

量子アニーリング法と D-Wave マシン

西森 秀稔

1 はじめに

2010年、カナダのベンチャー企業D-Waveシステムズ社(D-Wave社)が「世界初の商用量子コンピュータ」D-Wave Oneを発表した。後継機種D-Wave Twoと合わせて既に数台が出荷されており、1000万ドルとも1500万ドルともいわれる製品の顧客リストには、ロッキード・マーティンや、グーグル、NASAなどが並んでいる。量子コンピュータの実用化は相当遠い将来だと考えていた研究者の間に波紋を広げているだけでなく、多くのメディアが注目し報道している。

D-Waveマシンとは一体どんな装置なのだろうか。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。本稿では、基本的な動作原理である量子アニーリングの提唱者の立場から^[1]、筆者の力量の範囲でこれらの疑問に対する解説を試みる。

2 何に使えるのか

D-Waveマシンは量子アニーリングという方式に従って動作するよう設計されている。量子アニーリングは、組み合わせ最適化問題を解くことを目的として開発された量子計算の方式である。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、その関数の最小値と、最小値を与える離散変数値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。これに限らず、組み

合わせ最適化問題は広範な応用範囲を持っている。例えば、機械学習の多くの課題が組み合わせ最適化問題として定式化できる。グーグルは、グーグルグラスに組み込まれたまばたき検出ソフトの開発に使ったとのことである。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み合わせ最適化問題として表現し、D-Waveマシンで解く試みを行っている。

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み合わせによる量子計算方式(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。しかし、現実には、D-Waveマシン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。あくまで組み合わせ最適化問題に目的を絞った装置である。量子回路モデルにおいてよく知られた素因数分解の高速実行アルゴリズム(ショアのアルゴリズム)をD-Waveマシン上で実行することは出来ない。素因数分解の難しさはネット上の暗号の基盤になっており、ショアのアルゴリズムの発見は量子コンピュータの研究が大きく広がる重要なきっかけになった。この意味で、量子アニーリングは従来の研究の主流からは外れている。とは言え、組み合わせ最適化問題は非常に幅広い応用範囲を持ち、実用的な有用性は高い。

3 量子アニーリング

量子アニーリングの考え方をかいつまんで説明しよう。組み合わせ最適化問題の汎用解法としては、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。シミュレーテッド・アニーリングでは、コンピュータ上で発生させた解の候補を確率的に色々と変えながら、その確率を変化させていく。目的関数の値を最小化することが目標なので、関数値が現在の値よりも下がるような解候補への遷移は無条件に受け入れる。一方、関数値が上がる遷移も一律には却下せず、

筆者紹介



にしもり ひでとし

1982年 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻博士課程修了。カーネギー・メロン大学研究員、東京工業大学助手、助教授などを経て、現在、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。

ある程度の確率で受け入れる。最初はその確率を1に近く取って頻繁に遷移を起こし、多くの解候補を幅広く探索する。そして、確率を次第に0に向かって減少させていって、最終的に正解ないしそれに近いものだけが残ることを目指すのである。

量子アニーリングでは、すべての解候補を同時に併存させる。量子力学的な重ね合わせである。重ね合わせ(足し上げ)の際の係数が、それぞれの解候補の量子力学的な実現確率に対応している。足し上げた全体が量子力学的な波動関数である。その波動関数を、量子力学の基本方程式であるシュレディンガー方程式によって刻一刻変化させていく。シュレディンガー方程式に出てくるパラメータをうまく制御すると、次第に正解の係数(確率)が増大していき、最後に正解だけが残るのである。すべての解候補の係数を同時に処理することが一種の大規模並列計算となっているが、通常の並列計算と違って、量子力学に従った各係数の処理の仕方が互いに強く関連し合っている。

4 D-Wave マシン

4.1 ハードウェア

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、それぞれ量子ビット(量子計算の最小単位)の1と0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が実現される。

こうして作られた量子ビットを縦に4つ、横に4つ並べ、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(図1)。

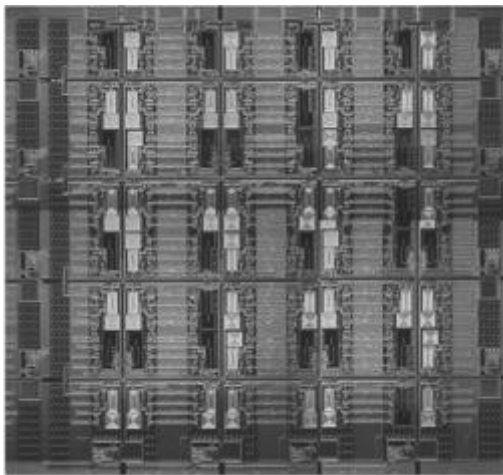


図1 基本素子には縦に4本、横に4本の細長い超伝導回路が配置されている。図1および図2はD-Wave社の提供。

結合点において、2つの量子ビットの間の結合の強さを解きたい最適化問題に応じて定められた値に設定する。

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。



図2 D-Wave マシンの外観

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(フェムトワット、 $1.7 \times 10^{-14} \text{W}$)と表示されていた。装置全体でたった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は増大しない。半導体技術に基づく通常のコンピュータとの決定的な違いのひとつである。

D-Wave Twoは512量子ビットを有しており、それらの間の結合の強さを問題に応じて指定された値に調整した後、量子効果の強さを決めるパラメータ値を理論に従って適切に制御出来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社が取得しているコンピュータ製造技術関連の特許数は、IBM、HP、富士通に次いで世界で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。

4.2 ソフトウェア

D-Wave マシン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行う必要がある。各種のベンチマークはこうして行われている。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実行できるよう設計されているとのことであるが、このレイヤーおよびそれよりさらに上位の応用ソフトについても開発が進んでいる。

5 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センセーショナルな発表をしたために、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。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。このマシンは、実際には南カリフォルニア大学に設立された量子計算センターに設置されており、学術的な研究に相当量のマシンタイムが使われている。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の装置の入出力関係を調べると、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。

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3600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。

その後、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。例えば、タンパク質の安定な構造について、格子上にアミノ酸が配置された模型を使って組み合わ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、量子効果の典型例である量子もつれの大きさを測定したところ、理論予測と良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、スピングラスと呼ばれる問題で、D-Wave Twoを使って得られた結果と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。

6 何が問題で今後どうなるのか

6.1 問題点は何か

D-Waveマシン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マシン

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マシン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、マシン自体とは直接関わりなく、量子アニーリングは従来型の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。

6.2 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いる。しかしながら、量子力学を使った方が広範囲のデータの統一的理解が可能であり、量子効果が効いてないという主張の旗色はあまり良くない。

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する人もいる。量子コンピュータとは、あくまで伝統的な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、正しいかどうかの議論に深入りすると神学論争に陥る恐れがあるが、「アルゴリズムの動作原理に量子力学が使われている」のが量子コンピュータだという定義もあり得るだろう。

6.3 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答えが違ってくる。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、高速な通常のコンピュータ上で走る最適化されたコードをD-Wave Twoと比較して、一般には一概にどちらが速いとも言えない、問題によるという報告をしている。どのような問題に対してD-Wave Twoが高速性を発揮するかについての研究が進んでおり、D-Waveマシンが得意とする問題群の特徴が明らかにされつつある。

6.4 理論的な可能性

実際のマシンを離れて理論的にはどうだろうか。素因数分解のショア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が、実は、特殊な問題については見つかったのである。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。指数関数的な大幅な高速化ではないが、データベース探索を2乗の時間スケールで高速化するグローバール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 マシン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、一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出来れば、インパクトは大きい。

6.5 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をマシン上で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大幅な低下を招いていると考えられており、今年中にリリースされる1024量子ビットの次世代機の持つ精度は相当改善されるようであり、注目される。

量子回路モデルにおいては、周りの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の誤り訂正の技術開発が進んでいる。例えば、ショアのアルゴリズムを、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。これは極めて遠大な目標と言わざるを得ず、仮に実現できるとしても、数十年以上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エネルギーが最も低い状態をたどるアルゴリズムなので、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一つである。しかしながら、熱雑音その他の影響をどうしても受けるので、それらを軽減する手法

の研究が立ち上がっている。

7 おわりに

D-Wave マシンが、実用性の高い最適化問題の一群に高速性を発揮することが明らかになれば、その問題が製品開発に関連している企業はD-Wave マシンを使わないと競争力が維持できないという事態も起こりうる。実際にそこまで行くかどうかはまだ分からないし、そうならない可能性も十分ある。まさに、ハイリスク・ハイリターンベンチャーである。モノとして購入してはいないが、D-Wave 社内部に設置されたマシンをクラウドとして使っている企業も、名だたる金融系の会社を含めて少なからぬ数に上っているという話も耳にしている。また、アマゾンの創始者のベゾス氏、ゴールドマン・サックス、CIAと深いつながりを持つIN・Q・TELなどが相当の資金を投資している。アメリカやカナダの失敗を恐れないチャレンジ精神には目を見張るばかりである。さらに、MIT Technology Reviewが選んだ2014年の最先端企業50社に、グーグル、サムソン、アマゾンなどと並んでD-Wave 社が選ばれている。ちなみに、50社の国別の内訳は、アメリカが37社、中国5社、韓国、イギリス、ドイツ各2社、イスラエル、カナダ各1社である。日本はゼロである。数十年後に日本人が現在の生活水準を維持できているかどうか、深刻に考え込んでしまう。国、企業、大学その他多くのレベルで大胆な発想の転換が必要なのかもしれない。

■参考文献

参考文献としては、量子アニーリングの最初の提唱論文[1]を除いては全般的な総説を挙げておく。原論文については、これらの中で参照されているものや、筆者のウェブページをご覧ください。

<http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~nishimori/>

- [1] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Physical Review E*, Vol. 58, p.5355, (1998)
- [2] A. Das and B. K. Chakrabarti, *Reviews of Modern Physics*, Vol. 80, p.1061, (2008)
- [3] G. Santoro and E. Tosatti, *Journal of Physics A*, Vol. 39, P. R393, (2006)
- [4] S. Suzuki, J. Inoue and B. K. Chakrabarti, *Quantum Ising Phases and Transitions in the Transverse Ising Models*, Springer (2012)
- [5] 大関真之、西森秀稔、*日本物理学会誌* Vol. 66, p. 25, (2011)