テーマ解説

量子アニーリングの基礎と応用事例の現状

田中 宗^{*1,*2,†}, 棚橋 耕太郎^{*3}, 本橋 智光^{*3}, 高柳 慎一^{*3}

Basics and Applications of Quantum Annealing

Shu TANAKA^{*1,*2,†}, Kotaro TANAHASHI^{*3}, Tomomitsu MOTOHASHI^{*3} and Shinichi TAKAYANAGI^{*3}

Synopsis: Quantum annealing (QA) is a promising calculation method for obtaining a better solution to combinatorial optimization problems. QA is a natural computation technique proposed in the context of statistical physics in 1998. In 2011, the world's first commercial machine realizing QA experimentally was released. After that, the development of hardware and software has been exhaustive, and the studies on application search have been done using commercial QA machines. In this paper, we first explain the basics of QA without assuming the knowledge of statistical physics and quantum physics. We also show a couple of examples of application studies on QA. In addition, existing problems and overcoming other methods are explained.

Keywords: quantum annealing, combinatorial optimization problem, Ising model, quadratic unconstrained binary optimization, natural computing

(Some figures in this article may appear in colour only in the electronic version)

1. 緒 言

近年、量子アニーリングと呼ばれる計算技術が注目を集めている。量子アニーリングは、膨大な選択肢からベストを探索するという、いわゆる組合せ最適化問題の高速・高精度処理が期待される計算技術の一つである。組合せ最適化問題は、離散変数を引数とする実数関数（コスト関数）が与えられた制約条件を満たし、かつ最大値もしくは最小値を取る離散変数の組合せを求める問題と見ることができる。組合せ最適化問題は多様な場面で現れるため、これを高速かつ高精度に処理できる計算技術の開発は極めて重要である。

量子アニーリングは、シミュレーテッドアニーリングの類似概念として、1998年に提案された計算技術である^{1,4)}。シミュレーテッドアニーリングや量子アニーリングは物理

学に基づく計算技術である。これらの方法ではまず、コスト関数をエネルギー関数とみなし、それぞれの解候補を物理的状態とみなす。この見方を導入することで、物理学の概念を情報処理の問題に利用することが可能になる。シミュレーテッドアニーリング⁵⁻⁷⁾では、外部から制御するパラメータとして温度を導入する。温度は、状態間の遷移を引き起こす熱揺らぎ効果の強さを調整するパラメータである。シミュレーテッドアニーリングの初期段階では、高い温度に設定し、強い熱揺らぎ効果によって状態遷移を促進させる。その後、徐々に温度を下げることで、熱揺らぎを弱める。これにより状態遷移は緩やかになる。初期段階では解の探索空間を広めに取り、それを徐々に狭めていくという操作に対応する。このようにして得られた最終状態を、シミュレーテッドアニーリングが得た答えとみなす。シミュレーテッドアニーリングでは、温度による熱揺らぎ効果による状態間の遷移を用いて解を探索するという手続きを行う。それに対し、量子アニーリングは量子揺らぎ効果による状態間の遷移を用いて解を探索するという手続きを行う。

量子アニーリングの提案論文⁸⁾はもともと理論物理学の研究として報告された。この論文では、イジングモデル（3章にて詳述）と呼ばれる統計力学モデルの動的特性を検討している。同一のイジングモデルについて、熱揺らぎ効果と量子揺らぎ効果それぞれについて、徐々に揺らぎ効果を弱めていった場合に、イジングモデルの安定状態がどのように得られるかを詳細に検討している。

Received May 31, 2018

^{*1} 早稲田大学 グリーン・コンピューティング・システム研究機構
〒162-0042 東京都新宿区早稲田町 27

Green Computing Systems Research Organization, Waseda University,
27 Waseda-cho, Shinjuku-ku, Tokyo 162-0042, Japan

^{*2} 国立研究開発法人科学技術振興機構 さきがけ
〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8

JST PRESTO, 4-1-8 Honcho, Kawaguchi, Saitama 332-0012, Japan

^{*3} 株式会社リクルートコミュニケーションズ

〒104-0054 東京都中央区勝どき 1-13-1

Recruit Communications Co., Ltd., 1-13-1, Kachidoki, Chuo-ku,
Tokyo 104-0054, Japan

[†] E-mail: shu.tanaka@aoni.waseda.jp

DOI: 10.2221/jcsj.53.287

その後、量子アニーリングを実験的に実現するハードウェアとして、超伝導集積回路技術を用いた量子アニーリングマシンが開発された⁸⁾。このマシンは、イジングモデルに量子揺らぎとして横磁場効果を導入し、それを徐々に弱めることができる。組合せ最適化問題はイジングモデルを用いて定式化することが可能であるため、この量子アニーリングマシンは組合せ最適化専用マシンとして期待が寄せられるようになった。世界初の商用量子アニーリングマシンは 2011 年に発表され、その当時の量子ビット搭載数は 128 個であった。その後、2013 年、2015 年、2017 年にハードウェアのアップグレードをするに従い、量子ビット数は 512 個、1152 個、2048 個と段階的に増加してきた。最新の量子アニーリングマシンでは、通常の量子アニーリングに付加的な機能としてアニールオフセット機能⁹⁾やリバースアニーリング機能¹⁰⁾など、新しい機能が搭載されている。また最近では、量子アニーリングとは異なる新しいタイプのイジングモデル専用ハードウェアが活発に開発されており¹¹⁻¹⁴⁾、量子アニーリングおよびイジングモデル型情報処理への強い期待が寄せられている。

本解説ではまず、組合せ最適化問題の基礎を紹介する。次に、量子アニーリングマシンの動作原理を述べ、現状の応用事例の状況について紹介する。最後に、量子アニーリングや周辺技術に対する将来展望を述べる。

2. 組合せ最適化問題

最適化問題とは、制約条件を満たす解の中で目的関数を最小/最大にする解を求める問題である。最適化問題は、目的関数の構造や目的関数の引数である決定変数の取り得る値によって分類することができる。目的関数が線形関数で、連続変数を対象にした問題を線形計画問題、目的関数が非線形な関数である問題を非線形計画問題と呼ぶ。また、決定変数が整数の場合を対象にした問題を整数計画問題と呼び、組合せ最適化問題はこの問題群に属している。その中でも特に、決定変数が 0/1 の 2 種類の値から選ばれる場合を 0-1 整数計画問題と呼ぶ。

線型計画問題の厳密解法には多項式時間アルゴリズムが存在し、非常に多くの変数でも既存ソルバーで実用的な時間内に解けることが確かめられている^{15,16)}。一方、整数計画問題の厳密解法には、分枝限定法¹⁷⁾が主な解法として知られているが、これは計算時間が指数的に長くなってしまいうという、いわゆる組合せ爆発の問題を抱えている。したがって、変数の数が多い場合には、近似解法や問題に応じた専用解法を用いることになる。いま注目を集めている量子アニーリングマシンを始めとしたイジングモデル型情報処理では、解きたい組合せ最適化問題を制約なし 0-1 整数計画問題かつ、2 次までの決定変数の項のみの形へ帰着させ、専用マシンで解くという手続きを経る（参照：3 章）。ただしここで 3 次以上の項があったとしても原理的

には 2 次までの項に変換することは可能である¹⁸⁾。

3. イジングモデル

現状の量子アニーリングマシンは、イジングモデルと呼ばれる統計力学モデルに対し、横磁場と呼ばれる量子揺らぎを表す効果を導入し、それを徐々に弱めることが可能な実験装置である（参照：4 章）。したがって、量子アニーリングマシンを用いて組合せ最適化問題を解く場合、対象とする問題をイジングモデルで定式化する必要がある。この章ではまず、イジングモデルについて紹介し、次にイジングモデルを使って組合せ最適化問題を表現する方法を述べる。

無向グラフ $G = (V, E)$ 上に定義されたイジングモデルのエネルギー関数は、スピン変数 s_i の取りうる値を 2 値、すなわち、 $s_i = \pm 1$ として、

$$E_{\text{Ising}}(\{s_i\}_{i=1}^N) = -\sum_{i \in V} h_i s_i - \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} s_i s_j \quad (1)$$

で与えられる。ただしここで $|V| = N$ である。また、 h_i および J_{ij} はそれぞれ強制力および相互作用を表す値であり、共に実数値である。このとき組合せ最適化問題は、エネルギー関数を最小にするスピン変数の組 $\{s_i\}_{i=1}^N$ を探索する問題と表現されることになる。簡単な例として、頂点数 2 のグラフ上に定義されるイジングモデルを考えよう。このときエネルギー関数は、

$$E_{\text{Ising}}(s_1, s_2) = -h_1 s_1 - h_2 s_2 - J_{12} s_1 s_2 \quad (2)$$

で与えられる。このとき、2 個のスピン変数の値とエネルギー値の関係は Table 1 で与えられる。

仮に $h_1, h_2, J_{12} > 0$ とすると、 $s_1 = s_2 = +1$ のときにエネルギー最小値が実現される。ここで $\{h_i\}$ の意味を考えるために、 $J_{12} = 0, h_1 \neq 0, h_2 \neq 0$ の場合を考える。このとき、 h_1, h_2 の符号と同符号のスピン変数を取るとエネルギーが低くなることが直ちに理解できる。このことから、 $\{h_i\}$ は強制力を表すことがわかる。次に $\{J_{ij}\}$ の意味を考えるために、 $h_1 = h_2 = 0, J_{12} \neq 0$ の場合を考える。このとき、 $J_{12} > 0$ であれば、2 個のスピン変数の値が等しいときにエネルギーは低くなり、逆に $J_{12} < 0$ であれば、2 個のスピン変数の値が異なるときにエネルギーが低くなることがわかる。したがって、 $\{J_{ij}\}$ が相互作用を表していることがわかる。

取り扱う問題によっては、 ± 1 を取るスピン変数 s_i ではなく、0 または 1 を取るバイナリ変数 x_i を用いて下記の

Table 1 Relation between two spin variables and energies.

s_1	s_2	$E_{\text{Ising}}(s_1, s_2)$
+1	+1	$-h_1 - h_2 - J_{12}$
+1	-1	$-h_1 + h_2 + J_{12}$
-1	+1	$+h_1 - h_2 + J_{12}$
-1	-1	$+h_1 + h_2 - J_{12}$

コスト関数を考えたほうが容易な表現になる場合がある。

$$E_{\text{QUBO}}(\{x_i\}_{i=1}^N) = -\sum_{i \in V} a_i x_i - \sum_{(ij) \in E} b_{ij} x_i x_j \quad (3)$$

0 または 1 を取るバイナリ変数 x_i の二次の項までからなる上記のコスト関数の形式は、Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO ; 制約なし 2 値変数 2 次形式最適化) と呼ばれる。ただしここで、 a_i および b_{ij} は一次の項、二次の項の係数であり、共に実数値である。スピン変数 $s_i = \pm 1$ とバイナリ変数 $x_i = 0, 1$ とは、 $x_i = \frac{1}{2}(s_i + 1)$ の関係が成り立つため、イジングモデルのエネルギー関数と、上記の QUBO コスト関数は、

$$h_i = \frac{a_i}{2} + \frac{1}{4} \left(\sum_{j \in \partial_i} b_{ij} \right), \quad J_{ij} = \frac{b_{ij}}{4} \quad (4)$$

の条件のもと、等価であることが示せる。ただしここで ∂_i は頂点 i に隣接する頂点の集合である。イジングモデルのエネルギー関数と、上記の QUBO コスト関数との間に定数分のずれが生じるが、これはエネルギーの基準をどこに設定するかに関係する項であり、物理的性質に影響を与えない。

組合せ最適化問題はイジングモデルのエネルギー関数や QUBO を用いて表現することができる¹⁹⁾。しかしイジングモデルないしは QUBO は、組合せ最適化問題一般に存在する制約条件を含まないものである。したがって、イジングモデルのエネルギー関数や QUBO に、元の組合せ最適化問題に存在する制約条件に相当する効果を導入する必要がある。制約条件（制約等式、制約不等式）の入れ方については、文献 19 に具体的な例が記載されている。また、5 章で取り扱う具体例でもその方法を紹介しているので、参考にされたい。また、論理関数とイジングモデルの関係については文献 18 に詳しい。

4. 量子アニーリングマシンの動作原理

この章では、現存の量子アニーリングマシンの動作原理について紹介する。量子アニーリングマシンは、イジングモデルに対して量子揺らぎとして横磁場効果を導入し、それを徐々に弱めていくという方法を採用している。量子力学系のダイナミクスは理想的には、時刻 t における時間に依存するハミルトニアンを $\mathcal{H}(t)$ 、波動関数を $\Psi(t)$ としたとき、シュレディンガー方程式

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \mathcal{H}(t) \Psi(t) \quad (5)$$

に従う。ここで理想的な状況とは、絶対零度、外界との相互作用が無い孤立系であるという意味である。量子アニーリングの場合、時間に依存するハミルトニアンは下記のようなになる。

$$\mathcal{H}(t) = A(t)\mathcal{H}_c + B(t)\mathcal{H}_q, \quad 0 \leq t \leq \tau \quad (6)$$

ただしここで $A(t)$ および $B(t)$ は、0 から 1 へ単調増加する関数、1 から 0 へ単調減少する関数である。また $\mathcal{H}_c$ は古典ハミルトニアン、 $\mathcal{H}_q$ は量子ハミルトニアンである。古典ハミルトニアン $\mathcal{H}_c$ は、3 章で導入したイジングモデルのエネルギー関数の値を対角行列の各成分として置いた形になっている。具体的には、

$$\mathcal{H}_c = -\sum_{i \in V} h_i \sigma_i^z - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad (7)$$

で与えられる。ただしここで、

$$\sigma_i^z = I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes \cdots \otimes I \quad (8)$$

$$\sigma_i^z \sigma_j^z = I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes \cdots \otimes I \quad (9)$$

のように、クロネッカーの直積記号を省略した記法がよく用いられる。上の式の σ^z および I はパウリ行列の z 成分および単位行列である。すなわち、下記ようになる。

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

続いて量子ハミルトニアン $\mathcal{H}_q$ について述べる。現存の量子アニーリングマシンの場合、横磁場と呼ばれる量子揺らぎを導入している。したがって量子ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_q = -\Gamma \sum_{i \in V} \sigma_i^x \quad (11)$$

で与えられる。ただしここで、

$$\sigma_i^x = I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^x \otimes I \otimes \cdots \otimes I \quad (12)$$

であり、先程と同様、クロネッカーの直積を省略した記法を用いている。上の式の σ^x はパウリ行列の x 成分、すなわち下記のように与えられる。

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

簡単な例として、3 章と同様、頂点数 2 のグラフ上に定義されるイジングモデルを考えよう。このときそれぞれのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_c = \text{diag}(-h_1 - h_2 - J_{12}, -h_1 + h_2 + J_{12}, h_1 - h_2 + J_{12}, h_1 + h_2 - J_{12}), \quad (14)$$

$$\mathcal{H}_q = \begin{pmatrix} 0 & -\Gamma & -\Gamma & 0 \\ -\Gamma & 0 & 0 & -\Gamma \\ -\Gamma & 0 & 0 & -\Gamma \\ 0 & -\Gamma & -\Gamma & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

となる。

古典ハミルトニアンと量子ハミルトニアンを導入すれば、理想的な量子アニーリングマシンの量子ダイナミクスを、時間に依存するシュレディンガー方程式を用いて追跡することが可能である。初期状態を、初期時刻 0 におけるハミルトニアンの基底状態（エネルギー最低状態）とする。時刻 0 におけるハミルトニアンは $\mathcal{H}_q$ であり、この基底状態は、

$$\frac{1}{\sqrt{2^N}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (16)$$

で与えられる。ここで初期状態を時刻 0 のハミルトニアン
の基底状態にすることにより、時間変化が十分ゆっくりで
あるという仮定をおけば、最終時刻のハミルトニアンの
基底状態に確実に到達することが断熱定理により保証され
る²⁰⁾。

5. 応用事例

近年、金融資産のポートフォリオ最適化に量子アニーリ
ングを利用する研究が注目を集めている。ポートフォリオ
とは株や債券などの金融商品の組合せのことで、ポート
フォリオ最適化問題とはどの金融商品をどの割合で保持す
れば良いかを定める問題である。

一つの資産クラスや株式銘柄に全ての資産を投資するよ
りも、複数の資産クラスや銘柄に分散して投資をしたほう
が、リスクを分散できることが知られている。現代ポート
フォリオ理論の基礎となっている Markowitz の平均・分散
モデル²¹⁾は、この考えに基づいてポートフォリオを作成
する手法である。具体的には以下のような問題を考える。

n 個の資産についてのポートフォリオを作成する。持つ
ている全資産 K のうち割合 a_i を資産 i に投資する。また、資
産 i の収益率を R_i とする。ただしここで a_i は非負の実数で
ある。このとき、このポートフォリオの期待収益率は

$$E_a(R) = \sum_{i=1}^n a_i E(R_i) \quad (17)$$

と書くことができる。ここで $E(R_i)$ は資産 i の期待収益率で
ある。次に収益率の分散は次のように記述できる。

$$Var_a(R) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j Cov(R_i, R_j) \quad (18)$$

ここで、 $Cov(R_i, R_j)$ は資産 i と資産 j の収益率の共分散で、
 $i = j$ のときには資産 i の収益率の分散 $\sigma(R_i)$ となる。平均・
分散モデルは期待収益率 $E_a(R)$ を最大化し、収益率の分散
 $Var_a(R)$ を最小化するような a を求める問題：

$$a = \operatorname{argmax}_a E_a(R) - \frac{\gamma}{2} Var_a(R) \quad (19)$$

である。 γ は投資家がどの程度リスクを許容できるかを指
定するパラメータである。この式の意味を考えてみよう。
共分散が $Cov(R_i, R_j) + \sigma(R_i) + \sigma(R_j) > 0$ となる資産 i と j を
ポートフォリオに選ぶと、ポートフォリオの分散 $Var_a(R)$
が大きくなる。もし $Cov(R_i, R_j) + \sigma(R_i) + \sigma(R_j) \approx 0$ となる
資産のペアを選ぶと、 $Var_a(R)$ を小さくできる。つまり全
体としてリスクの小さいポートフォリオが作成できたと言
える。このように全体の収益率の分散を最小に抑えながら、
期待収益率を最大にするような資産の組合せを求めている。
この問題は解析的に解くことが可能である。

しかし、実際の資産運用を考えると、このモデルに加え、
より現実的な制約を考慮しなくてはならない。例えば、株

式などの金融商品はある程度まとまった量でしか取引でき
ないことが多い。しかし上の定式化では、 a_i は非負の実数
であるため、どんな小さな値でも取ることができてしまう
ので、現実的な取引には使うことができない。よって、現
实的には非負整数の変数 w_i を使った最適化

$$w^* = \operatorname{argmax}_w \left\{ E_w(R) - \frac{\gamma}{2} Var_w(R) \right\} \\ s.t. \quad \sum_{i=1}^n w_i = K \quad (20)$$

を考える必要がある。ただし、

$$E_w(R) = \sum_{i=1}^n w_i E(R_i), \quad Var_w(R) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j Cov(R_i, R_j) \quad (21)$$

である。ここで、全ての投資額の合計が全資産 K に等しく
なる制約を導入している。資産額の単位は最低取引額とす
る。この問題は最適解を見つけることが難しい NP 完全問
題であることが知られている²²⁾。そこで、量子アニーリン
グマシンによって解を得ることを考える。量子アニーリン
グマシンで解を得るには、問題形式を QUBO で表現する必
要がある。そこでまず、整数を二値変数によってどのよう
に表現するかを考える。整数 w は D 次元の二値ベクトル x に
よって以下のように表現される。

$$w = \sum_{d=1}^D f(d) x_d \quad (22)$$

$f(d)$ の設定方法によって様々な特徴を持ったバイナリ化
が可能となる。バイナリ法では $f(d) = 2^{d-1}$ と設定する。少
ない二値変数を用いて幅広い範囲の整数を表現できるが、
 x の係数つまり $f(d)$ が大きくなってしまい、量子アニーリ
ングマシンのような強制力および相互作用係数のダイナ
ミックレンジが限定的なマシンでは利用できる整数の範囲
が制限されてしまう。Unary 法では $f(d) = 1$ とする。整数
の値と同じだけ二値変数が必要になるが、アニーリングマ
シンのダイナミックレンジを気にしなくて良い。利用する
マシンの特性と、解きたい問題が必要とする整数の範囲に
よってどちらを採用するかを決める必要がある。

次に、資産の制約を QUBO としてどのように扱うかを考
える。制約式を QUBO で扱うためには、以下のようなペナ
ルティ関数を作り、目的関数に加えるのが一般的な方法で
ある。

$$\text{penalty}(w) = -M \left(\sum_{i=1}^n w_i - K \right)^2 \quad (23)$$

ここで M は制約が破れないようにするためのパラメータで
適切な値を設定する必要がある。この値を大きくしすぎると、
制約は満たされるが目的関数の最大化を実現すること

が困難になり、一方、この値を小さくしてしまうと制約を満たさない解を得る確率が大きくなってしまいます。このペナルティ関数を目的関数に加えることで、以下のようにポトフォリオ最適化問題が QUBO によって表現できる。

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}} \left\{ E_{\mathbf{w}}(R) - \frac{\gamma}{2} \operatorname{Var}_{\mathbf{w}}(R) + \operatorname{penalty}(\mathbf{w}) \right\} \quad (24)$$

ただし、 N 次元整数ベクトル $\mathbf{w}$ は先程導入した方法を用いて、 ND 次元の二値ベクトル $\mathbf{x}$ によって表現されていることに注意が必要である。このモデルでは資産運用の期間を考慮していないが、文献 22 では取引コストなども考慮した多期間にわたる平均・分散モデルを 512 ビットの D-Wave マシンによって解いている。計算に利用した問題サイズは小さいものの、高い精度で最適解が見つけれられることが実験的に示されている。

関連する研究として、著者グループは最近、平均・分散モデルをオンライン広告配信の最適化に拡張した手法を開発した²³⁾。オンライン広告配信では、どの広告をどのユーザに表示させると広告収益を最大化できるのかという問題が存在する。この問題は広告とユーザの二部グラフのマッチング問題として考えることができる (Fig. 1 左)。どのユーザにどの広告が表示されるかは赤色の太いエッジによって表現されている。ユーザ i に広告 j を表示したときの収益を R_{ij} とする。期待収益は、例えば、 $E(R_{ij})$ =広告のクリック率×商品の購入確率×商品の単価、として推測することが可能である。広告配信において全体の期待収益を最大化しつつ、ユーザごとの行動の相関を考慮することによって、収益の分散を最小化したい。ただし、一人のユーザに広告を表示できる回数は限られている。つまり、図中の二部グラフにおいて一つのユーザノードにつながるエッジの数には制限があることを意味する。ユーザ i に広告 j を表示するかどうかを示す二値変数 x_{ij} を導入する。 $x_{ij} = 1$ のときは広告を表示し、 $x_{ij} = 0$ のときには表示しないことを示す。広告配信による期待収益は

$$E(R) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m x_{ij} E(R_{ij}) \quad (25)$$

と書ける。ここで n はユーザ数、 m は広告数、 $E(R_{ij})$ はユーザ i に広告 j を表示したときの期待収益である。次に広告配信による収益の分散は次のように書ける。

$$\operatorname{Var}(R) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{i'=1}^n \sum_{j'=1}^m x_{ij} x_{i'j'} \operatorname{Cov}(R_{ij}, R_{i'j'}) \quad (26)$$

ここで、 $\operatorname{Cov}(R_{ij}, R_{i'j'})$ はユーザ i の広告 j に対する収益とユーザ i' の広告 j' に対する収益の共分散である。広告配信における平均・分散モデルでは広告表示の制約条件のもとで、期待収益の最大化、収益分散の最小化を行う。以上をまとめると、広告配信最適化の問題は以下のように QUBO によって定式化できる。

Fig. 1 (Left) Our model of online advertisement optimization. The model corresponds to the graph matching problems between users and advertisements. (Right) The click through rates (CTR) for online advertisements based on Eq. (27). Each result is obtained using the greedy method and quantum annealing performed using D-Wave 2X.

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x}} \left\{ E(R) - \alpha \operatorname{Var}(R) - M \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m x_{ij} - k_i \right)^2 \right\} \quad (27)$$

ここで、 α は収益の分散に対するパラメータで、値を大きくすると、より収益の分散を抑えることができる。 M は制約項の強さを表すパラメータである。 k_i はユーザ i に広告を表示する回数である。このモデルを実データに適用し、約 1000 量子ビットを持つ D-Wave 2X によって最適化を行った。実データにおいてユーザ数は数千万に及ぶので、ユーザを事前に 24 個のクラスタにクラスタリングした。今回の実験では収益=クリック数として、ユーザクラスタ i と広告 j の過去の実績クリック率を期待収益 $E(R_{ij})$ とした。ユーザクラスタ毎に $E(R_{ij})$ が高い広告を選んだ貪欲法による結果 (Greedy)と、上記の QUBO を D-Wave 2X によって最適化した結果(QA)を比較した (Fig. 1 右)。上記モデルを複数回数適用し、得られたクリック数の分布を箱ひげ図によって示す。QA と Greedy では得られたクリック率の平均値は変わらないが、QA では分散が抑えられていることが確認できた。つまり、広告配信において平均・分散モデルを利用することで、より安定的に収益を得ることが可能であると考えられる。

6. 既知の課題

量子アニーリングマシンの一つである D-Wave マシンを例にとり、ハードウェアを利用する上での課題と、その解決法について紹介する。既存の D-Wave はキメラグラフと呼ばれる構造を持っており (Fig. 2)、全ての量子ビットの間に相互作用が導入できるわけではない。しかし、埋込み (embedding) という手法を用いることで、任意の問題をハードウェアにマップすることが可能となる。解きたい問題の変数を $\mathbf{s}$ 、ハードウェア上の量子ビットの状態を $\mathbf{q}$ とする。埋め込みでは問題変数 s_i をハードウェア上の量子ビット $q_1, q_2, \dots$ から成る鎖で表現することによって任意の問題変数の間に相互作用を導入することが可能となる。このとき、

鎖上の量子ビット $q_1, q_2, \dots$ が常に同じ状態となるような制約を導入する必要がある。この制約は

$$-M \sum_{(i,j) \in E_c} q_i q_j \quad (28)$$

と書くことができる。ただし、 M はペナルティの強さを表すパラメータ、 E_c は鎖の構造を表すグラフのエッジの集合である。**Fig. 3**では4つの変数からなる QUBO をキメラグラフに埋め込む例を示す。この例では、変数 2 と 3 を鎖に置き換えることで、キメラグラフ上に問題をマッピングすることを可能にしている。このような任意の構造を持つ問題の埋込みを探索する問題は NP 困難問題であり、問題サイズが大きくなると探索はさらに難しくなる。代表的な埋め込みのアルゴリズムとして CMR (著者ら Cai, Macredy, Roy の頭文字に由来) ²⁴⁾がある。CMR は、D-Wave の提供するライブラリに付属しているアルゴリズムであり、ダイクストラ法によって最短経路となる頂点の割り当てを逐次的に行うことで埋め込みを探索する。さらに近年では二部グラフの構造を持つ仮想ハードウェアを用いた OCT 埋め込みアルゴリズム ²⁵⁾が開発されており、CMR よりも高速で、効率的な埋め込みが可能となっている。

ハードウェアの制約として、量子ビットがスパースであることに加えて、量子アニーリングマシンの量子ビット数が対象とする問題に対して少ないという困難がある。最新の D-Wave 2000Q は約 2000 量子ビットを有するが、全ビットが相互作用できるように埋込み (全結合埋込み) を行くと、64 ビットの問題しか扱えない。そこで、限られたビット数のハードウェアを使って大きなサイズの問題を解くヒューリスティックな方法がいくつか提案されている。qbsolv²⁶⁾は D-Wave Systems によって開発されたオープンソースのソフトウェアで、大きな問題を小さな部分問題に分割し、部分問題を D-Wave マシンによって解くというアプローチをとっている。大規模なクラスタリングや渋滞解消のための自動車のルーティング問題、非負値行列分

Fig. 2 Structure of a qubit network on D-Wave. Circles and links between circles are qubits and interactions, respectively. The network structure of qubits is called a chimera graph.

解 ²⁷⁻²⁹⁾など、様々な領域で利用されている。QUBO を分割して解く別のアプローチとして、確率伝搬法を利用した手法 ³⁰⁾や分割統治法による手法 ³¹⁾がある。

アニーリングマシンに設定する強制力および相互作用係数 h, J は、マシンのキャリブレーションの誤差によって設定したい値から数%ずれてしまうことが知られている。これがアニーリングマシンのダイナミックレンジを小さくしている要因である。この誤差が存在すると、本来解きたい問題を正確にハードウェアに埋め込むことができず、良い解が得られない。キャリブレーション誤差を軽減する手法としてスピン反転変換 (Spin Reversal Transformation) ^{32,33)}を紹介する。あるイジングモデルの問題を解く時に、問題中のいくつかのスピンおよび、それに関与する相互作用係数、磁場係数に対して $\sigma_i^z \rightarrow a_i \sigma_i^z$ 、 $J_{ij} \rightarrow a_i a_j J_{ij}$ 、 $h_i \rightarrow a_i h_i$ $a_i = \pm 1$ というゲージ変換を行うことで、解いている問題の性質を変えずに見かけ上いくつかのスピンの向きを反転した空間で組合せ最適化問題を表現することができる。このようなゲージ変換に対して、シミュレーテッドアニーリングや理想的な量子アニーリングの性能は不変であるが、キャリブレーション誤差のある D-Wave マシンでは、不変ではなくなる。よって、D-Wave マシン上で異なるゲージ変換を行って複数回問題を解くと、異なる物理系で問題を解いていることに相当し、良い解を与える状況を作り出すことが期待される。このように、ゲージ変換を行うことで係数のキャリブレーション誤差を平均化して軽減する方法をスピン反転変換と呼ぶ。D-Wave の提供するライブラリではスピン反転変換の回数を指定することが可能であり、この回数だけランダムなゲージ変換が行われる。

量子アニーリングマシンにおける QUBO はハードウェアにほぼそのまま載せられるという意味で、従来のコンピュータにおける機械語やアセンブリ言語と対応付けることができる。従来のコンピュータではC言語などのプログラミング言語によって実行したい内容を抽象化して記述し、

Fig. 3 (Left) A graph representing Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) of a problem we want to solve. Edges between vertices represent nonzero interactions between variables. (Right) An example of embedding from the original QUBO network to the D-Wave network. The second variable is represented by chains on the chimera graph (see Fig. 2). The amplitude of interaction on the chain is M , where M is larger than the surrounding interactions.

コンパイラが内容を解釈して CPU で実行できる形に変換を行っている。量子アニーリングマシンにおいても、解きたい問題を抽象的に記述できるプログラミング言語と、それをハードウェアが解釈可能な QUBO に変換できるコンパイラのようなものは存在するのだろうか。著者らの一人（棚橋）は Scala 言語を用いて抽象的に最適化問題を記述するためのドメイン固有言語（domain-specific language: DSL）を開発した³⁴⁾。この言語を用いることで、最適化問題をほぼ数式と同じように記述することができ、コンパイラに数式を渡すと QUBO が出力される（Fig. 4）。従来では最適化問題から QUBO への変換は人の手によって行う必要があり、数式が複雑になると、この変換操作はとても煩雑となるため、計算ミスやバグの入り込む余地が多かった。一方、DSL を用いることで、最初の最適化問題を正しく記述すればバグの入り込む余地はなくなる。最適化問題は内部的には二分木の形で保持されており、この木構造に対する様々な操作によって数式の冗長性を除去するような最適化なども簡単に行える。

従来のコンピュータではユーザはプログラミング言語によって自分の実行したい内容の記述だけに集中できるようになった。同様に、本 DSL を用いることでユーザは量子アニーリングマシンで解きたい最適化問題の記述にだけ集中することができる。今後は Python による実装も行い、ソースコードを公開する予定である。

7. 結 言

ここまで見てきたように、量子アニーリングの研究開発は現在発展途上である。したがって、量子アニーリングの計算技術を更に磨き上げるためには、ハードウェア開発はもちろんのこと、ソフトウェア開発、アプリケーション発掘の観点からも幅広い視野で研究開発を進めることが大切だと考えられる。特に、ハードウェア開発やソフトウェア開発の駆動力となるアプリケーション発掘について、様々な専門分野からの参入が大切だと考えられる。

Fig. 4 (Left) An example of a description of combinatorial optimization problems using domain-specific language (DSL). We can write code in the same way as writing equations. If we compile the code written using DSL, we can obtain an appropriate QUBO automatically. (Right) Combinatorial optimization problem is saved using a binary tree in the scheme.

本記事で紹介した研究の一部は、JST、さががけ、JP JPMJPR1665 の支援を受けたものです。

参 考 文 献

- 1) T. Kadowaki and H. Nishimori: "Quantum annealing in the transverse Ising model," *Phys. Rev. E* **58** (1998) 5355-5363
- 2) T. Kadowaki: "Study of optimization problems by quantum annealing," ph.D Thesis (1999) Tokyo Institute of Technology
- 3) S. Tanaka, R. Tamura and B.K. Chakrabarti: "Quantum spin glasses, annealing and computation," Cambridge University Press (2017)
- 4) 西森秀稔, 大関真之: 「量子アニーリングの基礎」, 共立出版 (2018)
- 5) S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr. and M.P. Vecchi: "Optimization by simulated annealing," *Science* **220** (1983) 671-680
- 6) D.S. Johnson, et al.: "Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation; part I, graph partitioning," *Opns. Res.* **37** (1989) 865-892
- 7) D.S. Johnson, et al.: "Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation; part II, graph coloring and number partitioning," *Opns. Res.* **39** (1991) 378-406
- 8) M.W. Johnson, et al.: "Quantum annealing with manufactured spins," *Nature* **473** (2011) 194-198
- 9) T. Lanting, et al.: "Experimental demonstration of perturbative anticrossing mitigation using nonuniform driver Hamiltonians," *Phys. Rev. A* **96** (2017) 042322-1-8
- 10) https://www.dwavesys.com/sites/default/files/14-1018A-A_Reverse_Quantum_Annealing_for_Local_Refinement_of_Solutions.pdf (accessed 2018-05-25)
- 11) M. Yamaoka, et al.: "A 20k-spin Ising chip to solve combinatorial optimization problems with CMOS annealing," *IEEE JSSC* **51** (2016) 303-309
- 12) T. Inagaki, et al.: "A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems," *Science* **354** (2016) 603-610
- 13) P.L. McMahon, et al.: "A fully programmable 100-spin coherent Ising machine with all-to-all connections," *Science* **354** (2016) 614-621
- 14) S. Matsubara, et al.: "Ising-model optimizer with parallel-trial bit-sieve engine," *Conference on CISIS-2017* (2017) 432-438
- 15) <https://www.ibm.com/analytics/data-science/prescriptive-analytics/cplex-optimizer> (accessed 2018-05-25)
- 16) <http://www.gurobi.com> (accessed 2018-05-25)
- 17) A.H. Land and A.G. Doig "An Automatic Method of Solving Discrete Programming Problems," *Econometrica* **28** (1960) 497-520
- 18) <https://quantum.fixstars.com> (accessed 2018-05-25)
- 19) A. Lucas: "Ising formulations of many NP problems," *Front. Phys.* **2** (2014) 5-1-15
- 20) S. Morita and H. Nishimori: "Mathematical foundation of quantum annealing," *J. Math. Phys.* **49** (2008) 125210-1-47
- 21) H. Markowitz: "Portfolio Selection," *J. Finance* **7** (1952) 77-91
- 22) G. Rosenberg, et al. "Solving the optimal trading trajectory problem using a quantum annealer," *IEEE J-STSP* **10.6** (2016) 1053-1060
- 23) S. Takayanagi, K. Tanahashi and S. Tanaka: "Display advertising optimization by quantum annealing processor," *Adiabatic Quantum Computation Conference 2017*
<https://www.youtube.com/watch?v=aeAtZ77D9Rk> (accessed 2018-05-25)

- 24) J. Cai, W.G. Macready, and A. Roy: "A practical heuristic for finding graph minors," arXiv:1406.2741 (2014)
- 25) T.D. Goodrich, T.S. Humble and B.D. Sullivan: "Optimizing Adiabatic Quantum Program Compilation using a Graph-Theoretic Framework," arXiv:1704.01996 (2017)
<https://github.com/TheoryInPractice/aqc-virtual-embedding>
 (accessed 2018-05-25)
- 26) <https://github.com/dwavesystems/qbsolv> (accessed 2018-05-01)
- 27) V. Kumar, G. Bass, C. Tomlin and J. Dulny: "Quantum Annealing for Combinatorial Clustering," Q. Inf. Proc. (2018) 17-39
- 28) F. Neukart, G. Compostella, C. Seidel, D. von Dollen, S. Yarkoni, and B. Parney: "Traffic flow optimization using a quantum annealer," Front. in ICT 4 (2017) 29
- 29) D. O'Malley, et al.: "Nonnegative/binary matrix factorization with a D-Wave quantum annealer," arXiv:1704.01605 (2017)
- 30) Z. Bian, F. Chudak, R. Israel, B. Lackey, W.G. Macready and A. Roy: "Discrete optimization using quantum annealing on sparse Ising models," Front. Phys. 2 (2014) 56
- 31) Z. Bian, et al.: "Mapping constrained optimization problems to quantum annealing with application to fault diagnosis," arXiv:1603.03111 (2016)
- 32) T.F. Rønnow, et al.: "Defining and detecting quantum speedup," Science 345 (2014) 420-424
- 33) S. Boixo, et al. "Evidence for quantum annealing with more than one hundred qubits," Nat. Phys. 10 (2014) 218-224
- 34) 棚橋耕太郎、堀田義仁：「Recursive Scheme を用いた量子アニーリングマシン専用言語(DSL)の開発」、ScalaMatsuri 2018
<https://www.youtube.com/watch?v=wYnqtwwfz0s> (accessed 2018-05-25)

田 中 宗

1981年3月1日生。2003年東京工業大学理学部物理学卒業。2005年東京大学大学院理学系研究科修士課程修了。2008年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。東京大学物性研究所、近畿大学量子コンピュータ研究センター、東京大学大学院理学系研究科化学専攻、京都大学基礎物理学研究所、早稲田大学高等研究所を経て、2018年より早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構主任研究員（研究院准教授）。主にイジングモデル型情報処理のハード、ソフト、アプリケーション発掘に関する産学官連携研究に従事。科学技術振興機構さがけ研究者、情報処理推進機構未踏ターゲットプロジェクトマネージャーを兼任。日本物理学会正会員。博士（理学）。

棚 橋 耕太郎

1988年7月22日生。2011年京都大学工学部工業化学卒業。2015年同大学院工学研究科修士課程（高分子化学専攻）修了。2015年（株）リクルートコミュニケーションズ勤務。DSPなど広告配信の機械学習による最適化エンジンの開発に従事。

本 橋 智 光

1983年8月14日生。2007年上智大学理工学部機械工学科卒業。2009年上智大学院理工学研究科博士前期課程（機械工学専攻）卒業。2009年より、新日鉄住金ソリューションズ(株)システム研究開発センター勤務。2016年より、(株)リクルートライフスタイル勤務。2017年より、サスメド(株)CTO。主に、データ分析・システム開発設計を担当。2009年、システム制御情報学会奨励賞受賞。2015年、KDD CUP2位（ACM SIGKDD）。『前処理大全』（技術評論社）執筆。

高 柳 慎 一

1981年5月18日生。2004年北海道大学理学部物理学卒業。2006年北海道大学大学院理学研究科物理学専攻修士課程修了。2006年より、一般財団法人材料科学技術振興財団勤務。2008年より、みずほ第一フィナンシャルテクノロジー(株)勤務。2014年より、(株)リクルートコミュニケーションズ勤務。2017年より、LINE(株)勤務。主に、データ分析・機械学習に関連した業務に従事。日本物理学会、情報処理学会会員。データ分析に関する書籍、翻訳書『R言語徹底解説』（共立出版、2014）、翻訳書『Rによる自動データ収集』（共立出版、2017）などを多数執翻訳。