



量子アニーリングと D-Wave

応
般

西森秀稔 (東京工業大学)

背景

量子コンピュータの研究開発を多くの大学や研究所が競っている中、カナダのベンチャー企業 D-Wave システムズ (以下 D-Wave 社) が「世界初の商用量子コンピュータ」D-Wave One を 2010 年に発表した。後継機種 D-Wave Two と合わせてすでに 4, 5 台が出荷されており、1,000 万ドルとも 1,500 万ドルともいわれる製品の顧客リストには、航空宇宙軍需産業のロッキード・マーティン、グーグルと米国航空宇宙局 NASA などが共同で設立した量子人工知能研究所などが並んでいる。量子コンピュータの実用化はまだ相当遠い将来だと考えていた研究者のコミュニティに波紋を広げているだけでなく、米英ではニューヨーク・タイムズ、エコノミスト、BBC、CNN、タイムなどの一般向けのマスメディアが報道を続けている。日本でも、日経サイエンスや日経コンピュータなどが詳細に報道している。

D-Wave Two とは一体どんな装置なのだろうか。どのような原理に基づいて設計され、どのように動作し、何の目的に使えるのだろうか。本当に量子コンピュータなのだろうか。一般向けのメディアの科学・技術への関心が薄い日本でも、物理や情報の研究者を中心にこうした疑問や質問を耳にする機会が増えている。本稿では、これらの問題に包括的な回答を提示することはできないにしろ、基本原理である量子アニーリングの発案者の立場から、筆者の力量の範囲でできるだけかみ砕いた解説を提供する。

何ができる (可能性はある) のか

量子アニーリングは、組合せ最適化問題を解くこ

とを目的として開発された量子力学的な計算手法である。離散値を取る変数が多数あってそれらの関数 (目的関数) が与えられているとき、その関数の最小値 (あるいは最大値) と、最大値 (最小値) を与える離散変数の組を求める問題である。教科書的な例としては、多くの都市を回って元に戻る最短経路を求める巡回セールスマン問題がよく知られている。機械学習の多くの課題も組合せ最適化問題として定式化できる。実際、ロッキード・マーティンや NASA は、航空機の制御ソフトのバグ検出や系外惑星探索などを組合せ最適化問題として表現し、D-Wave Two で解く試みなどを行っているとのことである。

量子アニーリングは、広く研究されている量子ゲートの組合せによる計算方式 (量子回路モデル) と理論的には等価であることが知られている。前者でできることは原理的には後者でできるし、その逆も成り立つが、現実には、D-Wave Two には量子回路モデルの実現に対応したハード的な機構は組み込まれてない。あくまで組合せ最適化問題に目的を絞った装置である。とは言え、組合せ最適化問題は非常に広い応用範囲を持ち、実用上の重要性は高い。

どうやって最適化するのか

まず、量子アニーリングの基礎理論について解説する。量子力学に関する多少の知識を仮定して話を進めざるを得ないので、理論的背景にあまり興味のない読者は、次の章「D-Wave Two」に飛んでいただいて差し支えない。

■ シミュレーテッド・アニーリングと量子アニーリング

組合せ最適化問題の汎用解法（メタヒューリスティック）としては、シミュレーテッド・アニーリング（模擬焼きなまし法）がよく知られており、現実の問題に広く応用されている。解候補の間の確率的な遷移を繰り返しながら、その確率を変化させていく。目的関数の値が現在の値よりも下がるような解候補への遷移は好ましい遷移だから無条件に受け入れる。一方、目的関数値が上がる遷移も一律には却下せず、1より小さいが0でない確率 p で受け入れる。最初は確率 p を1に近い値に取って多くの解候補を幅広く探索するが、次第に0に向かって減少させていく。最終的に $p \rightarrow 0$ とすることにより、元の最適化問題の解ないしそれに近いものに到達することができるのである。

一方、量子アニーリングでは、すべての解候補 $|\alpha\rangle$ の量子力学的な重ね合わせ（線形結合）を現在の状態 $|\psi(t)\rangle$ とする。量子力学の記法に従って、ケット記号を使うと

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}(t) |\alpha\rangle \quad (1)$$

と表される。たとえば、2ビットの場合なら

$$|\psi(t)\rangle = c_{00}(t)|00\rangle + c_{01}(t)|01\rangle + c_{10}(t)|10\rangle + c_{11}(t)|11\rangle \quad (2)$$

といった具合である。シミュレーテッド・アニーリングにおける解の候補の間の確率的な遷移は、量子アニーリングでは物理系の自然な時間発展を記述する基本方程式であるシュレディンガー方程式に従った $|\psi(t)\rangle$ の時間変化に置き換えられる。シュレディンガー方程式の具体的な形を後で直接使うわけではないが、記号の導入のために一応書いておこう。

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

(1)式を使うと、(3)式は係数 $\{c_{\alpha}(t)\}$ に関する微分方程式の組として表すことができる。すべての解候補 $|\alpha\rangle$ が(1)式のように量子力学的な意味で並存し、それらの確率振幅 $\{c_{\alpha}(t)\}$ が同時並行的に時間変化をしていくのである。これが、量子力学的な並列性に

よる高速な演算の実現に結びついている。(3)式の右辺に表れる演算子（作用素）（ないし行列） $H(t)$ はハミルトニアンと呼ばれ、量子力学における最も基本的な量である。物理的にはエネルギーに対応する。量子アニーリングが最適化問題の解の探索に威力を発揮するためには、この演算子を適切に選ぶことにより、正解の確率振幅が1に向かって増大していくようにする必要がある。

■ 目的関数

量子力学を用いてより立ち入った説明をする前に、組合せ最適化問題の目的関数を物理系のエネルギー関数として表す話をしておこう。この部分はシミュレーテッド・アニーリングと量子アニーリングで共通である。

簡単のため離散変数は2値とし、目的関数を2値変数の組の関数とする。量子力学との相性を良くするため、各変数の取る値を0,1の代わりに ± 1 として、 $\sigma_i^z (= \pm 1)$ と書くことにする。 i は変数の番号であり1から N までの値を取るとする。 N が問題のサイズである。 σ_i^z の上付き添え字 z はさしあたり気にしなくてよい。

目的関数を、物理の習慣を流用して H_0 と書くことにする。 H_0 が $\sigma_1^z, \dots, \sigma_N^z$ の関数としてどのような形をしているかは問題ごとに違ってくるが、磁性体の物理でエネルギーを表すのによく使われる次の形が、実際にD-WaveTwoにおいてハード的に実現されている。

$$H_0 = - \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i^z \quad (4)$$

J_{ij} は、変数 σ_i^z と σ_j^z がそれぞれ ± 1 を取るとき目的関数にどう影響するかを規定するパラメータである。 h_i も同様である。 J_{ij} や h_i の値を (i, j) や i ごとに適切に指定することにより、解くべき最適化問題を(4)式のような形で表現する。シミュレーテッド・アニーリングや量子アニーリングでは、目的関数を(4)式のように表現するプロセスのみが問題に応じて工夫する必要のある部分である。それができれば、シミュレーテッド・アニーリングなら解候補の確率

的な変化のプロセスを計算機上で実行すれば良いし、量子アニーリングではシュレディンガー方程式に従って $|\psi(t)\rangle$ を時間変化させる。後者における量子力学的なプロセスを直接的にハードウェアで実現したのが D-Wave Two である。

■ 量子効果の入った演算子の構成

量子アニーリングで目的関数 H_0 の最小値を見つけるには、シュレディンガー方程式に現れる演算子 $H(t)$ を上手に選ぶ必要がある。通常、次の形が用いられる。

$$H(t) = A(t)H_0 - B(t)\sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (5)$$

$A(t)$ は目的関数 H_0 の影響の大きさを決める係数であり、初期時刻 $t=0$ における最小値 $A(0)=0$ から最終時刻 $t=T$ での最大値 $A(T)=1$ まで単調増加する関数を選ぶ。 $B(t)$ がかった第2項は、量子力学的な効果を表すことが知られている。関数 $B(t)$ としては、初期値 $B(0)=1$ から最終値 $B(T)=0$ まで単調減少する関数を選ぶ。 σ_i^z と σ_i^x は次の 2×2 行列である。

$$\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

下付きの添字 i は、この行列を各 i について割り当てて示している。 σ_i^z は対角行列だから、 σ_i^z のみが現れる式においてはただの数 ± 1 と見なしてもよい。これが前節（目的関数）で $\sigma_i^z = \pm 1$ と書いた理由である。 σ_i^x は $|1\rangle_i \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ を $|-1\rangle_i \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ に変え、逆に $|-1\rangle_i$ を $|1\rangle_i$ に変える。これが量子力学的な遷移に対応する。

■ 量子アニーリングにおけるパラメータ制御

演算子 $H(t)$ に現れる関数 $A(t)$ および $B(t)$ の初期値は、すでに述べたように $A(0)=0$ および $B(0)=1$ と設定する。よって、時刻 $t=0$ では

$$H(0) = -\sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (7)$$

である。この演算子の最小固有値に対応する状態

は $|1\rangle_1 |1\rangle_2 \cdots |1\rangle_N$ から $|-1\rangle_1 |-1\rangle_2 \cdots |-1\rangle_N$ までの 2^N 個が同じ重み（同じ係数）で線形結合された状態であることが知られている。すべての解候補が同じ確率振幅（同じ係数）を持つのであり、解についてまったく知識がない白紙の状態から始めると解釈できる。

この初期状態から出発して、時間とともに $A(t)$ を 0 から 1 に向けて増加させ、目的関数の影響を次第に大きくしていく。同時に、 $B(t)$ を 1 から 0 に向けて減少させていくことにより、量子効果を次第に小さくしていく。 $|\psi(t)\rangle$ はシュレディンガー方程式 (3) に従って時間発展する。言い換えれば、すべての解候補の線形結合 (1) の係数 $\{c_\alpha(t)\}$ が同時に時間変化していくのであり、量子力学的な並列処理と見なすことができる。このプロセスをゆっくりと行うと、各時刻で演算子 $H(t)$ の最小固有値に対応する状態をたどっていき、時刻 $t=T$ においては $H(T) = H_0$ （目的関数）の最小固有値に対応する状態、すなわち最適化問題の解に行き着くと期待されるのである。

D-Wave Two

■ ハードウェアの構成

D-Wave 社は、量子アニーリングを直接ハードウェア的に実現する装置を開発した。微小な超伝導閉回路を基本素子とし、閉回路上を超伝導電流が右に回るか左に回るかを、それぞれ $|1\rangle$ と $|-1\rangle$ に対応させる。超伝導閉回路上で実際にどちらに回っているかは測定するまで不確定であり、これら2つの状態の量子力学的な重ね合わせ $a|1\rangle + b|-1\rangle$ が実現される。たとえば、右回りと左回りが完全に同じ確率なら、 $\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle$ である。

こうして作られた量子ビットを縦に4つ、横に4つ並べ（図-1）、縦横の素子が交差する場所に配置された別の超伝導回路を介して結合する。結合点において、2つの量子ビット i, j の間の相互作用 J_{ij} を問題に合わせて決められた値に設定する。

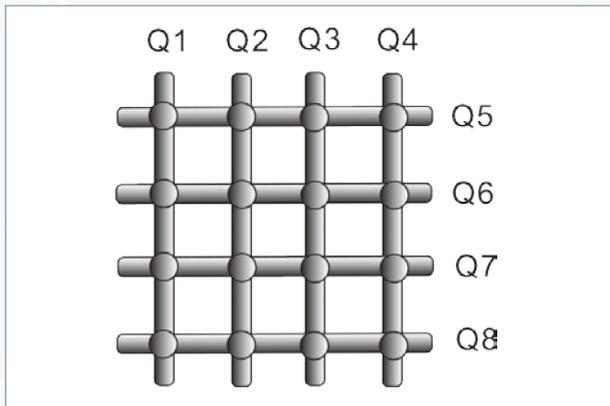


図-1 D-Wave Twoのチップの単位構造。縦長のQ1からQ4の4つの超伝導閉回路と、横長のQ5からQ8の超伝導閉回路の合計8つが量子ビットとして縦横に並び、○で示された交点で結合されている。

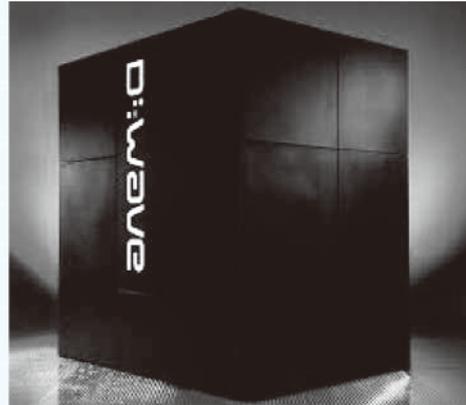


図-2 D-Wave Twoの外観

図-2は製品の外観である。約2メートル立方の黒い箱だが、中心となる超伝導回路の部分は親指の爪ほどの大きさしかない。超伝導回路を外部磁場から遮蔽するとともに、絶対零度に近い温度に保つための周辺装置や、内部に人が入って各種調整をするためのスペースなどが大部分を占めている。

演算回路が超伝導素子で構成されているので、演算自体はほとんど電力を消費しない。筆者がNASAのエームズ研究所でD-Wave Twoを見せてもらったときには、演算回路の消費電力が17fW (1.7×10^{-14} W)と表示されていた。装置全体で10kW程度の消費電力は、ほぼすべて冷却用である。このため、今後システムが大きくなっていても消費電力量は基本的には増大しない。これは、半導体技術に基づく通常のコンピュータとの大きな違いである。

D-Wave Twoは512量子ビットを有しており、それらの間の結合 $\{J_{ij}\}_{(ij)}$ や $\{h_{ii}\}_i$ を問題に応じて指定された値に調整した後、(5)式の係数 $A(t)$ および $B(t)$ を適切に時間変化させられるように作られている。これはきわめて高度な技術である。D-Wave社が取得している特許数は、IBM, HP, 富士通に次いで4番目とのことである。量子アニーリングのハード的な実現を学界が疑問視して競争相手が現れない間に、追従が困難なレベルに達している。

■ソフトウェア

D-Wave Twoを最大の効率で動かすには、ハー

ドウェアの構造を考慮して最適化した機械語レベルの制御を使う必要がある。各種のベンチマークはこうして行われているものと推測される。この場合、最適化問題の目的関数を(4)式のように表し、それをハードウェアの構造上でどう効率よく実現するかをあらかじめ十分検討することが必須となる。

より広範な応用のためには、通常の言語(C, Python, Fortran)により表現された目的関数を機械語レベルの表現に翻訳して最適化を実行できることであるが、このレイヤおよびそれよりさらに上位の応用ソフトについては開発中の模様である。

開発の歴史と現状

量子アニーリングの原理に従って動作する装置の開発を進めていたD-Wave社は、2007年に16量子ビットのプロトタイプを発表した。開発状況の学術誌への論文報告があまりない状態で、商用機開発という一般向けのややセンセーショナルな発表をした印象を与えたために、関連分野の研究者の中にはD-Wave社を疑いの目で見ることが少なくなかった。ただ、基盤技術や基礎科学分野の研究成果については、2000年代初頭から継続的に論文を発表していたことは事実である。

2010年には128量子ビットを持つ商用機D-Wave Oneを発表し、ロッキード・マーティンが購入した。2011年には、128量子ビットのうち

の1量子ビットおよび8量子ビットを使った動作検証の論文をNatureに発表した。量子アニーリングの手順を実行したとき、装置が最小固有値に対応する状態になっている確率の温度依存性を調べると、量子力学に従って動作していると考えないと説明できないデータになっていることを示した。学術的な意味で説得力のあるデータであっただけでなく、Natureという「権威ある」雑誌に掲載されたこと、ロッキード・マーティンが実際に購入したこと、こうしたいくつかの事実の相乗効果で学問的のみならず社会的にもインパクトを与えた。少なくとも8量子ビットのスケールでは、量子アニーリングが実際に実現されていることが検証されたと言えるだろう。

2013年にはグーグル、NASA、USRA (Universities Space Research Association) の3者が共同で設立した量子人工知能研究所に512量子ビットのD-Wave Twoが納入された。また、通常のコンピュータと比較したベンチマークが発表された。その論文の記述の一部が、前後の脈絡を切り取って「通常のコンピュータより3,600倍速い量子コンピュータ完成」というキャッチフレーズで米英の大手マスメディアで取り上げられるなど、社会的に大きな注目を浴びた。

学術面では、2011年から現在に至るまでに、D-Wave One および D-Wave Two の動作検証や比較的小規模な問題への応用、さらに関連した数値解析や理論解析の論文が多数発表されている^{☆1}。たとえば、タンパク質の構造について、格子上にアミノ酸が配置された模型を使って組合せ最適化問題として定式化することによりD-Wave One上で量子アニーリングを実行した研究では、小さいが0ではない頻度で正しい安定配位が得られると報告されている。また、8量子ビットの系をD-Wave Two上で表現し、量子もつれの大きさを測定したところ、理論予測とよく一致したことにより、量子力学に従った動作が直接的に検証されたとの報告がある。一方、 J_{ij} をランダムに選んだスピングラスと

呼ばれる統計力学の問題で、多数のサンプルについてD-Wave Twoを使って得られた結果と、量子力学的なシミュレーションおよび古典理論によるシミュレーションを比較したとき、D-Wave Twoの特性は量子力学を使っても使わなくてもほぼ同じ精度で説明できるとする研究もある。

何が問題で今後どうなるのか

■ 問題点は何か

D-Waveを巡っては多くの議論があるが、学術的には問題点は3つに絞られる。第1は、D-Wave Twoが本当に量子力学に従って動作し、量子アニーリングを正しく実現しているかどうかである。第2は、D-Wave Twoは通常のコンピュータに比べて処理が速いかどうかである。最後に、D-Wave Two自体とは直接かかわりなく、量子アニーリングは古典計算より高速な計算を可能にするのかという理論的な問題もある。これらについて現状と近い将来の展望を見ていこう。

■ 量子性

2011年のNatureの論文は、D-Wave Oneの全システムのうち1量子ビットあるいは8量子ビットという比較的小さな部分だけを動作させたときに、量子力学に基づく理論と一致する挙動が見られるという報告であった。これと同じ大きさのシステムで、最近、量子的なエネルギー構造の理論や量子もつれの理論と一致するデータが得られたという報告もある。これは量子性の直接的な検証と理解できる。また、別の角度から、40量子ビットで量子性を検証した論文も現れている。40量子ビット程度までなら、量子アニーリングを実際にハードウェアレベルで実現していることはほぼ確立されたと言える。100量子ビットのスケールになると、入出力関係が量子力学によって理解されるという論文があるが、量子力学を使わなくても同じデータが解釈可能という意見も出ており、今後数カ月から数年の進展が注目される。

^{☆1} 参考文献欄に記載した筆者のWebサイトで原論文のリストを紹介しているので、興味があればご覧ください。

量子アニーリングを正しく実現していたとしても量子コンピュータとは言えないと考える人もいる。量子コンピュータとは、あくまで量子ゲートを使った量子回路をハード的に実現した装置であるということである。それは定義の問題であり、正しいかどうかを議論することにそれほど意味は見いだせないが、「基本的なアルゴリズムの動作原理が量子力学に基づいている」のが量子コンピュータだというもう少し広い定義もあり得ることは頭に置いておきたい。

■ 高速性

通常のコンピュータより高速かどうかについては、問題の種類や、アルゴリズム、コーディング技術、用いるハードの種類などによって異なる結果が出ているのが現状である。量子アニーリングと比較すべき古典アルゴリズムはシミュレーテッド・アニーリングであるという立場から、系統的かつ包括的に両者を比較した最近の論文は、高速な通常の計算機上で走る最適化されたコードを D-Wave Two と比較し、一概にどちらが速いとも言えないという報告をしている。一方、これらのベンチマークで用いている問題群はシミュレーテッド・アニーリングに有利な性質を持つとの指摘もほぼ同時に提出されている。後者の指摘を踏まえた新たなベンチマークが現在実行されており、予断を許さない。

■ 理論的な可能性

実機を離れて理論的にはどうだろうか。素因数分解の Shor のアルゴリズムのような指数関数的な高速化のアルゴリズムが量子アニーリングでは見つからないから、量子アニーリングはあまり意味がないというコメントを聞くことがある^{☆2}。実は、特殊な問題については見つかったのである。2つの2分木を枝先同士でランダムにつなげた構造のグラフ(図-3)で、片端からもう一方の端まで確率的な遷移によりできるだけ速くたどり着くという

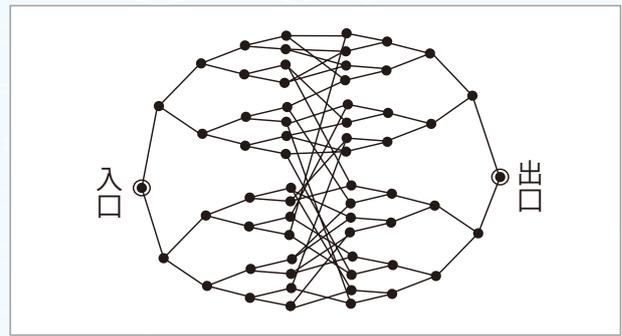


図-3 左端の入口から始めて、右端の出口まで到達せよという問題。各ノード(小さな黒丸)で3つのエッジ(前向きと後ろ向き)のどちらにも行けるとする。古典的な時間と量子アニーリングによる時間を比べると、後者が前者に比べて指数関数的に速くできる。

問題で、古典計算では指数関数時間がかかるところを、量子アニーリングだと対称性を巧妙に利用して多項式時間で済むことが示されている。しかし、残念ながら素因数分解に比べると問題設定が特殊で実用性に欠けるので注目度は高くない。指数オーダーの高速化ではないが、データベース探索を2乗の時間スケールで高速化する Grover のアルゴリズムの量子アニーリング版も開発されているが、D-Wave Two 上で実現するのは難しい。

指数関数的な高速化の厳密な保証に必ずしもこだわらなければ、量子アニーリングがシミュレーテッド・アニーリングより速く確実に正解に行き着くという数値計算や理論解析の報告は多数ある。これらの例の特徴をより系統的に調べるとともに、1つでも実用的に重要な問題について量子アニーリングによる大幅な高速化が達成される例を見つけることができれば、インパクトは計り知れない。

■ 関連した着目点

量子性や高速性以外にも、近い将来の進展において注目すべき点はいくつかある。まず、ハードウェアの精度の問題である。目的関数に現れるパラメータ J_{ij} や h_i を問題に応じて適切な値に調整しなければならないが、D-Wave Two では5%程度のチューニング誤差を伴っている。この誤差はベンチマークにおける正答率の低下を招いており、今年中にリリースされる 1,024 量子ビットの次世代機を持つチューニングの精度に注目する必要がある。

^{☆2} Shor のアルゴリズムを量子アニーリングに書き換えることは原理的にはできるが、目的関数がきわめて複雑な形になり、D-Wave Two 上で実行するなどの実際的な用途には使えない。

量子回路モデルにおいては、環境との相互作用による量子状態の破壊（デコヒーレンス）が深刻な問題であり、その影響を低減するために誤り訂正の技術開発が進んでいる。たとえば、Shor のアルゴリズムを、誤り訂正を取り入れて実用的なレベルで実行するには数千万量子ビットのシステムを構築して精緻に制御する必要があると言われている。仮に実現できるとしても、きわめて長い年月にわたる研究の積み重ねが必要であろう。これに対して、量子アニーリングはハミルトニアン演算子の最小固有値状態（物理的には最小エネルギー状態）をたどるため、本質的な安定性を内蔵している。この点は、量子アニーリングの大きな強みの1つである。しかしながら、熱雑音その他の影響を多少なりとも受けるので、それを軽減するために誤り訂正符号の理論的研究が始まっており、今後数年の間に相当の進展が予想される。

未知の世界

D-Wave Two 自体の量子性や高速性とは別に、量子力学を計算に用いると何が可能になるかという基本的・原理的な興味は尽きない。量子アニーリングも、元々そのような純粋な理論的興味から出てきたアイデアである。量子回路モデルについては膨

大な研究の蓄積があるが、量子アニーリングは未開拓の部分が多く、発展の余地が大いに残されている。特に、実験的な研究はまだ非常に少ない。熟成した分野と違って、あまり経験のない人でも大きな仕事ができる可能性を秘めている。これから数年間勝負である。このチャンスを活かしてみようという若い人のチャレンジを待っている。

参考文献

- 1) 筆者の Web ページに量子アニーリングの解説や最近の進展のリストがあるので参照してほしい。 <http://www.stat.phys.titech.ac.jp/nishimori/>
- 2) Das, A. and Chakrabarti, B. K. : Reviews of Modern Physics, 80, 1061 (2008).
- 3) Santoro, G. E and Tosatti, E. : Journal of Physics A, 39, R393 (2006).
- 4) Suzuki, S., Inoue, J. and Chakrabarti, B. K. : Quantum Ising Phases and Transitions in the Transverse Ising Models, Chapter 8. Springer (2012).
- 5) Ghosh, A. and Mukherjee, S. : arXiv:1310.1339.
- 6) 大関真之, 西森秀稔 : 量子アニーリング, 日本物理学会誌 66, 25 (2011).

(2014年2月28日受付)

西森秀稔 nishimori@phys.titech.ac.jp

1954年生。東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了。東京工業大学教授・大学院理工学研究科理学系長・理学部長。専門は統計力学および量子力学。日本物理学会会員、英国物理学会フェロー。