

令和 4 年 6 月 1 日現在

機関番号：12611

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K11333

研究課題名（和文）量子計算による組み合わせ最適化：量子ダイナミクスの制御と計算の効率化

研究課題名（英文）Combinatorial optimization by quantum computing: Control of quantum dynamics for efficient calculation

研究代表者

工藤 和恵 (Kudo, Kazue)

お茶の水女子大学・基幹研究院・准教授

研究者番号：30505574

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,000,000円

研究成果の概要（和文）：量子計算には、大きくわけて量子ゲート方式と量子アニーリング方式がある。本研究では量子アニーリング方式を主軸とし、組み合わせ最適化問題を効率的に解く方法について研究した。系の対称性を利用した制約量子アニーリングや、その過程で起こりうる局在現象について新奇な成果を得た。また、量子アニーリング方式に着想を得た専用計算機（イジングマシン）も利用して、単純な最適化問題だけでなく、機械学習やパターン形成などの新たな計算方法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子計算の実現には、量子ダイナミクスの制御が重要となる。本研究で得られた制約量子アニーリングの結果や局在現象に関する知見は、量子ダイナミクスの制御に密接に関わるものである。本研究の成果は、量子ダイナミクスの理解や、新奇な視点の提案という点で、学術的な意義をもつ。社会的にも量子技術への期待が高まる中、実用的な問題への適用可能性を示す結果が得られたことは、今後の研究開発への貢献という意味でも有益である。

研究成果の概要（英文）：Quantum computing can be classified into the quantum-gate and quantum-annealing (QA) models. This project focuses on QA and aims to study methods to solve combinatorial optimization problems efficiently. We obtained novel results on constrained quantum annealing using the symmetry of the system and localization phenomena that can occur in the QA process. We also proposed new methods such as machine learning and pattern formation besides simple optimization problems, using special devices (Ising machine) inspired by the QA-model computer.

研究分野：統計物理学

キーワード：量子ダイナミクス 組み合わせ最適化 イジングマシン 量子アニーリング

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子計算を可能にする量子コンピュータは、従来のコンピュータとは比べものにならないほど高速な計算が可能であるとされている。伝統的には量子ゲートを用いる方式が多く研究されてきたが、数十量子ビット程度の小規模なものしか実装されていなかった。一方量子アニーリングを用いた方式では、数千量子ビット程度のマシンが実現していた。

(2) 量子アニーリングは、量子効果を利用して目的関数の最小値を求める手法である。適用できるのは組み合わせ最適化問題とサンプリングに限られるが、創薬、金融、物流など実用的な問題に応用でき、社会的な有用性も高い。量子アニーリングではまず、解くべき組み合わせ最適化を表現する目的関数を定義する。量子ゆらぎを利用して、その目的関数の最小解の探索をおこなう。したがって、目的関数をどう表現するか、量子ゆらぎをどのように制御するかが、計算効率を左右する。

(3) 組み合わせ最適化問題を効率よく解く専用計算機として、量子アニーリング方式以外にも、イジングマシンと呼ばれる非ノイマン型の計算機が開発されている。いずれも、量子の概念を実用的な技術に結びつけるものである。

2. 研究の目的

(1) 量子アニーリングでは、外部磁場などのパラメタをゆっくり変化させて解を得る。ただし、最適解を得るには限りなくゆっくり変化させなければならない。この変化にかける時間を縮めれば、計算の高速化につながる。しかし本研究では、これとは異なる視点から、計算の効率化の指針を与えるような基礎理論を提案する。

(2) 本研究で着目したのは、計算に利用する量子系の保存量（不変量）である。保存量が存在すると、保存量の値の異なる状態に飛び移ることはできない。この性質をうまく利用すれば、探索範囲を絞り込むことができる。探索範囲が狭ければ、解を見つけるまでの時間が短縮され、計算の効率化につながる。このように、保存量が量子ダイナミクスに与える影響を解明することが、本研究の目的の一つである。

(3) 保存量は、対象とする組み合わせ最適化問題の定式化の方法によっても異なる。具体的な問題への適用を通して、計算の効率化を図る。巡回セールスマン問題などの典型的な問題だけでなく、実用性のある問題にも取り組み、適用範囲を広げる。

3. 研究の方法

(1) 保存量が量子ダイナミクスに与える影響を解明するため、単純な量子系に外場を加え、量子ダイナミクスの性質を調べる。主に、数値的手法を用いる。比較的シンプルながら量子アニーリングではあまり使われない種類の外場を利用して、探索範囲を絞り込む方法を開発する。

(2) 具体的な組み合わせ最適化問題に適用する。先行研究との比較ができるように、典型的な問題に取り組み、さらに将来の展望を考えて、実用性のある問題にも取り組む。問題の定式化から始めて、それまでの研究成果に基づいて、計算の効率化を図る。

4. 研究成果

(1) 量子アニーリングの数値シミュレーションは、通常はモンテカルロ法がよく用いられる。しかし、本研究ではそれとは別の方法を用いて、実時間量子ダイナミクスを研究した [1]。その方法は制約量子アニーリングと呼ばれており、系の保存量を利用して制約条件を自動的に満たすように工夫したものである。これによって、制約条件のための余計な項をコスト関数に加える必要がなくなる。さらに、量子系の状態空間をかなり削減できるため、数値計算にかかる時間やメモリも削減できる。

このアイデアをグラフ彩色問題に適用したところ、予想外の興味深い結果が得られた。量子ゆらぎを表す項を2通り設定して比較したところ、計算の精度が予想とは逆の結果となった。その理由を突き詰めたところ、量子アニーリングの過程の最後で基底エネルギーが縮退することが原因であることが明らかになった。この縮退は、グラフ彩色では少なくとも色の組み合わせの数だけ解が存在することに起因する。

この結果は、組み合わせ最適化問題を解くための新たな方法の提案につながるだけでなく、基

礎研究としても興味深い示唆を含んでいる。つまり、量子多体系におけるダイナミクスを理解することが、量子計算を効率的に行うためにも重要であることを示している。

(2) 量子系の局在現象であるアンダーソン局在は、1 粒子系での局在現象である。それを相互作用のある量子多体系に拡張したものが多体局在で、近年盛んに研究されている。本研究でも、1 次元量子スピン系での多体局在の相互作用依存性について、有限サイズスケールに関する研究成果を発表した[2]。しかし、多体局在は近年盛んに研究されているにもかかわらず、その実態は未解明のままであり、新たな知見が見出され続けている。

グラフ彩色問題に制約量子アニーリングを適用したモデルは、局在現象を起こすアンダーソン模型と類似性があり、相互作用も重要となることから、多体局在に関係した局在現象が起こると期待される。本研究では、グラフ彩色問題に量子アニーリングを適用する際に起こりうる局在現象に関する論文を発表した [3]。具体的には、このモデルを有効磁場中のスピン鎖の集合体と見たて、従来とは異なる視点から局在現象を議論した。どの視点から局在現象を議論するかによって、現象の解釈が異なりうることを、本研究の結果は示唆している。この論文は、掲載雑誌の Editors' Choice に選ばれるなど、高い評価を受けている。

(3) イジングマシンは組み合わせ最適化問題やサンプリングに特化した計算機であるが、その利用先に関する研究が進んできている。本研究課題に取り組み始めてから、イジングマシンの利用環境の提供が急速に広まってきた。そこで本研究では、組み合わせ最適化問題以外にも、機械学習手法としてよく使われるクラスタリング、行列分解などの手法を、イジングマシンを用いて実装する研究にも取り組んできた。

従来から知られている行列分解の手法に、非負値行列因子分解(NMF)がある。これに着想を得て提案された、非負値二値行列因子分解(NBMF)という手法は、イジングマシンと従来型コンピュータを交互に使う、ハイブリッド手法のアルゴリズムである。本研究では、NBMF を用いて画像の分類を行い、従来手法である NMF と比較した [4]。その結果、従来手法よりも過学習が起こりにくく、学習データが比較少なくてもよい結果が得られるなどの利点があることが明らかになった。

(4) クラスタリングは、教師なし機械学習の手法の一つである。本研究では、イジングマシンを使った、クラスタリングの新たな手法を提案する論文を発表した [5]。具体的には、2 次元平面上に分布する点を、距離に基づいてクラスタリングする問題を扱った。データの分布が偏っていると、従来の方ではうまくクラスタリングできない場合がある。従来手法の定式化では、クラスタのサイズが均等になる効果ははたらいってしまうのが原因だった。これに対して、提案手法では、各クラスタにおける点間の平均距離を目的関数とすることで、精度のよいクラスタリング結果が得られることを示した。

平均距離を目的関数とした場合、そのままではイジングマシンで計算できない形式となるため、従来型コンピュータとイジングマシンとのハイブリッド手法によるアルゴリズムが必要となる。最適化の計算を繰り返すため従来手法よりも時間がかかるが、低レイテンシのイジングマシンを利用することで、十分使用にたえうる手法となることを示した。今後のイジングマシンの活用に希望を与える結果である。

(5) イジングマシンの新たな活用分野として、パターン形成にも取り組み、イジングモデルのパターン形成のダイナミクスをシミュレーションする方法を考案した [6]。連続系のモデルを基にして、それに熱ゆらぎの効果を加えることで定式化し、ドメイン成長のダイナミクスを再現することに成功した。モデルの基底状態を求めるのが通常の使い方であるのに対して、時間発展を計算する方法は新奇な使い方であり、イジングマシンの活用分野の開拓に一石を投じる研究となった。

(6) イジングマシンの活用分野の開拓に資する研究として、Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO)形式による圧縮センシングに関する研究を発表した [7]。具体的には、イジングマシンと従来型コンピュータのハイブリッドなアルゴリズムを用いた手法を提案した。この提案手法によって、従来よりも高い性能が得られる場合があることを示した。ただし、初期値依存性が大きいため、さらなる改良が望まれる。圧縮センシングは、大量のデータを扱う分野での応用が期待されており、イジングマシンを利用して高性能な計算が実現できれば、そのインパクトは大きい。本研究は、その基礎を担う位置づけであり、今後の展開が期待される。

< 引用文献 >

- [1] K. Kudo, Constrained quantum annealing of graph coloring, Phys. Rev. A **98**, 022301 (2018).
- [2] K. Kudo and T. Deguchi, Finite-size scaling with respect to interaction and disorder strength at the many-body localization transition, Phys. Rev. B **97**, 220201(R) (2018).
- [3] K. Kudo, Localization in the Constrained Quantum Annealing of Graph Coloring, J.

Phys. Soc. Jpn. **89**, 064001 (2020).

[4] H. Asaoka and K. Kudo, Image Analysis Based on Nonnegative/Binary Matrix Factorization, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 085001 (2020).

[5] N. Matsumoto, Y. Hamakawa, K. Tatsumura and K. Kudo, Distance-based clustering using QUBO formulations, Sci. Rep. **12**, 2669 (2022).

[6] K. Mukai and K. Kudo, Pattern Formation Simulated by an Ising Machine, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 025004 (2021).

[7] Kazue Kudo, Compressed sensing based on QUBO formulation, J. Phys.: Conf. Ser. **2207**, 012033 (2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Matsumoto Nasa, Hamakawa Yohei, Tatsumura Kosuke, Kudo Kazue	4. 巻 12
2. 論文標題 Distance-based clustering using QUBO formulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2669
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-022-06559-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kudo Kazue	4. 巻 2207
2. 論文標題 Compressed sensing based on QUBO formulation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 12033
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/2207/1/012033	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kudo Kazue	4. 巻 89
2. 論文標題 Localization in the Constrained Quantum Annealing of Graph Coloring	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 64001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.89.064001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Asaoka Hinako, Kudo Kazue	4. 巻 89
2. 論文標題 Image Analysis Based on Nonnegative/Binary Matrix Factorization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 85001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.89.085001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kanon, Kudo Kazue	4. 巻 90
2. 論文標題 Pattern Formation Simulated by an Ising Machine	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 25004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.025004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi	4. 巻 97
2. 論文標題 Finite-size scaling with respect to interaction and disorder strength at themany-body localization transition	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 220201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.97.220201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kazue Kudo	4. 巻 98
2. 論文標題 Constrained quantum annealing of graph coloring	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 22301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.98.022301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計35件(うち招待講演 0件/うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Kudo Kazue
2. 発表標題 Compressed sensing using an Ising machine
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 量子計算による量子多体局在の判定
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Nasa Matsumoto, Yohei Hamakawa, Kosuke Tatsumura, Kazue Kudo
2. 発表標題 Clustering with an Ising machine
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 向井かのん, 工藤和恵
2. 発表標題 イジングマシンを用いたパターン形成
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大石美賀, 濱川洋平, 辰村光介, 工藤和恵
2. 発表標題 イジングマシンによる巡回セールスマン問題の段階的解法
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松本奈紗, 濱川洋平, 辰村光介, 工藤和恵
2. 発表標題 イジングマシンを用いたクラスタリング
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kanon Mukai, Kazue Kudo
2. 発表標題 Pattern formation simulation using an Ising machine
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 向井かのん, 工藤和恵
2. 発表標題 イジングマシンを用いたパターン形成
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂倉佑季, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングに基づくアルゴリズムによる画像の多値分類
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵
2. 発表標題 辞書学習を利用した画像分類
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤由佳, 工藤和恵
2. 発表標題 乗り合いのマッチング最適化
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大石美賀, 松本奈紗, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングマシンを用いた配送ルート最適化
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松本奈紗, 大石美賀, 工藤和恵
2. 発表標題 配送ルート最適化問題におけるクラスタリング
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松本奈紗, 大石美賀, 工藤和恵
2. 発表標題 配送ルート最適化問題におけるクラスタリング
3. 学会等名 第23回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤由佳, 工藤和恵, 白井達彦, 田中宗, 戸川望
2. 発表標題 アニーリングマシンを用いた乗り合いのマッチング最適化
3. 学会等名 第23回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵, 白井達彦, 田中宗, 戸川望
2. 発表標題 辞書学習を利用した画像解析
3. 学会等名 第23回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂倉佑季, 工藤和恵, 白井達彦, 田中宗, 戸川望
2. 発表標題 アニーリングに基づくアルゴリズムによる画像の多値分類
3. 学会等名 第23回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松本奈紗, 大石美賀, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングマシンによる配送計画最適化
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2021年春季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵, 白井達彦, 田中宗, 戸川望
2. 発表標題 二値制約非負値行列分解を用いる画像分類
3. 学会等名 第2回量子ソフトウェア研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kazue Kudo
2. 発表標題 Constrained quantum annealing of graph coloring
3. 学会等名 Frontiers of Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazue Kudo
2. 発表標題 Constrained quantum annealing of graph coloring
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 量子アニーリングにおける多体局在転移
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 制約量子アニーリングにおける局在現象
3. 学会等名 第41回量子情報技術研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 制約量子アニーリングにおける局在現象
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐藤由佳, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングマシンを用いた輸送効率化
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵
2. 発表標題 二値制約非負値行列分解を利用した画像解析
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂倉佑季, 工藤和恵
2. 発表標題 QBoostを用いた画像分類
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵
2. 発表標題 二値制約非負値行列分解を利用した画像解析
3. 学会等名 第41回量子情報技術研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤由佳, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングマシンを用いた配車マッチング
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂倉佑季, 工藤和恵
2. 発表標題 QBoostを用いた画像分類
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 朝岡日向子, 工藤和恵
2. 発表標題 二値制約非負値行列分解を利用した画像解析
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松本奈紗, 大石美賀, 工藤和恵
2. 発表標題 アニーリングマシンによる配送ルート最適化
3. 学会等名 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2020年春季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 制約量子アニーリングのグラフ彩色への適用
3. 学会等名 第39回量子技術研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 工藤和恵
2. 発表標題 制約量子アニーリングを用いたグラフ彩色
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazue Kudo
2. 発表標題 Constrained quantum annealing of graph coloring
3. 学会等名 Coherent Network Computing (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究内容 https://www.is.ocha.ac.jp/~kudo/research.html 研究業績 https://www.is.ocha.ac.jp/~kudo/publication.html</p>

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------