

# 量子計算から生まれた組合せ最適化アルゴリズム

## ——古典力学の断熱変化とエルゴード性を利用して解を探索する

後藤 隼人 (株)東芝研究開発センター hayato1.goto@toshiba.co.jp

カナダのベンチャー企業 D-Wave Systems が量子アニーリング (断熱量子計算) に基づく量子コンピュータ「量子アニーラ」を商用化したことをきっかけに、組合せ最適化問題に特化した計算機がドメイン指向コンピューティングの新たなターゲットとして注目されている。量子アニーラはイジングモデルの基底状態を求める問題 (イジング問題) を解くイジングマシン的一种である。イジングマシンの他の方式としては、光パラメトリック発振器を用いるコヒーレントイジングマシン (CIM) やシミュレーテッドアニーリング (SA) をベースにしたデジタル回路などがある。

こうした背景の下、筆者は 2016 年、カー効果を有するパラメトリック発振器 (KPO) の量子分岐現象を利用するイジングマシン「量子分岐マシン (QbM)」を提案した。QbM は量子断熱定理に基づいてイジング問題を解けるだけでなく、ゲート方式のユニバーサル量子計算も行える新しい量子コンピュータである。

QbM の量子性を議論するために、QbM の古典力学版である「古典分岐マシン (CbM)」も同時に導入した。数値実験により、CbM もイジング問題を解けることがわかったが、これは興味深い結果である。なぜなら、QbM の原理である量子断熱定理は一般の量子系に関して成り立つが、古典力学にはこのような一般的に成り立つ断熱定理は知られていないからである。つまり、CbM は未知の古典断熱定理の存在を示唆すると同時に、古典断熱変化に基づく組合せ最適化の最初の例であり、真に量子にインスパイアされた発見と言える。

QbM と CbM の発見から 1 年ほど経った後、CIM が 2000 スピン・全結合という大規模なイジング問題をデジタル計算機に比べて圧倒的な速さで解いた、というインパクトの大きい結果が発表された。QbM で

はまだ大規模な問題を扱えないが、CbM であればシミュレーションによって大規模問題を扱えることに気が付き、CbM の研究を開始した。そして、CbM の運動方程式を高速シミュレーションに適した形に改変することで、高い並列性を有する組合せ最適化アルゴリズム「シミュレーテッド分岐 (SB) アルゴリズム」を発見した。SA は代表的なヒューリスティクスの 1 つであるが、並列計算には向かない。SB は並列計算向きの新たなヒューリスティクスと言える。

SB の高い並列性をフルに活かし、そのポテンシャルを示すために、SB を既存のデジタル計算機で超並列実装し、CIM が解いた 2000 スピン・全結合問題を解き、CIM よりも約 10 倍高速という結果を得た。これは、社会実装しやすい既存のデジタル計算機を用いて高速かつ大規模な組合せ最適化を実現できる可能性を示している。

一方で、すでに触れたように、SB の原理は自明ではない。エネルギー極小点を追従するという古典断熱定理が一般に成り立つと仮定すればある程度説明できるが、数値実験で得られた高い性能を説明するには何か別の動作原理が必要と思われる。

そこで、2 スピン・強磁性結合という最も単純なイジング問題の場合を詳しく調べたところ、断熱変化だけでなく、位相空間内のエネルギー的に許される領域をまんべんなく訪れるというエルゴード性が解探索に有効に働いていることを示唆する結果が得られた。つまり、SB は古典力学における断熱変化とエルゴード性に基づくと考えられる。より数学的に厳密な SB の原理説明は未解決問題であり、今後の課題である。

このように、量子計算から生まれた SB は、実用的な組合せ最適化マシンへの新たな道を開くとともに、理論物理学や数理工学などを横断する学際的な研究領域を生み出すと期待される。

### —Keywords—

#### 組合せ最適化問題とイジング問題：

組合せ最適化問題とは離散変数に関する最適化問題であり、多くの場合、NP 困難問題と呼ばれる計算困難問題となる。イジング問題は NP 困難な組合せ最適化問題の一種であり、多くの組合せ最適化問題がイジング問題に帰着できることが知られている。

#### 量子断熱定理と断熱量子計算：

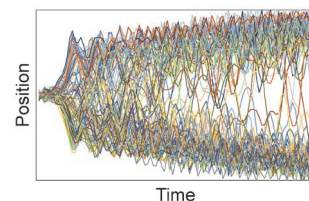
量子断熱定理とは、量子系が初めあるエネルギー固有状態にあり、ハミルトニアンが時間変化が十分遅いとき、系がその固有状態に留まり続けるという量子力学で知られる定理。この量子断熱定理に基づく量子計算を断熱量子計算と呼ぶ。

#### 量子分岐現象：

古典力学的な KPO は 2 つの発振状態のどちらかへ変化する分岐現象を示すが、量子力学的な KPO は量子断熱変化によって 2 つの発振状態の重ね合わせ状態へと変化する。筆者はこれを「量子分岐現象」と名付けた。

#### ヒューリスティクス：

通常の意味でのアルゴリズムではないが、経験的にうまくいく計算手法のこと。組合せ最適化問題のような計算困難問題では、このような手法が実際上役に立つ。



SB マシンが  $K_{2000}$  と呼ばれる 2000 スピン・全結合イジング問題の解を探索する様子。2,000 個の振動子のうちの 100 個の位置の時間変化を表している。