

量子アニーリングの現状と未来

東京理科大学 理学部第一部 物理学科 講師

産業技術総合研究所 ナノエレクトロニクス研究部門 博士研究員

産業技術総合研究所 ナノエレクトロニクス研究部門 研究グループ長

わた べ しょうへい
渡部 昌平
せき けん せき けん
関 優也
かわばた しろう
川畑 史郎

はじめに

神楽坂、野田、葛飾、長万部。東京理科大学には4つのキャンパスがある。4つのキャンパスすべてを巡り理科大のことをもっと知ってみよう。キャンパスすべてを1日あるいは長万部は離れているから1泊2日で行ってみる。自宅から出発し、各キャンパスは1回切りで最短で戻ることしよう。地図を開き距離の総和が最小となるように様々な線引いて最短ルートを探す。実際は、直線的な移動ではないし、時間や電車賃・航空賃・宿泊費も抑えるなどいろいろな要素が絡んでくる。

似たような問題は社会に多く潜んでいる。距離だけでなく、時間・お金など様々な価値、膨大な数の要素が複雑に絡みあう中で、個人の幸福度を最大にしたい。個人だけでなく、自然・人間・社会が相互に利益を得られるかたちが良い。といっても、価値観は人それぞれ。何をどのくらい大切にすることは常に議論的になる。しかし、ひとたびそれを定量的に評価する枠組み・関数を仮定して使ってみようとなれば、その限られた指標の範囲内ではあるが、できるだけ良い方法が存在するはずだ。

このような問題は組合せ最適化問題と呼ばれる。最初に書いた理科大全キャンパス探訪問題は、巡回セールスマン問題と呼ばれる部類に属する。定量的に評価する関数のことをコスト関数と呼ぶ。組合せ最適化問題は、このコスト関数を最小にする解を求める問題

だ。例えば、交通渋滞の解消・金融経済・製薬など社会全般に現れる。他にも、研究室配属のとき研究室主宰者が求める人材と希望者とのマッチングもその一例だ。

この種の問題の難しさは2つある。1つは、コスト関数を作る点。科学の世界では、何かを最小あるいは最大にしたいという量は、エネルギーなど明確に定義される。しかし、社会的な問題に適用するときは価値観に応じて何を重視するかという問題が存在する。

2つ目は、コスト関数を定義できたとしても、そのコスト関数を最小にする組合せ最適化問題の解を見つけだすことが至難の技である。なぜなら、もっともらしい解の候補が見つかって、他のすべての解と比較しなければコスト関数を本当に最小にするとは断言できないからだ。コスト関数をもっと低くする解が見つければそちらの方が良い。結局、すべて調べ尽くすまで他にまだ最適な解がある可能性を捨てきれない。考える要素数が多くなれば多くなるほど、すべてを調べ尽くすのには膨大な時間がかかる。果ては人の一生が終わっても、全体のごくごく一部しか調べられていないような状況に陥る。

実際問題、想像よりも短いスパンで価値観・パラダイムが変化する現代では、最初に解こうとした問題すら価値がなくなっている可能性がある。多くの場合、時間という制約があるために、最適な解だと思われるものをなんらかの方法で得て、それを信じて選択せ

ざるを得ない。したがって、組合せ最適化問題の解を汎用性のある方法で前提知識なしにできるだけ早く効率的に見つけることが様々な局面で求められている。

物理学との関係

組合せ最適化問題を $+1$ と -1 など二値変数を使って表現できれば、これは物理学のスピン系と呼ばれる問題で記述できる。このとき、組合せ最適化問題はスピン系で記述される問題ハミルトニアンのエネルギを最小にしましょう、という問題に帰着される。エネルギを最小にする状態（基底状態）が分かれば、その状態のスピン向きを調べること、 $+1$ 、 -1 がどう並んでいるかが明らかになる。これによって対応する組合せ最適化問題の解が分かるという寸法だ。多くの組合せ最適化問題はスピン系の問題に落とし込むレシピがすでに分かっているの、物理の言葉でいったん書ければ、あとは定量的にいか基底状態を求めるかが課題となる。

1つの方法は1983年にKirkpatrickらによって提案された焼きなまし法である。温度に対応するパラメータを導入し、高温から始め、徐々に温度を下げていき解を求める方法だ。通常の組合せ最適化問題では、1つのスピンに対し複数のスピンが相互作用するモデルにマップされる。このとき、2つのスピンを同じ向きに向かせる相互作用と反対向きに向かせる相互作用が複雑に絡み合っているのが一般的だ。スピンが多数あると、この複雑に絡まった相互作用の効果で真の最適解を得ることは困難となる。焼きなまし法は、熱ゆらぎを用いることでこの硬直したスピン間の利害関係をうまく解きほぐし、組合せ最適化問題の最適解を求める方法だ。これは統計力学と呼ばれる分野の手法に基づいている。しかしながら、硬直した利害関係が随所に多発するため、最適解を見つけ出すのはこの手法でも難しいことがある。

そんな中、統計力学の原理ではなく、他の力学の原理を採用しても組合せ最適化問題を効率的に解けるのではないかと？ 例えば量子力学を使うのはどうだろう？ というアイデアが、東京工業大学の西森秀稔教授と門脇正史博士（現・デンソー）によって1998年に提案された。具体的なアイデアはこうだ。先ほど説明したように、硬直したスピン間の利害関係が随所に多発するため、問題ハミルトニアン基底状態を用意することは難しい。そこで、基底状態が簡単に作り出せる系をまず先に用意してしまおう。特に、量子力学には状態の重ね合わせという概念が存在する。これを用いて組合せ最適化問題の解の候補すべての重ね合わせ状態を基底状態として用意してしまう。こうすれば、可能性のあるすべての解の候補が基底状態に含まれることになる。一見複雑そうだが、このような状態を基底状態として与えるハミルトニアンを作り出すことは容易だ。

次に、このハミルトニアンを問題ハミルトニアンにゆっくりすり替える。ゆっくり時間をかけるのは、断熱定理と呼ばれる定理が適用できるためだ。この定理によって最初に基底状態からスタートすると、最後まで状態は基底状態のままであることが保証される。したがって、ハミルトニアンをゆっくり切り替えた後の終状態は、問題ハミルトニアンの基底状態になっている。これは、組合せ最適化問題のコスト関数の値を最小にする解が求まったことに対応する。

量子アニーリングマシン誕生と現状

量子アニーリングが社会的に認知されるようになったのは、2011年、カナダのD-Wave Systems社が量子力学の原理に基づいた世界初の商用計算機D-Wave Oneを発表したことがきっかけである。この計算機は超伝導集積回路からなり、量子力学的な重ね合わせ状態が巨視的に現れる超伝導体を量子ビット

に用いている。世界初の商用量子コンピュータと謳っていたが、実際には量子アニーリングに特化したもので、組合せ最適化問題を解くための専用機である。量子コンピュータというと、汎用性のある万能型量子コンピュータをイメージするので、この主張は専門家から批判された。しかし、NASA・Google・ロッキードマーティンなどが利用するようになり多くの人が無視できない状況になった。その後 D-Wave Systems 社は、2 年ごとに超伝導量子ビットの数を 2 倍にするという計画のもと、2017 年に 2,000 量子ビットの D-Wave 2000Q を販売している。

D-Wave の量子アニーリングマシンは完成した商品ではあるが、まだ発展途上のマシンでもある。よく知られた課題は 2 つある。1 つは、超伝導量子ビットが量子性を保てる時間（コヒーレンス時間）が、実際にアニーリングする時間に比べて短いことだ。アニーリング時間は短く見積もって数マイクロ秒程度で、コヒーレンス時間はその 100 分の 1（数十ナノ秒）程度である。明らかに量子性はなさそうだが古典計算機では出ないとされる出力が報告された。もう 1 つは、大規模化の問題である。2,000 量子ビットの量子アニーリングマシンを用いたとしても、巡回セールスマン問題はわずか 10 都市程度しか解けない。そのため、より大規模な量子アニーリングマシンを製造する技術が必要だ。

D-Wave マシンの課題以外にも、量子アニーリングには原理的な側面での課題が残されている。量子アニーリングでは、基底状態が簡単に作り出せるハミルトニアンから出発し、複雑な問題ハミルトニアンにすり替える。この操作をととてもゆっくり時間をかけることで系が基底状態に留まり問題を解くことができる。どのくらいゆっくりか。それは、基底状態のエネルギーと次にエネルギーが低い状態（第一励起状態）のエネルギー差、その二乗に反比例した時間スケール、これより

もゆっくりでなければならない。したがって、エネルギー差（エネルギーギャップ）が大きければ時間をかけなくてもいいが、エネルギー差が小さいとゆっくりしなければならない。実際、組合せ最適化問題を量子アニーリングの問題に落とし込むと、多くの場合、このエネルギーギャップが組合せ最適化問題のスピン数に応じて急激に小さくなることが知られている。

量子アニーリングの課題と未来

さて、このような量子アニーリングの研究は、現在 3 つの方向性があるようだ。1 つ目は応用面、2 つ目は基礎面、3 つ目は応用と基礎を横断する研究である。

1 つ目の応用面というのは、世の中に潜む課題を組合せ最適化問題で表現し、量子アニーリングを適用して問題を解消しようという方向性だ。実際、リクルートコミュニケーションズやデンソーなどが大学などと共同で量子アニーリングを用いた研究開発を行っているし、Jij というベンチャーが計算困難な社会的課題を解決するソフトウェアを量子アニーリングに関連させ開発している。本学では、理学研究科物理学専攻修士 1 年の白井菖太郎さん・応用数学専攻修士 1 年の八木武尊さん・理学部第一部物理学科 4 年の新保潤さんが情報処理推進機構の 2019 年度未踏ターゲット事業に採択され、海運業界の問題にアプローチしている。運送コストと輸送時間に対する最適航路を提示するアプリケーション開発に学部を超えた彼ら若手 3 人が挑んでいる。

2 つ目の基礎面は、先に挙げた長いコヒーレンス時間・大規模化・エネルギーギャップの問題をいかに克服するかが大きな課題だ。長いコヒーレンス時間の実現は、量子アニーリングに限らない問題で、万能型量子コンピュータにも必要不可欠だ。MIT や Google など超伝導量子ビットを製造できる大型の研究

所を中心に、コヒーレンス時間の伸長について地道な基礎研究が行われている。また、真空中にトラップしたイオンは、外界からの擾乱を極力排除でき量子性を長く保持できるメリットがある。そのため真空中にトラップしたイオンを量子ビットとして用いるイオントラップ方式の研究開発も行われている。

大規模化の実装については、本学の蔡（兆申）研究室がこの問題に取り組んでいる。博士課程の向井寛人さん・朝永顕成さんらは、量子ビットと結合する共振器回路を格子状に組み、共振器回路同士を超伝導量子干渉計で結合させるという大規模化に向けた新しいアイデアを提案しており、実証実験に取り組んでいる。

エネルギーギャップ問題のアプローチは現在大きく2つに分けられるだろう。

1つ目は、問題ハミルトニアンに移行するスケジューリングを様々な方法で調整するアプローチだ。実際、D-Wave 2000Q では途中でハミルトニアンを戻すリバースアニーリングという方法が実装可能になっている。2つ目は、問題ハミルトニアンに移行する途中はどのようなハミルトニアンでも良いため、量子性を活かした絶妙なハミルトニアンを付け加えるなどのアイデアである。いずれも現在精力的な研究が行われている。

筆者たちは、東京理科大学－産業技術総合研究所の共同研究として、このエネルギーギャップの問題について上とは違った視点から研究を行ったので簡単に紹介したい。量子ビットが実現している超伝導量子回路・冷却原子系・ダイヤモンド窒素－空孔中心（NV 中心）系では、実のところ多準位系であり、量子ビットとして2つの準位を選択的に使っている。我々は3つ以上の量子状態を使う縮退型二準位系と呼ばれるモデルを使い量子アニーリングの性能向上の可能性を調べた。その結果、準位間の結合をうまく選ぶと、既存の系よりも性能が良くなり得ることを明らかに

した。その背後に、縮退型二準位系の対称性が関係していることも明らかにした。

最後に、3つ目の方向性、応用と基礎を横断する研究として、次のものを挙げておこう。産総研も量子アニーリングの研究開発に取り組んでおり、実際、因数分解問題に特化した実機を設計・製造している。その性能の評価は実施中であり近いうちに報告されるだろう。また、これからのIoT時代は、センサーから情報が大量に送られ、そのビッグデータについて解析しなくてはならない。本学応用物理学の橋爪洋一郎講師は、画像データの特徴を取り出す主成分分析と呼ばれる手法を例にとり、データ解析に量子アニーリングが使えることを示している。

終わりに

自然・人間・社会の調和的発展を実現するためには、組合せ最適化問題を解くような困難な課題に直面することがあるだろう。それを解決する科学技術の1つが量子アニーリングである。まさに本学の教育研究理念“自然・人間・社会とこれらの調和的発展のための科学と技術の創造”にマッチした研究の1つだ。量子アニーリングの基礎面の課題、長いコヒーレンス時間・大規模化・エネルギーギャップの問題は、完全には解決されておらず残された課題である。しかし、最適解でなくても、量子アニーリングで少しでも最適解に近い解を得られれば、たとえ数%の改善でも市場規模が大きい産業にとっては大きな価値がある。実社会と密接に関係した量子アニーリングの研究開発、科学技術を支えるボトムアップの実験・理論の基礎研究、それらを横断する研究、これらがお互いに刺激を与え、さらに進展していくことが期待される。

