定することができる。この超伝導体によるコイルの特性が、見事にスピングラス模型を人工的に作り出すための条件に合致したのだ。コイルの設計による離散的な二値変数の実現、そ

して複数のコイルを組むことで、離散変数の二次項までで記述される相互作用の実現である。その結果、単純だが競合現象を含む豊富な舞台として、スピングラス模型を人工的に実現することに成功したのだ。これが D-Wave Systems 社が成し遂げたミラクルである。

それではこの人工スピングラス模型をある温度 T で放置しておけば、ギブスボルツマン分布を実現することができるはず。そのとおりだ。できるのだ。これが D-Wave Systems 社の設計した人工スピングラス模型による実験装置 D-Wave マシンの正体だ。さらに彼らは超伝導量子ビットによって二値の離散的な変数を実現したため、その振る舞いは単純なものではなく、重ね合わせの状態を作り出すことができる。この性質を利用して量子アニーリングの実装を目指したのだ。

4.4 量子アニーリングの実際

D-Wave マシンでは、超伝導コイルの形状とインダクタンスを調整することで重ね合わせの状態を実現している。その状態から次第に量子揺らぎを弱めていき、人工スピングラス模型へとコイルのパラメータを調整していく。計算のはじめは、どちらともつかない状態にあり、終盤に差しかかるにつれて、どの状態が適切であるかを判定してくれる。量子断熱時間発展に従い、次第に最適解の確率振幅が大きくなっていくのだ。D-Wave Systems 社が持ち前の超伝導技術で可能なアイデアはないのか、と探し求めていたところに MIT の Edward Farhi と Seth Lloyd から、この量子断熱時間発展を実装してみても？というアドバイスがあったようだ。そこから超伝導コイルの加工と組み立てを行い、大規模な量子ビットの配列を実現して、量子断熱時間発展なしに量子アニーリングを実現する実験装置を完成させた。

実際に動作させてみると 20 マイクロ秒ほど、体感では一瞬で、指定した最適化問題を解いてくれる。素晴らしい性能である。それでは、組合せ最適化問題を完璧に理論どおりに解くことができるのか？という現実状況そういった水準にはない。大きく分けて三つほど理由がある。

・相互作用の範囲が限定的

理想的には任意のペアの相互作用 J_{ij} を実現したいところであるが、超伝導コイルの回路設計の問題でキメラグラフと呼ばれる限定的な範囲で相互作用をするのみで、解きたい最適化問題を埋め込むために、一工夫をする必要がある。

・量子ビットのコヒーレンスタイムが短い

量子力学を生かせる時間が非常に短いために、素早い時間で動作させないと計算上好ましくないエラー

が生じる。いわば慌てて計算を終えているという状況だ。

・環境の影響が強い

量子断熱時間発展を実行するための条件として、周囲の環境の影響から独立している必要がある。現状ではその影響にさらされているため、計算途中で有限温度 T のギブスボルツマン分布が実現しているため、基底状態以外の比較的エネルギーの高い状態も生じる。

これらの問題点は量子アニーリングそのものではなく、実際に量子アニーリングを実行する D-Wave マシンが登場したことにより判明した諸問題である。

一番目の問題点は、組合せ最適化問題そのものが必要とする二値変数が少数であっても、問題を D-Wave マシンに載せるために余計な変数を導入する必要があるため、実効的に非常に巨大な最適化問題へ変貌してしまい、性能の著しい低下を招く。これは D-Wave マシンのアーキテクチャが変更されることに伴い、解決へと向かうだろう。最新の情報では次世代機は、まさにこのアーキテクチャに変更があり、動作確認のテスト段階に入っており、5640 量子ビットでより広範な組合せ最適化問題を乗せることができるようになってきている。超伝導量子ビットを用いた回路設計の指針にもつながるため、量子アニーリングに限らず超伝導量子ビットを利用したマシンを作る際に多大な影響を与える。二番目の問題点自身はさほど影響しない。実は量子アニーリングはもっと高速に行ってもよいとされている。非常にゆっくりとしたパラメータ調整を量子断熱時間発展では要求されるが、量子の世界での「ゆっくり」はわれわれの時間スケールに比べると「一瞬」に過ぎないためだ。とはいえエラーに耐性のある量子ビットを利用することで、理論どおりの動作を行うことができる意味では必要な改良の方向性である。三番目の問題点についてコメントしておこう。D-Wave マシンは量子アニーリングを実行しているとよく言われるが、実際には環境の効果が防げず、ギブスボルツマン分布に従い、比較的高いエネルギー状態も実現してしまうのだ。この克服には、環境からの影響を取り除く必要がある。これは量子アニーリングのみならず、量子コンピュータを作るうえで絶対に避けられない問題である。D-Wave Systems 社は、ある時期から組合せ最適化問題を解くマシンとして推すよりも、人工スピングラス模型のギブスボルツマン分布に従った多数の離散変数に関するサンプリングを利用した機械学習に利用価値があることを強くアピールするようになった。最近では

先の大統領選挙の投票動向の学習・予測に利用した例 [7] が登場するなど、なかなかうまく利用方法が提案されている。

4.5 量子コンピュータとしての立ち位置

量子コンピュータの特集であることから、量子アニーリング、そして D-Wave マシンの量子コンピュータとの関係について述べておこう。極めて慎重に物言いをすれば、D-Wave マシンは、人工スピングラス模型を実装した装置であり、さらに量子アニーリングが想定するような量子揺らぎの導入が可能であるため、スピングラス模型に量子揺らぎを印加した際の振る舞いを観察することのできる量子シミュレーションマシンである。量子アニーリングの立ち位置に迫るために、最適化問題を解くための方法という側面ではなく、純粋に量子力学の問題としての側面について少し触れることにしよう。量子アニーリングを利用するという立場であれば、ここまでで十分かもしれないが、もう少しお付き合いいただきたい。

量子力学の要点を述べると、量子力学を考察するうえで行列の計算を不可欠とする。行列というと素朴な計算を行う対象と考える向きもあるかもしれないが、問題の規模が巨大なものとなれば扱う行列もそれに伴い大規模なものとなる。たとえば N 個の二値変数の問題を量子力学の問題へと昇格させると $2^N \times 2^N$ の超巨大行列を扱う問題となるのだ。

ただし扱うスピングラス模型の構造が比較的単純であったり、よい性質をもっている場合には計算が縮約できて、実質的な次元が格段に落ちることもある。これまではそうやってうまく扱い方を見つけて、なんとか量子力学の問題を取り扱ってきた。しかしながらそういったうまく方法で量子力学が関係する問題をほとんどやり尽くしたところに、D-Wave マシンが登場したというわけだ。いわば $2^N \times 2^N$ の超巨大行列に関係する一部の問題を、実験的に検証することのできる舞台が整ったというわけだ。

また量子力学では最終結果が確率的な現象として発現することから、マルコフ連鎖モンテカルロ法など確率的な手法を援用した解析を展開することが可能である。実際に D-Wave マシンの登場以前から量子アニーリングの性質を調べる際にスピングラス模型に量子揺らぎを印加した際の影響を調べるために、量子モンテカルロ法と呼ばれる確率的な手法が用いられてきた。つまり量子アニーリングを模擬するようなシミュレーション方法が存在するということだ。ただしこれは D-Wave マシンで行われていることが、古典的なコンピュータ

ですべてシミュレーションが可能というわけではない。D-Wave マシンは環境との相互作用が存在するために熱的な影響を完全に封じることができない。そのため有限温度のギブスボルツマン分布に従う。量子モンテカルロ法は、非常に低い温度でのシミュレーションを可能にするが、ある程度の温度における影響を扱うことは効率的に行うことができない。そのため D-Wave マシンの本当の振る舞いを古典的なコンピュータで模擬するのは困難である。この性質を受けて、D-Wave マシンから出力されるさまざまな出力結果を利用したサンプリングは、量子力学を利用した非自明な効果を効率的に取り出すことのできる量子超越性を示す一例として挙げる向きもある [8]。実際にギブスボルツマン分布に従うスピングラス模型の様子を高速にサンプリングすることができることを受けて、ボルツマン機械学習を始め、確率分布や複雑な関数を近似的に表現をするといった活用方法が提案されている。

さらに現在のところ D-Wave マシンが実装しているのは、横磁場による量子揺らぎであるが、この横磁場以外の量子揺らぎを導入しようとする動きがある。非常に低温における「横磁場」による量子揺らぎの影響は、量子モンテカルロ法で模擬することが可能である。そのような問題設定を擬似古典確率的な系と呼ぶ。量子力学に従う問題設定をうまく確率的なシミュレーションを行うことができるという意味をもつ。しかし「横磁場以外」の量子揺らぎについては、必ずしも量子モンテカルロ法でうまくシミュレーションを行うことができない。そのような問題設定を非擬似古典確率的な系と呼ぶ。この古典的なコンピュータでは素朴に真似することのできない、非擬似古典確率的な領域に攻め入るためには、横磁場以外の量子揺らぎを用いた実験を行う必要がある。そうした研究の動向から、D-Wave マシンを始め量子アニーリングを実装するマシンには、横磁場以外の量子揺らぎを導入できるようにしようという動きが見られる。つまり古典的なコンピュータが真似することのできない未踏領域に D-Wave マシンを筆頭に、量子アニーリングを実装したマシンは踏み出そうとしているのだ。そういった意味で、量子アニーリングは、古典的なコンピュータの真似できない量子力学独特の振る舞いや現象を調べる方法論としての位置づけも有している。

また量子コンピュータとして長年研究されてきた、一つひとつの量子ビットに所望の操作を順次施すやり方は、量子アニーリングで多項式時間程度のオーバーヘッドで同じものを再現することができる。そのため

には、やはり横磁場以外の量子揺らぎが必要となり、非擬似古典確率的な系への挑戦が必要となる。非常にわかりやすい形で、これまでの古典的なコンピュータでできること、できないことが区別されている。

そのうえで言うと、現状の D-Wave マシンは量子コンピュータと呼ぶか、というとやや弱い意味合いをもっている。ただし近いうちに非擬似古典確率的な系への挑戦を通して、古典的なコンピュータと量子コンピュータの間に立ちはだかる壁を打ち破るだろう。実際に 2017 年の量子アニーリングに関する国際会議では、複数の研究グループから非擬似古典確率的な系における量子アニーリングを実装する新しいアーキテクチャが紹介された。

さらにごく最近、本特集記事でも筆を執った藤井啓祐氏から、擬似古典確率的な系であっても、すなわち古典コンピュータでその振る舞いを模擬することが可能な系であっても、最後の出力結果を測定して処理する部分で工夫をすることで、古典コンピュータを凌駕する計算能力をもつ計算手法となることが発見された [9]。ここでポイントとなるのは、結果をどのようにして取り出すのか、観測の部分で工夫をしているところだ。また逆の方向性で、非擬似古典確率系の中にはその出力結果に応じて横磁場の値を変えることで、古典的なコンピュータ上であってもシミュレーションを行うことができるものもある [10]。こういった成果が上がるにつれて、ただ計算を行うだけでなく、その計算結果を巧みに利用することで人類がすでに保有している技術だけで極めて非自明な計算能力を達成することが可能ではないかを感じる。そういった意味で量子コンピュータをまっすぐ見つめて開発していくだけではなく、さまざまな分野からの知見を集積することで、最終的に人類が究極のコンピュータを手にするときがくるのだろう。

こういった研究の結実を眺めるに、量子アニーリングは本来の量子コンピュータとは確かに筋の違うものであったが、最適化問題の解法として登場しながら、統計力学、量子力学、計算機科学などさまざまな分野を横断的に跨ることで、分野に多大な影響を与えるシンボリックな存在となり、最終的に量子コンピュータの実現を近づける重要な概念であると言える。

5. おわりに

量子コンピュータ技術をいかにして活用していくのか、本特集でもそれぞれの筆者が強い思いを抱いている様子がうかがえるだろうし、産業界からも強い期待

が寄せられている。こと量子アニーリングに関しては、日本だけでも株式会社リクルートコミュニケーションズによる広告表示の最適化問題を筆頭に、株式会社デンソーの工場や流通の最適化への適用、株式会社メルカリから mercari4D における基礎研究・実証研究の開始、野村ホールディングスによる金融分野への展開など応用研究が盛んだ。ドイツではフォルクスワーゲンを始め、エアバスや各種交通手段に関係する企業が強い注目をしている。これらの期待に D-Wave マシンは応えることができるだろうか。最新版の D-Wave マシンでは取り扱える二値変数の数は 2048 ビットであり、用途によるが近年の大規模で高次元なデータ処理をすることのできる既存のデジタルコンピュータに比べて極めて少数であることは事実だ。そのために実証研究といっても相当うまい問題設定でないと置き換えを起こすような顕著な成果は出てこないと考えられる。とはいえ、スピングラス模型に最適化問題を落とし込み、量子アニーリングと呼ばれる首尾一貫した手法で解決をすることができるという一連の流れが形成されたことのメリットは大きい。スピングラス模型を共通言語とした開発が期待できる。量子アニーリングの産業上のメリットはこの部分ではないかと筆者は個人的には思う。古典的なコンピュータであっても解き方に相当するアルゴリズムを工夫することで、驚異的な速度で最適化問題を解くことは可能である。それに膨大な情報量を取り扱うことができる。量子アニーリングないし量子コンピュータではまだまだそのレベルに達してはいない。しかしどのアルゴリズムを利用すればよいのか、最善の選択や比較的容易に利用することのできる方法はどれか、悩むよりは即断実行ができる方法があることは大きな武器である。その意味でスピングラス模型という共通言語として、ありとあらゆる最適化問題を量子アニーリングを利用して解くことができるようになるということ自体には大きな期待を寄せてよいだろう。その流れを受けて、量子アニーリングに影響を受けた、日立製作所の CMOS アニーリングや富士通のデジタルアニーラが登場している。どちらも量子性を利用してはいないものの、最適化問題を高速に解く専用デバイスとして開発された。スピングラ

ス模型を共通言語として、利用することができるのだ。速く正確に、またはよい解が得られればよいのだ。

量子コンピュータが完全にエラーや環境からの影響に堅牢なシステム上で実現するための発展は、日々着実に進んでいる。人類が理論どりの量子コンピュータを手にする日は近づいていることは事実だ。その完成の手前で、量子アニーリングマシンが登場して、先に挙げたような問題点にある意味苦しんでいるし、だからこそ抜け道を探して、新しいアプリケーションへ適用される。さまざまな可能性を模索するときだからこそ、理想的な量子コンピュータ以外にも量子アニーリングのような考え方が登場して分野の活況の一助になりうるのは、なかなか量子的な運命と感じずにはいられない。

参考文献

- [1] 西森秀稔, 大関真之, 『量子コンピュータが人工知能を加速する』, 日経 BP, 2017.
- [2] 西森秀稔, 大関真之, 『量子アニーリングの基礎』, 共立出版, 2018.
- [3] F. Neukart, G. Compostella, C. Seidel, D. von Dollen, S. Yarkoni and B. Parney, “Traffic flow optimization using a quantum annealer,” *Frontiers in ICT*, **4**, p. 29, 2017.
- [4] S. Geman and D. Geman, “Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images,” *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **6**, pp. 721–741, 1982.
- [5] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann and M. Sipser, “Quantum computation by adiabatic evolution,” arXiv: quant-ph/0001106v1, 2000.
- [6] S. Suzuki and M. Okada, “Residual energies after slow quantum annealing,” *Journal of Physical Society of Japan*, **74**, pp. 1649–1652, 2005.
- [7] M. Henderson, J. Novak and T. Cook, “Leveraging adiabatic quantum computation for election forecasting,” arXiv: quantph/1802.00069, 2018.
- [8] M. Amin, “Searching for quantum speedup in quasisstatic quantum annealers,” *Physical Review A*, **92**, article number: 052323, 2015.
- [9] K. Fujii, “Quantum speedup in stoquastic adiabatic quantum computation,” arXiv: quantph/1803.09954, 2018.
- [10] M. Ohzeki, “Quantum Monte Carlo simulation of a particular class of non-stoquastic Hamiltonians in quantum annealing,” *Scientific Report*, article number: 41186, 2017.