

大関 真之
西森 秀稔

〈京都大学大学院情報学研究所 606-8501 京都府京都市左京区吉田本町 36-1 e-mail: mohzeki@i.kyoto-u.ac.jp〉

〈東京工業大学大学院理工学研究科 152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1-H41 e-mail: nishimori@phys.titech.ac.jp〉

量子アニーリングというのは、量子揺らぎを巧みに利用して最適化問題を解くアルゴリズムである。量子力学を用いて最適化問題の解を与えるような情報処理を行うという意味では、量子計算のひとつの技法ともいえる。実験技術の進歩もあって、このような量子力学的な自由度を制御する研究が理論・実験両面で盛んになっている。量子アニーリングは、量子計算の中でも汎用性という意味において際だった特徴を持つ。量子アニーリングの今とこれからについて紹介していこう。

1. 序論

いくつかの記事が並んでいる中からこの記事を読んでいる読者は、どのようにしてこの記事を発見したであろうか。ある読者は目的を持って目次から辿り着いたのであろう。先月号の目次予告から期待していた方もいるかもしれない。ある読者は気軽に順々にばらばらと眺めているうちに題名を見て、はっと思う事があり読み始めたところであろう。またある読者は右往左往していくつかの記事を読んだ後に、自分の興味に合った記事が見つかった事でここまで読んでくれているのであろう。

有用な情報を得るために人が行う行動というのは様々なスタイルがある。本解説記事が中心問題として扱う最適化問題に対する手法にも様々なやり方が存在する。

最適化問題とは、普段我々が生活している中でよく直面しているある種の問題群を数学的に抽象化した概念である。例えば休日にドライブに出かけようとした時に、一番効率のよい目的地までの経路を検索するだろう。これも最適化問題のひとつである。効率と呼ぶところは人によるだろう。例えば時間の短縮であったり距離を短くする事もある。目的に応じて違いはあるものの、何らかの意味において効率を最大化しようとするのには変わりはない。問題に応じて決められた効率を表す関数を**コスト関数**と呼び、これを最大化（または最小化）するという一群の問題を総称して最適化問題と呼ぶ。経路探索の問題であれば、途中の経由地に応じて距離や時間は決まる。そのためコスト関数は多くの要素を含む多変数関数である。また経路探索のように引数として考慮する変数が離散的である場合を、特に組み合わせ最適化問題と呼ぶ。

2. 最適化問題

物理の問題の中にも組み合わせ最適化問題は数多くある。よく用いられる例として**スピングラス**の基底状態の探索問題がある。スピングラスの標準的なモデルのひとつエドワーズ・アンダーソン (Edwards-Anderson) 模型のハミルトニアン²⁾

$$H_0 = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad (1)$$

により決まるエネルギーをコスト関数として、基底状態となるスピン配位を見つけるという問題である。 σ_i^z はサイト i に置かれたパウリスピンの z 成分である。スピングラスにおいては相互作用係数の J_{ij} は正負のランダムな値が割

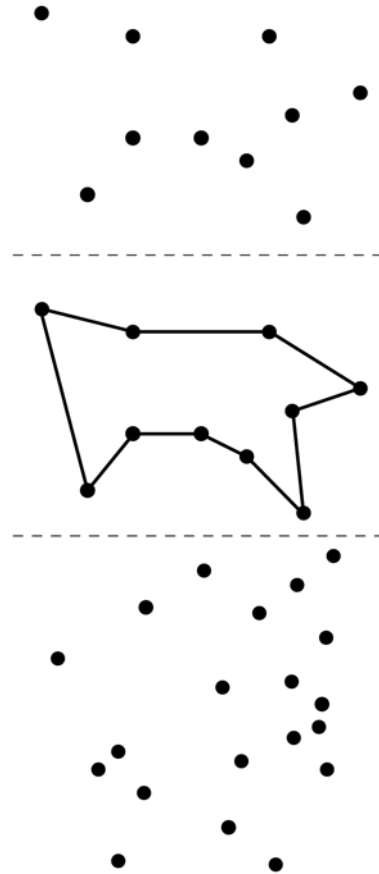


図1 巡回セールスマン問題の例 (上は $N = 10$, 下は $N = 20$)。真ん中が $N = 10$ の例の最適解。さてあなたは $N = 20$ の最適解を見つける事ができますか。解答は本号のどこかにあります。

り当てられており、 H_0 の基底状態を求めるのは一般に困難である。また、現実的な問題から生じる最適化問題のひとつ、**巡回セールスマン問題**もその最適解を求めるのは困難である事が知られている。

巡回セールスマン問題になじみのない読者もおられるかもしれないので、その概要を述べておこう。訪れるべき都市が用意されており、都市と都市を結ぶ経路の距離も与えられているとする。このとき、各都市を一度ずつ訪れて出発点に再び戻ってくる最短経路を求めよという問題である(図1)。

困難であるという言葉の意味をもう少し明確にしておこう。コンピュータ上で最適解を探索するために要する計算時間が、知られている最善のアルゴリズムを用いても、問題のサイズ N の多項式に比例する時間では解けない問題を

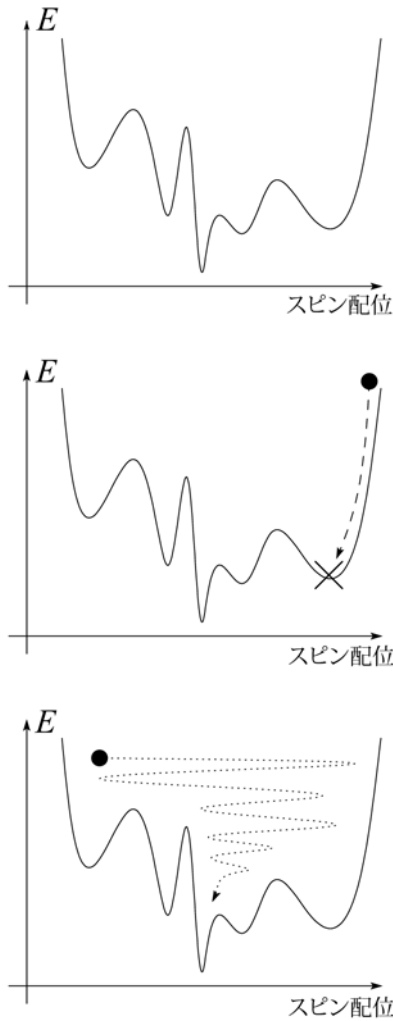


図2 スピングラス模型の複雑なエネルギー構造. 真ん中の図が最急降下法の概念図. 下図はシミュレーテッド・アニーリング.

困難な問題と呼ぶ. ここでいう問題のサイズというのは例えばスピングラスの基底状態の探索問題であれば, スピンの数である. 巡回セールスマン問題であれば, 訪れるべき都市の数である. 困難であるとされる最適化問題の多くはスピングラスの基底状態の探索問題への書き換えが可能であるため, (1) 式のハミルトニアン基底状態を求めるという問題設定で話を進める.

3. 物理の考え方による最適化

それでは, スピングラスの基底状態の探索問題について考えてみよう. スピングラスの基底状態探索が困難を伴う素朴な理由は, 概念的に図2に示すようにエネルギーが系の状態の関数として非常に複雑な形状をしているためである. ひたすら全ての状態を探すと, その手間は全てのスピン配位を調べるのであるから $O(2^N)$ 回の試行が必要となる. スピン配位を雑誌のページ数に例えたとすると, 雑誌を最初からすべて読み通して所望の記事や記述を見つけよ

うとしている状況である.

それではスピン配位は適当に決めて, そこから単純にエネルギーを下げていく配位を探すアルゴリズムを試してみると, 極小状態に捕まってしまう(図2の真ん中の図). これは最急降下法と呼ばれる. 雑誌の読み方としては, 順々に読み進めてある記事に興味関心が引かれてしまい, 他の記事は置き去りにしてしまう状況である.

さて, それではまずは気分をリラックスさせて右往左往しながらページをめくり全体を眺めて, 自分の関心に近いものをつまみ読みするというスタイルはどうだろうか. 全体とのバランスを考えて, 一番面白い記事はどれかを探るのである. これに近いのはシミュレーテッド・アニーリング(熱アニーリング)と呼ばれる方法である(図2の一番下の図). 統計力学におけるギブス・ボルツマン分布を生成するためのシミュレーションの手法を応用して, 確率的に状態探索を進める. 初期の温度を高温に保ち, 徐々に温度を下げていく. 十分にゆっくりと下げれば, 各時刻で平衡状態に近い状態に留まることが出来て最終的に基底状態(温度0での平衡状態)へと到達できる. これは物理のプロセスとして, 古典的な熱揺らぎを利用した最適化問題の解法といえる. 熱揺らぎによって, 高いエネルギーを持つ中間状態を経て別の低エネルギー状態に遷移する事ができるのである.

ゆっくりと温度の減少を制御しないと多くの低エネルギー状態をめぐる事ができないため, 計算時間はある程度必要となる. システムサイズ N を固定した場合, 温度の制御(時間依存性) $T(t)$ を以下のようなスケジュールに比例するように, もしくは遅く設定すれば, 長時間極限において確率1で基底状態を得ることができている²⁾.

$$T(t) \propto \frac{c}{\log t}. \quad (2)$$

ここで c はおよそシステムのサイズに比例する定数である. 確率的に次々に生成される状態の時系列が, 温度を少しずつ変化させても各時刻で平衡状態近傍に留まり続けるという条件から導かれる. シミュレーテッド・アニーリングの際だった特徴は, 個々の最適化問題に特有の構造を使うのではなく, 原理的にどのような問題にも適用できるという汎用性である. これは, 伝統的な情報科学からのアプローチのように, 問題に特化した解法と大きく異なる点である.

シミュレーテッド・アニーリングの基本的なアイデアは, 熱揺らぎによってエネルギーの高い中間状態を乗り越えるところにある. それでは別の機構で中間状態を乗り越えてはどうだろうか. 例えば量子揺らぎを導入して, トネル効果を利用してはどうだろうか. これが量子アニーリングの基本精神である. 量子アニーリングもシミュレーテッド・アニーリングと同様に, 以下に紹介していくように汎用アルゴリズムという側面を持つ.

4. 量子アニーリング

再びスピングラスの問題を例に挙げて、量子アニーリングについて紹介していこう。z 方向に向いたスピンを反転させる量子力学的な揺らぎとして、x 方向の横磁場を利用する。

$$H(t) = H_0 + \Gamma(t)H_1 \quad (3)$$

ここで H_0 は再びスピングラスモデルのハミルトニアンであり、 H_1 は横磁場を表すハミルトニアン

$$H_1 = -\sum_i \sigma_i^x \quad (4)$$

である。係数 $\Gamma(t)$ はシミュレーテッド・アニーリングにおける温度に相当し、量子揺らぎの強さを制御するパラメータである。初期状態 $t = 0$ では非常に大きな値を取り、時間の経過とともに小さくしていき最終的には 0 にする。最初は大きな量子揺らぎにより、数多くの状態の重ね合わせを実現して状態探索をする。そして、次第に $\Gamma(t)$ が小さくなると H_0 の相対的な重みが大きくなり、最後にはこの項の基底状態が選ばれると期待するのである^{3, 4, 5)}。

初期条件としては、 H_1 の基底状態を用いる。すべてのスピンの x 方向に向いた状態である。z 成分を対角化する表示で具体的に波動関数を書けば、横磁場によって各 Ising スピンが上下の向きで重ね合わさった以下のような状態となる。

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \prod_{i=1}^N (|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i). \quad (5)$$

この初期状態から出発して、ハミルトニアンの時間変化に従ってシュレーディンガー方程式で時間発展させていく。量子アニーリングのアルゴリズムは、以上のように比較的単純である。

量子アニーリングでは横磁場によりスピンの向きを変化させるような量子揺らぎが導入されている。シミュレーテッド・アニーリングにおける熱揺らぎの役割を、横磁場が担っているという訳だ。シミュレーテッド・アニーリングと同様に、ゆっくりと量子揺らぎを制御すると、所望の H_0 に対する基底状態が得られるだろう。どのくらいゆっくりと制御すればよいのだろうか。量子アニーリングの基礎として重要な問題であるが、幸い明確な解答が出ている⁴⁾。横磁場の強さ $\Gamma(t)$ を、次のように時間 t のべき

$$\Gamma(t) \propto t^{-c/N} \quad (6)$$

で減衰させれば、またはそれよりもゆっくりと制御すれば、長時間極限で系の波動関数が H_0 の基底状態に確実に収束し、最適化問題の正解が得られる。先ほどのシミュレーテッド・アニーリングの時と同様に c はシステムのサイズに比例する定数である。べき則 (6) は、シミュレーテッド・ア

ニーリングにおける対数の逆数則 (2) より減衰の仕方が速い。この意味において、量子アニーリングは古典的な熱揺らぎを利用したシミュレーテッド・アニーリングより高速である。ただし、量子アニーリングおよびシミュレーテッド・アニーリングにおけるこれらの結果は、どのような問題に対しても成立する（すなわち、一番条件の悪い問題に対しても成立する）いわゆる最悪評価である。実際の問題に適用した場合には、この最悪評価よりも速いスケジュールによる横磁場の制御を行っても最適解に効率的に到達する可能性は残されているが、問題ごとに個別に考える必要がある。上記の収束条件は様々な場合についての導出法が得られている。量子的な制御を古典計算機でシミュレートするために、量子モンテカルロ法を利用した場合や拡散型のモンテカルロ法の場合に加えて、実時間シュレーディンガー方程式に従った場合についても同様の収束条件が導かれる。前者の 2 つの場合には、シミュレーテッド・アニーリングのような確率過程の議論から導かれるのに対して、後者は以下に触れる量子力学そのものの性質を利用した方法から導出される。この一見異なるアプローチから普遍的に同様の条件が導かれるという事実は注目に値するだろう。

量子アニーリングとは、上記のように量子揺らぎにより最適化問題の正解を見つける汎用アルゴリズムの事を呼ぶ。また上記の量子アニーリングでは横磁場を導入するものを例としてあげたが、一般的にはどのような量子揺らぎを導入してもよい。そしてシミュレーテッド・アニーリングと同様にゆっくりと制御する事を必ずしも要求はしていない。実は横磁場による量子揺らぎでは、図 2 にあるようなエネルギーの山と谷をトンネル効果によって急激に通るような効果はあまり期待できない。そのため、どのような量子揺らぎを導入するとより高速で汎用的なアルゴリズムとなりうるか、という問題は未だ解決されていない。ここではそのような発展的問題は紹介にとどめて、シミュレーテッド・アニーリングのようにゆっくりとした量子揺らぎの制御を行った場合に焦点を絞って解説を続けていこう。量子アニーリングの枠組みの中で、非常にゆっくりとした制御で確実に最適化問題の正解を得る手法を特に**量子断熱計算**と呼ぶ⁶⁾。歴史的には量子アニーリングが大枠として提案された後に、具体的な問題設定として扱いがよりしやすい量子断熱計算の研究が量子計算の分野では盛んとなった。

5. 量子断熱計算

量子断熱計算は、以下に示すように元々の量子アニーリングの格好と多少異なる横磁場の導入のさせ方を取る。それはより現実的な応用を意識してきた背景がある。実際には最適解を求めるために時間を無限にかけるわけにはいかない。そこで、有限の時間 τ で量子揺らぎをなくすように制

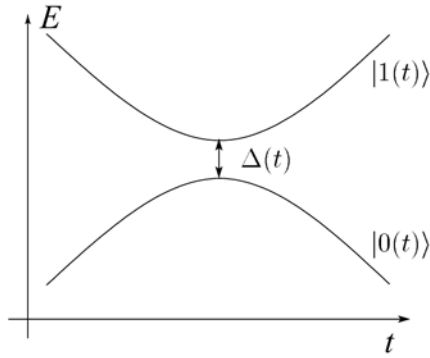


図3 量子系のエネルギーギャップ. エネルギー準位が接近しているところでは状態遷移が起こりやすい.

御する, 次のような時間依存のハミルトニアンを採用する.

$$H(t) = \frac{t}{\tau} H_0 + \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) H_1. \quad (7)$$

量子揺らぎの項 H_1 の係数を 1 から 0 に有限の時間 τ ($t: 0 \rightarrow \tau$) で落とすと同時に, 最適化したいコスト関数 H_0 の係数を同じ時間内に 0 から 1 に上げるのである. τ を大きく取りゆっくり時間をかけて状態変化させると, 断熱定理により初期の自明な基底状態 (5) から始めて, 各時刻における瞬間的な基底状態を連続的にたどり, 最後には H_0 の基底状態 (すなわち解きたい最適化問題の解) に到達すると期待される.

量子断熱計算において量子系のエネルギー準位を時系列で追いかけた時に, 基底状態と励起状態のエネルギー準位が接近してくる場合がある. 近づけば近いほど励起確率が高くなるため, 基底状態を保てなくなる. そこで, 励起する確率を低く保てるようにゆっくりと量子系を制御する必要がある. 非常に大きな τ の場合, 時刻 t における波動関数 $|\psi(t)\rangle$ はその瞬間の基底状態 $|0(t)\rangle$ に近い. つまり $|\langle 0(t)|\psi(t)\rangle| \approx 1$ となるような条件を求めればよい.

これを定量的に表記したのが断熱定理であり, $|\langle 0(t)|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \epsilon^2$ ($\epsilon \ll 1$) となるためには, 以下の条件を満たせばよい⁷⁾.

$$\frac{\max \left| \langle 1(t) | \frac{dH(t)}{dt} | 0(t) \rangle \right|}{\min \Delta(t)^2} = \epsilon. \quad (8)$$

ここで $|1(t)\rangle$ は各瞬間における第一励起状態であり, $\Delta(t)$ は基底状態と第一励起状態とのエネルギーギャップを表す (図3). また \max, \min は横磁場の制御を行う間 ($0 \leq t \leq \tau$) に関して取る. 量子断熱計算に要する時間は, 上記の式を使ってハミルトニアン (7) の時間微分から生じる τ を評価する事により, 以下のようにエネルギーギャップの最小値で見積もる事ができる.

$$\tau \sim \frac{1}{\min \Delta(t)^2}. \quad (9)$$

断熱定理を基礎とするならば, 最適化問題を量子アルゴリズムで解くためにどのくらいの時間を要するかを評価するには, エネルギーギャップを解析すればよいことが分かった. 即ち量子アルゴリズムにおける困難さの一端を表現するのがエネルギーギャップであるということを示唆している. エネルギーギャップが小さくなると, 最適化に要する時間が長くなる. 特に系のサイズが大きい極限でどのように振舞うかは興味深い.

量子系のエネルギーギャップの振る舞いは, 量子相転移の有無と関わっている. 量子相転移が起こる場合, 量子相転移点ではエネルギーギャップがサイズ無限大の極限でつぶれる事が知られている⁸⁾. このことから, 個々の最適化問題に対する量子断熱計算の性能評価の問題は, 対応する模型の量子相転移点付近でのエネルギーギャップの振る舞いを調べる事に帰着される. そのため, 最適化問題の量子力学的な解法の研究が量子相転移の基礎研究と結びついているのである.

6. エネルギーギャップ

それでは, 量子相転移点付近でエネルギーギャップが指数関数的に減衰していくとどうなるだろうか. 量子断熱計算の立場で断熱定理による評価 (9) に立脚すれば, そのような場合に要する計算時間が問題のサイズに対して指数関数的に増大し, 問題の解決は困難になる. そのような具体例のひとつとしてランダムエネルギー模型に対する量子断熱計算が挙げられる.

ランダムエネルギー模型を説明するため, やや天下りではあるが以下のハミルトニアンを考えよう.

$$H_0 = - \sum_{\{i_p\}} J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \sigma_{i_1}^z \sigma_{i_2}^z \cdots \sigma_{i_p}^z. \quad (10)$$

ここで, 和は N 個の中から p 個のスピンを選ぶすべての組み合わせについて取る. 相互作用 J_{i_1, i_2, \dots, i_p} は, ガウス分布に従うランダム変数である. 式 (10) で極限 $p \rightarrow \infty$ を取ったものがランダムエネルギー模型である. ランダムエネルギー模型と呼ばれるのは, この極限の下で, エネルギー固有値が独立なガウス分布に従う事が知られているためである. この系に横磁場の効果を取りこみ, エネルギーギャップに関する解析を行う事ができる⁹⁾. その結果によると, ギャップが $\min \Delta(t) \propto \exp(-bN)$ ($b > 0$) となり, したがって式 (9) によりシステムサイズに対して指数関数的に長い時間がかかる事が分かる. いわゆる困難な問題であるということを示唆している.

他にも, exact cover と呼ばれる困難な最適化問題に対応したスピングラス模型のエネルギーギャップの評価を行った研究がある. この場合も断熱的な時間変化を行うと指数関数的に時間がかかる事が明らかにされている. 古典的な

計算において困難なある種の問題群が量子断熱計算を使っても困難な問題であったということであり、残念ではあるが驚くには値しない。

注意したいのは、これらはいくまで限られたいくつかの特別な例であり、全ての古典的に困難な問題が量子断熱計算でも困難であるかどうかは分かってないという事実である。むしろ一例でも、古典的には困難な問題が量子的なアルゴリズムで指数関数より短い時間で解ける場合を見つける事が将来に残された重要な問題である。¹これまで考えてきたのは横磁場を用いた量子揺らぎの制御であり、他にも量子揺らぎの導入の仕方は考えられる。それは量子相転移の性質を変える余地があるということである。量子断熱計算によって古典的に困難な問題を指数関数時間より短い多項式時間内で解けるという可能性はまだ残されているのだ。

もう一つの注意点は、量子アニーリングとは各時刻の瞬間的な基底状態をたどる断熱変化を必ずしも想定していないより広い枠組みを指す。実際に統計力学の知見を活かした断熱定理に寄らない新しいタイプの量子アニーリングも提案されている^{5, 10)}。他にも励起状態も含む混合状態からスタートさせた量子アニーリングも考える事は出来るのだ。それらがどのような性質を有するのか、より効率的に基底状態に到達する事ができるかは未解決の問題である。

7. 残留エネルギー

ここまでは、ゆっくりとパラメータを制御する量子断熱計算を行う話を進めてきた。しかしながら実際の応用では、断熱条件を必ずしも満たさずにしかも有限時間内で計算を終わらせるとき、どれだけの効率があるのかが重要な問題になる。つまり有限時間 τ の量子アニーリングによって、最終的に得られた状態の中にどれだけの割合で基底状態が生成できるかを調べるのは興味深い課題である。

よく用いられるのは、最終的に得られた状態のエネルギーと真の基底エネルギーとの差（**残留エネルギー**）という形で評価する方法である。有限サイズの問題に対しては、断熱定理による議論では残留エネルギー E_{res} が

$$E_{\text{res}} \sim \frac{1}{\tau^2} \quad (11)$$

とスケールされることが知られている⁹⁾。しかしながら問題のサイズが非常に大きくなり、量子相転移が絡むと上記の評価とは異なった残留エネルギーの振る舞いが出てくる。このようなサイズが大きい場合の評価に対しては、未だに系統的な解析手法は確立しておらず、数値計算による評価が大半である。

¹古典計算機理論によれば、ひとつの NP 完全問題を比較的短い時間で解くことができれば、他の全ての NP 完全問題を同程度の短い時間で解くことができるようになることがわかっている。その意味で量子的なアルゴリズムでひとつでも NP 完全な問題を解くことが出来るということは、産業界全体のみならず人類に非常に大きな恩恵を与える事を意味する。

そのような中、最近ちょっと変わった方向の定性的な解析手法が提案されている。得られた最終状態に見られる基底状態との誤差は、量子相転移点を通じた際に生じる、空間的に一様な状態からのズレ（欠陥）によるものであると解釈できる。このように相転移点を通るダイナミクスについての定性的な議論として、キッブル・ズレック (Kibble-Zurek) 機構によるものが知られている。元々の議論は古典的な熱相転移に関するものであったが、それを量子相転移の場合に拡張して残留エネルギーの誤差の評価を行うという解析的研究も盛んに行われている⁹⁾。

8. 古典統計力学と量子力学

最適化問題を解くために、量子アニーリングは量子揺らぎを、シミュレーテッド・アニーリングは熱揺らぎを用いる。どちらも最適解への収束を保障するような確実な実行のためにはパラメータの時間変化をゆっくりと行う必要がある。量子アニーリング（特に量子断熱計算）は基底状態近傍をたどるように、シミュレーテッド・アニーリングは平衡状態近傍に留まるように系を制御している事になる。揺らぎの性質が全く違うために、それぞれのダイナミクスは異なる。しかしながらこれらの中に何か関係はないのだろうか。この節ではその関係を具体的に構築してみよう。

シミュレーテッド・アニーリングは、マスター方程式に従う確率的なダイナミクスによって最適な状態を探索する。興味深い事に、平衡状態周りでの上述の確率的なダイナミクスは、ある量子系の基底状態近傍での振る舞いへと変換できる事が知られている。まずスピングラス模型の性質から、以下のようにハミルトニアンを局所的な演算子で分解する。

$$H_0 = \sum_j H_j. \quad (12)$$

ここで H_j は σ_j^z を含む部分的なハミルトニアンである。具体例として、エドワーズ・アンダーソン模型 (1) の場合を見てみよう。

$$H_j = - \sum_{k \in j} J_{jk} \sigma_j^z \sigma_k^z. \quad (13)$$

添え字の k は j と隣り合うスピンを表す。このような分解を行い、以下のような量子系を表すハミルトニアンを考える。

$$H_q^{\text{SG}}(t) = -\chi(t) \sum_j \left(\sigma_j^x - e^{\beta(t)H_j/2} \right). \quad (14)$$

ここで $\chi(t)$ はある定数 p を使って定義された量 $e^{-\beta(t)p}$ である。ここでは $\beta(t)$ は任意の t の関数であるが、後に式 (12) により指定される古典系の平衡状態における逆温度と対応するものである。上記の特殊な量子系のハミルトニアンは以下のような基底状態を持つ事が示される。

$$|\Psi_{\text{eq}}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z(t)}} \sum_{\sigma} e^{-\beta(t)H_0(\sigma)/2} |\sigma\rangle. \quad (15)$$

ここで分母にある $Z(t)$ は分配関数に相当する量である。この基底状態における物理量 $A(\sigma)$ の量子力学的な期待値 $\langle \Psi_{\text{eq}}(t) | A(\sigma) | \Psi_{\text{eq}}(t) \rangle$ が平衡状態の熱平均値に一致することがわかる。このようにして量子系の基底状態の波動関数を古典系の平衡状態の確率分布関数と対応させることができる。よって H_0 は解きたい最適化問題を指定するハミルトニアンとすれば、平衡状態へ収束するシミュレーテッド・アニーリングの確率的なダイナミクスを、その平衡状態に対応する基底状態を持つ特別な量子系のダイナミクスへと変換できるという事がわかる。我々はシミュレーテッド・アニーリングと量子アニーリングの意外な接点に遭遇したのだ。その接点をもう少し細かく見てみよう。

上記のハミルトニアンは式 (15) を基底状態に持つだけでなく、以下に示すようにいくつかの点で量子アニーリングに用いた量子系のハミルトニアン (3) との類似性を持つ。まず高温極限 $\beta \rightarrow 0$ に対応する量子系のハミルトニアンは、

$$H_q^{\text{SG}}(t) = - \sum_j (\sigma_j^x - 1) \quad (16)$$

となり、横磁場の項だけが残る。つまり量子アニーリングにおける H_1 に対応する。この場合の基底状態はもちろん式 (5) と同等な一様分布である。これは式 (15) で $\beta \rightarrow 0$ としても明らかである。逆に低温極限 $\beta \rightarrow \infty$ の場合は、量子系のハミルトニアンは以下ようになる。

$$H_q^{\text{SG}}(t) \sim \chi(t) \sum_j e^{\beta(t) H_j / 2}. \quad (17)$$

この場合の基底状態は、式 (15) から直接、あるいは式 (12) を経由しても分かるように H_0 の基底状態に対応する。つまりシミュレーテッド・アニーリングにおける温度の操作を、横磁場の制御による量子アニーリングのダイナミクスに翻訳する事ができる事が分かる。

この対応関係に注目して、断熱定理を上記の量子系 (14) に適用すると、驚くべき事にシミュレーテッドアニーリングの温度制御の条件 (2) を再現する^{4, 5)}。この結果により、もっとも一般的な状況で最悪評価をする限り、量子アニーリング (特に量子断熱発展) 及びシミュレーテッド・アニーリングの本質は、それぞれのダイナミクスにおける固有状態近傍に留まるようにダイナミクスを制御し続けるという点で共通している事が分かる。前者は基底状態近傍に、後者は平衡分布近傍に留まるように制御するという点である。量子アニーリングは量子力学の性質を使っているが、その本質部分が統計力学と結びついているという点は興味深い。この点に注目して統計力学の手法を量子ダイナミクスの研究や量子アニーリングの改善法などの応用研究に持ち込むことも可能であろう。ゆっくりと制御する事で確実に最適解へ到達する量子断熱計算は平衡状態近傍のダイナミクスを利用している。量子アニーリングでは、必ずしも断

熱発展を想定する必要はない。平衡状態へ到達する事ができる、途中は必ずしも平衡状態近傍ではない、非平衡ダイナミクスを利用してもかまわないのだ。言い換えれば断熱定理の呪縛から逃れて、より自由な量子アルゴリズムを設計する際に、非平衡統計力学の知見が活かせるという可能性を示しているのである⁵⁾。例えば、非平衡ダイナミクスと平衡状態の性質を結びつける Jarzynski 等式の性質を利用した挑戦的な手法も提案されている¹⁰⁾。

9. 結び

量子アニーリングというパラダイムを通じて、最適化問題という実用的に重要な問題が、量子力学における動的制御という物理の基本的な問題と結びつくことを見てきた。量子アニーリングは、量子力学における状態の動的変化、量子相転移、そして平衡統計力学、さらには非平衡統計力学とも関わる多彩な側面を持っている。その意味で量子アニーリングの理論研究の興味は尽きない。

また最近では、量子計算機の実装技術として量子アニーリングの性能評価を行う研究も現れている。SQUID を用いて実現された 8 量子ビットが載ったチップ上で、横磁場に相当するパラメータを時間変化させることにより、高い確率で最適化問題が解けることが示されている¹¹⁾。今後このような実装研究の成果を踏まえ、理論的に評価すべき実装上の問題やより効率を高めるための新しいアイデアが生まれるかもしれない。その時、量子アニーリングの研究は新たな曲面を迎えるだろう。量子制御技術の向上により、量子力学的な自由度を生かした最適化手法は少し前までよりも現実的な意味を帯びてきた。量子アニーリングに基盤を置く量子計算の実現は、必ずしも遠い夢物語ではないのかもしれない。

量子力学の基礎に関わる研究は直接的な応用と距離があるなしかかわらず、私たちの知的興味を刺激してやまない。この記事を読んで、伝統的な意味での量子計算とはひと味違う量子アニーリングの世界に興味を持ってくださった読者がいれば誠に幸いである。

参考文献

- 1) M. R. Garey, and D. S. Johnson, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*, Freeman, San Francisco, (1979).
- 2) 西森 秀稔: スピングラス理論と情報統計力学 岩波書店 (1999); H. Nishimori: *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction*, Oxford Univ. Press, Oxford, (2001).
- 3) T. Kadowaki, and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- 4) S. Morita, and H. Nishimori, *J. Math. Phys.* **49**, 125210 (2008)
- 5) M. Ohzeki, and H. Nishimori, to appear in *J. Comp. Theor. Nanoscience*.

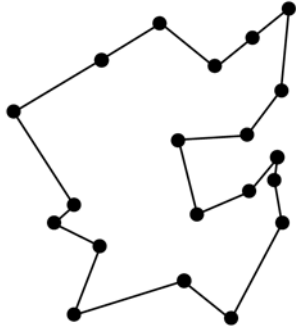
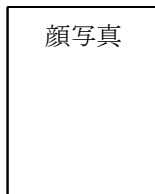
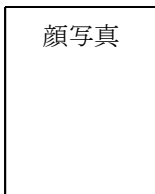


図4 図1の巡回セールスマン問題 ($N = 20$) の最適解. 一般的に最適解はこのような周辺をたどる形状を取る事が多い.

- 6) E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, e-print arXiv:0001106 [quant-ph].
- 7) A. Messiah: *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, (1976).
- 8) S. Sachdev: *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, (1999).
- 9) 鈴木 正: 組み合わせ最適化問題と量子アニーリング-量子断熱発展の理論と性能評価-, 「物性研究」2008年7月号.
- 10) M. Ohzeki, Phys. Rev. Lett. **105**, 050401 (2010).
- 11) R. Harris et al, Phys. Rev. B **81**, 134510 (2010).

著者紹介



大関真之氏: 専門は統計力学. 新天地にきた事を契機に色々な話題へ幅を広げようと思います. 統計力学の明るい未来のために.

西森秀稔氏: スピングラスを中心とした統計力学の研究を長年にわたって行ってきましたが, そろそろ老後に備えて趣味の幅を広げたいと思っているこのごろです.

(2010年11月30日原稿受付)

Quantum Annealing

Masayuki Ohzeki and Hidetoshi Nishimori

abstract: Quantum annealing is a generic algorithm intended for solving optimization problems by using quantum fluctuations. This algorithm can be regarded as a generic technique in quantum computation. Quantum annealing is very simple and yet applicable in principle to any optimization problems. It is also closely related to quantum adiabatic algorithm. In this article, we elucidate the current status and present a future outlook for quantum annealing.