

量子インスパイアードアルゴリズムを用いて 組み合わせ最適化問題を高速に解くことが可能な シミュレーテッド分岐マシン

Simulated Bifurcation Machine Equipped with Quantum-Inspired Algorithm to Instantly Solve Combinatorial Optimization Problems

後藤 隼人 GOTO Hayato

様々な社会課題において、膨大な選択肢の中から最適なものを見付け出す組み合わせ最適化問題が存在している。近年、これら難しい数学の問題を高速に解くために量子コンピューターへの期待が高まっているが、扱える問題サイズに制約があり、既存のコンピューターを有効に利用する実用的な解決策が望まれている。

東芝グループは、量子分岐マシンと呼ぶ独自の量子コンピューターの研究過程で、新しい組み合わせ最適化アルゴリズムであるシミュレーテッド分岐(SB)アルゴリズムを用いたシミュレーテッド分岐マシン(Simulated Bifurcation Machine, SBMと略記)を開発した。SBアルゴリズムの特長である高い並列性を生かして最先端の並列プロセッサ上に実装し、大規模な組み合わせ最適化問題を高速で解くことに成功した。

Various social issues contain combinatorial optimization problems in which the optimal solution needs to be found from among a huge number of alternatives. In this context, attention is being increasingly focused on quantum computers to instantly solve these difficult mathematical problems. Due to limitations on the size of problems that can be solved by existing quantum computers, however, demand has recently been growing for practical solutions making effective use of conventional computers.

During the process of researching its proprietary quantum computer called the quantum bifurcation machine, the Toshiba Group developed the Simulated Bifurcation Machine (SBM) equipped with the Simulated Bifurcation Algorithm (SB Algorithm) as a new algorithm for combinatorial optimization problems. Experiments on an implementation of the SBM on cutting-edge parallel processors taking advantage of its high parallelizability have confirmed that the SBM can solve large-scale combinatorial optimization problems at high speed.

1. まえがき

近年、従来とは全く異なる原理で動作する次世代のコンピューターとして、量子コンピューターが注目を集めている。その一種として知られる量子アニーラーは、組み合わせ最適化問題と呼ばれる数学の問題に特化した量子コンピューターである。最適な選択肢を探索する組み合わせ最適化問題は、物流や、創薬、金融など、様々な場面で社会の中に見られるが、問題のサイズが大きくなると選択肢の数が指数関数的に増大する、いわゆる“組み合わせ爆発”のため、解くことが非常に難しいことで知られている。量子アニーラーは、このような解く価値のある難しい問題に用途を限定することで、万能性を備えたゲート方式の量子コンピューターに比べて大規模なマシンを実現しており、2022年7月現在、ゲート方式の量子ビット数が100程度であるのに対し、量子アニーラーは約5,000である。しかし、実問題を解くには、この規模でも十分とはいえ、現状では、既存のコンピューターを有効利用して、実用的なサイズの問題を解くこ

とが望まれている。

東芝は2016年、独自の量子コンピューター“量子分岐マシン”を理論的に提案した^{(1),(2)}。これは、組み合わせ最適化(アニーリング方式)だけでなく万能量子計算(ゲート方式)にも利用可能な、汎用性の高い量子コンピューターである。量子ビットとして、Kerr非線形パラメトリック発振器(KPO: Kerr-Nonlinear Parametric Oscillator)と名付けた特殊なパラメトリック発振器を用いる。KPOは、量子力学的な分岐現象によって二つの安定な発振状態の量子重ね合わせ状態(いわゆる、“シュレディンガーの猫”状態)を生成でき、この二つの発振状態をそれぞれ0と1とする量子ビットとして利用できる。KPOの物理実装としては、超伝導回路を用いたマイクロ波発振器が有望であり⁽³⁾、実際、Stanford大学の研究グループが2019年に⁽⁴⁾、Yale大学の研究グループが2020年に⁽⁵⁾、それぞれ異なる超伝導回路方式でKPOを実験的に実現した。しかし、これらは一つの量子ビットの実現であり、実用的な量子分岐マシンの実現にはまだ時間が掛かる。

そこで東芝は2019年、新たにSBMを提案した⁽⁶⁾。SBMは、既存のデジタルコンピューターを有効利用して高速に大規模な組み合わせ最適化問題を解くことができ、非常に実用性が高い。その本質は、量子分岐マシンの理論を量子力学から古典力学へと変換することで得られた古典分岐マシン^{(1), (3)}の運動方程式を、高速に数値シミュレーションするという発想で発見されたSBアルゴリズムにある。SBアルゴリズムの特長は、多数の変数を同時に更新できるという高い並列性にあり、FPGA (Field-Programmable Gate Array) やGPU (Graphics Processing Unit) といった市販の並列プロセッサを利用して、量子アニーラーなどの専用機に劣らない性能を発揮する。東芝と東芝デジタルソリューションズ(株)は2022年3月、このSBM技術を核とする量子インスパイアード最適化ソリューションSQBM+™の事業化を発表し、Microsoft社が運営するクラウド量子コンピューティングサービスAzure Quantumの中で、国内唯一のベンダー企業としてサービス提供を開始した⁽⁷⁾。

ここでは、SBアルゴリズムの概要と進展、及び、SBMの基本的性能について述べる。

2. SBアルゴリズムの概要

量子分岐マシンやSBMは、量子アニーラーと同様イジング問題と呼ばれる特定の組み合わせ最適化問題に特化した形で提案された。このようなコンピューターは、しばしばイジングマシンと呼ばれる。イジング問題とは、統計物理学で知られる磁性の最も単純化されたモデルであるイジングモデルの、エネルギー最小状態を探索する問題である。その基本変数はスピンと呼ばれ、 ± 1 の2通りの値を取り、エネルギーはその2次関数で与えられる。一見単純な問題に見えるが、スピンの数が N 個あると状態の数は 2 の N 乗通りもあり、 N が100を超えると全探索することは事実上不可能となる。実際、イジング問題は、NP (Non-Deterministic Polynomial) 完全問題と呼ばれる、最も難しいクラスの組み合わせ最適化問題に属している⁽⁸⁾。しかし、その完全性ゆえに、多くの組み合わせ最適化問題がイジング問題に帰着するため⁽⁹⁾、イジングマシンは様々な社会課題解決に役立つと期待されている。

図1に、量子分岐マシンから最新のSBアルゴリズムまでの流れを示す。

量子分岐マシンではスピンにKPOを対応させ、解きたいイジング問題の結合係数に依存してKPOを結合する。このKPOネットワークのダイナミクスは量子力学的なハミルトニアンを用いたシュレディンガー方程式(量子力学の基本方程式)に従う。各KPOは、始め真空状態に準備される。徐々

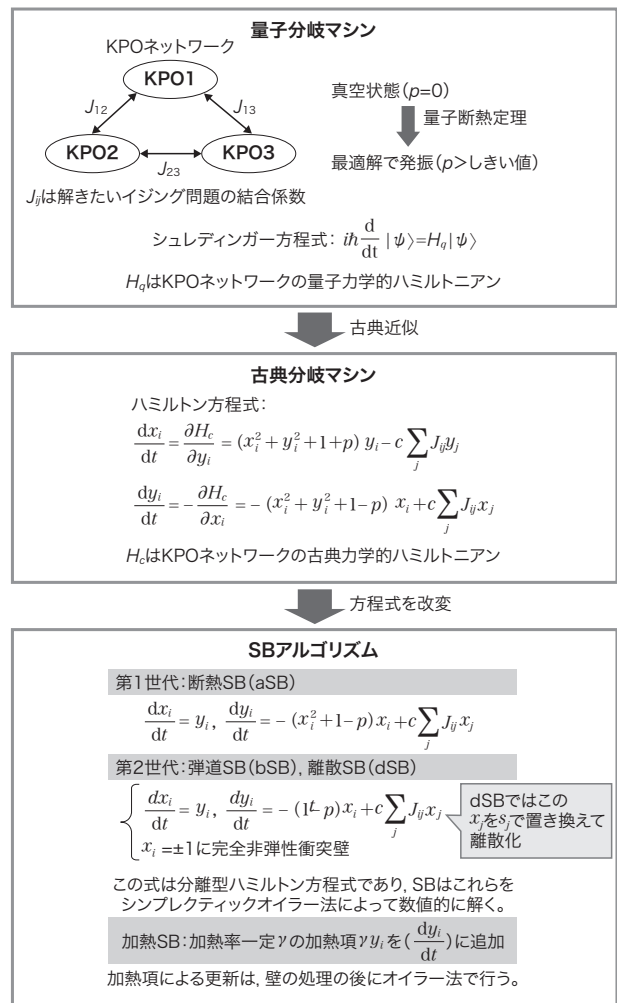


図1. 量子分岐マシンから最新のSBアルゴリズムまでの流れ

量子分岐マシンを古典近似して得られる古典分岐マシンの運動方程式を分離型ハミルトン方程式に改変し、シンプレクティックオイラー法を適用することでSBアルゴリズムが得られる。

Approaches from Quantum Bifurcation Machine to SB Algorithm for solution of combinatorial optimization problems

にポンプレート p を増加すると、量子力学で知られる量子断熱定理^(注1)により、各KPOはイジング問題の最適解(エネルギー最小状態)に対応する発振状態へと変化する^{(1), (3)}。こうして、イジング問題が解ける。

古典分岐マシンは、量子分岐マシンの古典近似によって導かれるハミルトン方程式(古典力学の基本方程式)に従う。各KPOの状態は位置 x_i と運動量 y_i によって記述され、 x_i の正負がスピン s_i に対応する。こうして得られる古典分岐マシンには、量子分岐マシンにおける量子断熱定理のような理論保証はない。それにもかかわらず、古典分岐マシンはイジング問題の高精度な近似解を獲得できることが経験的に示

(注1) 始めエネルギー最小状態にある量子系は、系のパラメーター変化が十分緩やかならば、常にエネルギー最小状態にとどまるという定理。

されている^{(1), (3)}。これは古典力学における断熱定理を示唆するものであるが、非線形な系における古典断熱定理の一般的な証明はいまだになく、古典分岐マシンの原理の厳密な数学的証明は未解決問題として残されている⁽⁶⁾。

量子分岐マシンを従来コンピューターでシミュレーションする(つまり、シュレディンガー方程式を数値的に解く)ことは非常に困難であるのに対し、古典分岐マシンのシミュレーションは従来コンピューターで効率的に行うことができる。したがって、大規模なイジング問題を従来コンピューターで解くことが可能となる。しかも、そのシミュレーションは、変数の同時更新が可能な連立常微分方程式の数値計算であり、並列計算により高速化できる。これは、逐次更新しか許さず、並列計算に適さない、シミュレーテッドアニーリング(SA: Simulated Annealing)と呼ばれるイジング問題の従来解法に比べて、優位な特長である。こうして、古典分岐マシンを数値シミュレーションするという、従来コンピューターを有効利用した新しいアプローチが発見された。

古典分岐マシンの運動方程式は複雑で高速なシミュレーションには適さないが、ハミルトン方程式という特殊な形をしているため、工夫次第で高速化できると期待された。そこで、運動量がゼロ付近を振動するという点に着目して運動量に比例する項を幾つか省略して計算量を減らした。更に運動量の時間微分が位置しか含まず、位置の時間微分が運動量しか含まない、いわゆる分離型のハミルトン方程式に改変することで、シンプレクティックオイラー法と呼ばれる安定でシンプルな数値解法を適用できるようにした。こうして得られたのがSBアルゴリズムである⁽⁶⁾。この第1世代SBアルゴリズムは古典分岐マシンと同様、古典断熱定理に基づいているため、断熱SB(aSB: adiabatic SB)と呼ぶ。

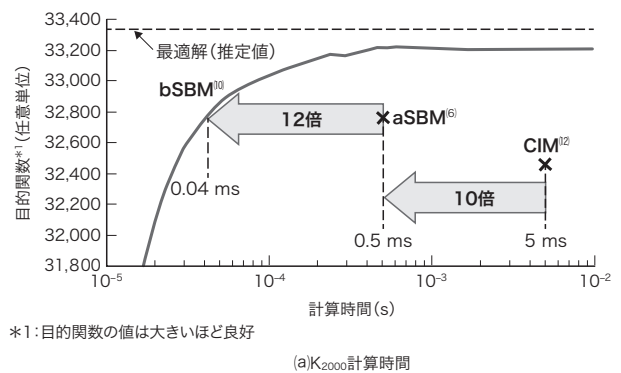
東芝と東芝デジタルソリューションズ(株)は2021年2月、二つの第2世代SBアルゴリズムを発表した⁽¹⁰⁾。そのうちのひとつである弾道SB(bSB: ballistic SB)では、aSBの4次のポテンシャル項を除き、その代わりに、 $x_i = \pm 1$ に完全非弾性衝突壁を設けた。これにより、壁に向かって突き進む弾道的な分岐現象が起り、解への収束が高速化されただけでなく、 $x_i = \pm 1$ に厳密に収束することから、aSBに存在したアナログエラーを低減でき、解の精度が向上した⁽¹⁰⁾。もう一つの離散SB(dSB: discrete SB)では、bSBの方程式中の問題依存項に含まれる x_j を s_j に置き換えることでアナログエラーを更に低減するとともに、この離散化によって生じるエネルギー保存則の破れに起因する疑似量子トンネル効果も起り、解の精度が更に向上した⁽¹⁰⁾。

更に、ハミルトン系に温度を導入する能勢-フーバー法をヒントに、加熱項をbSBやdSBに導入して性能を向上させ

る加熱SBを2022年6月に発表した⁽¹¹⁾。

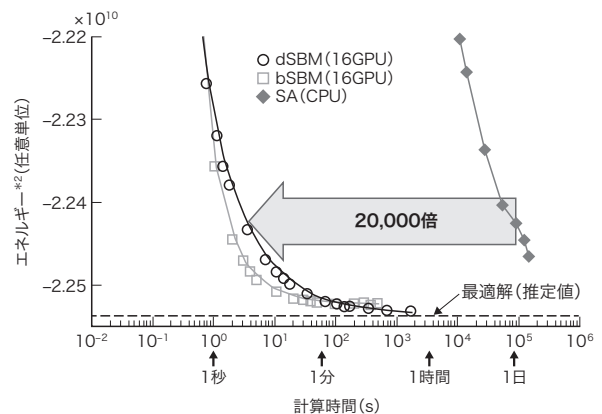
3. シミュレーテッド分岐マシンの性能

図2にSBMの基本性能を示す。図2(a)は、代表的なベンチマーク問題である K_{2000} と呼ばれる最大カット問題(全結合の2,000スピニング問題と同値)に対するFPGA実装SBMの結果を表している。最適解の約98%の近似解に到達するまでの計算時間で比較した場合、2019年に発表された第1世代のaSBM(aSBを用いるSBM。bSBM, dSBMも同様)は、2016年にScience誌で発表されたレーザーを用いたイジング問題専用機であるコヒーレントイジングマシン(CIM: Coherent Ising Machine)⁽¹²⁾よりも約10倍高速であった。また、2021年に発表された第2世代のbSBMは、aSBMの12倍と更に高速であった。一方で、bSBMは K_{2000} の最適解(推定値)には到達できなかった。これに対



*1: 目的関数の値は大きいほど良好

(a) K_{2000} 計算時間



*2: エネルギーの値は小さいほど良好

(b) 1%ランダム結合の100万スピニング問題の計算時間

図2. SBMの基本性能

K_{2000} と呼ばれる最大カット問題に対する計算時間の比較から、FPGA実装したaSBMはCIMより約10倍高速であり、bSBMはaSBMより更に12倍高速であることが分かる。また、1%ランダム結合の100万スピニング問題に対する計算時間の比較では、16GPUクラスター実装した第2世代のSBMがCPU実装SAより2万倍高速であることが分かる。

Basic performance of SBM

し、もう一つの第2世代SBMであるdSBMは K_{2000} の最適解に到達することができ、dSBMが高精度であることを実証した⁽⁹⁾。dSBMは最適解到達時間による比較において、CIMだけでなく量子アニーラーをも上回る結果を出している⁽¹⁰⁾。更に、加熱SBによって更なる高速化の可能性も示されている⁽¹¹⁾。

図2(b)は、1%ランダム結合の100万スピニング問題に対する16 GPUクラスター実装SBMの結果を表している^(注2)。CPU実装SAの約2万倍高速であり、dSBMは推定された最適解に、約30分でほぼ到達できた。

大規模問題を更に高速に解くために、SBM専用のFPGAクラスタリング技術も開発している。また、8台のFPGAをダブルリングの光ファイバーリンクで結合し、問題サイズが大きくなっても計算効率が劣化しないというスケールアウト性を実証している⁽¹³⁾。

4. あとがき

量子分岐マシンという独自の量子コンピューターの研究を通じて発見された、SBアルゴリズムという量子インスパイアード技術により、市販の従来コンピューターを用いて、量子アニーラーなどの専用機をしのぐ性能を実現した。

この高い性能と実用性を生かし、様々な分野において、革新的なサービスの早期実現を目指していく。

文 献

- (1) Goto, H. Bifurcation-based adiabatic quantum computation with a nonlinear oscillator network. *Scientific Reports*. 2016, **6**, 21686.
- (2) Goto, H. Universal quantum computation with a nonlinear oscillator network. *Phys. Rev. A*. 2016, **93**, 050301(R).
- (3) Goto, H. Quantum Computation Based on Quantum Adiabatic Bifurcations of Kerr-Nonlinear Parametric Oscillators. *J. Phys. Soc. Jpn.* 2019, **88**, 061015.
- (4) Wang, Z. et al. Quantum Dynamics of a Few-Photon Parametric Oscillator. *Phys. Rev. X*. 2019, **9**, 021049.
- (5) Grimm, A. et al. Stabilization and operation of a Kerr-cat qubit, *Nature*. 2020, **584**, p.205-209.
- (6) Goto, H. et al. Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems. *Science Advances*. 2019, **5**, eaav2372.
- (7) 東芝. “量子インスパイアード最適化ソリューションSQBM+™”. <<https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.html>>, (参照 2022-08-08).
- (8) Barahona, F. On the computational complexity of Ising spin glass models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1982, **15**, 10, 3241.
- (9) Lucas, A. Ising formulations of many NP problems. *Frontiers in Physics*. 2014, **2**, 5. <<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2014.00005/full>>, (accessed 2022-08-08).
- (10) Goto, H. et al. High-performance combinatorial optimization based on classical mechanics. *Science Advances*. 2021, **7**, eabe7953.
- (11) Kanao, T.; Goto, H. Simulated bifurcation assisted by thermal fluctuation. *Communications Physics*. 2022, **5**, 153.
- (12) Inagaki, T. et al. A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems. *Science*. 2016, **354**, 603.
- (13) Tatsumura, K. et al. Scaling out Ising machines using a multi-chip architecture for simulated bifurcation. *Nature Electronics*. 2021, **4**, p.208-217.

(注2) このような大規模問題はメモリーサイズが比較的小さいFPGAでは現状扱うことが難しく、複数のGPUを高速リンクで結合したGPUクラスターを用いる。



後藤 隼人 GOTO Hayato, Ph.D.
研究開発センター ナノ材料・フロンティア研究所
フロンティアリサーチラボラトリー
博士(理学) 日本物理学会・応用物理学会会員
Frontier Research Lab.