

# 量子アニーリング方式の古典アニーリング方式に対する性能評価と彩色問題を解くためのハミルトニアン構築

田中智也

2019 年 2 月 11 日

## 目次

1	概要	1
2	グラフ彩色	1
3	量子アニーリングの理論	2
4	量子的スピングラスモデルの経路積分表示	4
5	プログラム仕様	5
6	エミュレータの構築	7
6.1	量子アニーリングの挙動	7
6.2	エミュレーターの要件	8
6.3	実験	8
7	彩色問題への適用	9
8	彩色問題を解くための準備	11
8.1	スピングラスモデルへのマッピング	11
8.2	ハミルトニアン設計	11
9	彩色グラフの最適化	12

## 1 概要

本報告では、経路積分モンテカルロ法を用いて量子アニーリングマシンの実装を行い、性能評価をする。また、構築した量子アニーリングマシンを用いて、NP 完全問題として知られているグラフ彩色問題を解く。

## 2 グラフ彩色

ここでは、グラフ彩色問題について簡単に述べる。グラフ彩色問題では、与えられた無向グラフ  $G = (V, E)$  を色で塗り分ける事を考える。ただし、 $V$  は頂点の集合を表し、 $E$  は辺の集合を表す。なお辺は 2 つの隣接した頂点により構成される。ここで、 $u, v$  を辺で結ばれた 2 頂点として、 $c: V(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, k\}$  s.t.  $c(u) \neq c(v)$

のようにマッピングすることにより、隣接した頂点が同じ色とならないように  $k$  色で頂点を塗り分けることを  $k$ -彩色と呼ぶ。図 1 は  $|V| = 5$  のグラフを  $k=3$  として、3 色で塗り分けたものである。  $k$ -彩色問題は NP 完全問題と知られており、多項式時間で解くことはできない。そこで、量子アニーリングマシンを用いて効率的に解を探索することで、最適な解を求める事を考える。

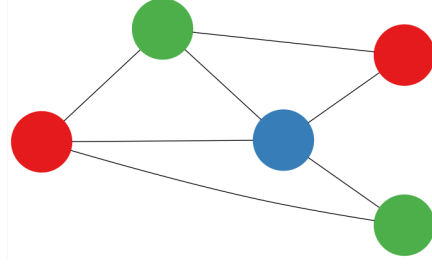


図 1: 彩色グラフの例

### 3 量子アニーリングの理論

グラフ彩色問題に取り掛かる前に、まず量子アニーリングマシンのエミュレーターを構築する。第 1 に、文献 [1] ~ [2] を参考にして量子アニーリングマシンの背景にある理論をまとめておく。量子アニーリングでは、状態の重ね合わせに由来する量子ゆらぎを用いる。今回は、スピングラス模型を対象として、その重ね合わせ状態を考えることにする。  $N \times N$  のサイトを持つスピングラス模型のハミルトニアン  $\hat{H}$  を、

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{ij}^N J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^x \\ &\equiv \hat{H}_0 + \hat{H}_1\end{aligned}\tag{3.1}$$

とする。ここで、 $\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_i^z$  は、サイト  $i$  でのパウリ行列の  $x$  成分,  $z$  成分であり、式 (2) のように定義されている。

$$\hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\tag{3.2}$$

また、任意のスピン配置  $s_a$  の波動関数  $|s_a\rangle$  は、 $N^2$  個のスピン系の直積空間における 1 つの元として、

$$|s_a\rangle = |\sigma_1\rangle |\sigma_2\rangle \cdots |\sigma_{N^2}\rangle\tag{3.3}$$

と表される。

以上のハミルトニアン  $\hat{H}$  と波動関数  $|s_a\rangle$  を用いて、スピングラス模型についてのシュレディンガー方程式を立てると、

$$\hat{H} |s_a\rangle = E_a |s_a\rangle\tag{3.4}$$

となる。

ここで、式 (2.4) の意味を考えてみることにする。まず、式 (2.1) において横磁場  $\Gamma$  が非常に小さく、 $H_0$  項が支配的である状況を考える。このとき、式 (2.4) は近似的に

$$\hat{H}_0 |s_a\rangle = E_a |s_a\rangle\tag{3.5}$$

と書ける. 式 (2.5) の左辺に,  $\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \sum_{ij}^N J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$  と式 (2.3) を代入して得られる式のうち,  $\hat{\sigma}_i^z |\sigma_i\rangle$  について, 上向きのスピン  $|\uparrow\rangle$  を  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  下向きのスピン  $|\downarrow\rangle$  を,  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  と表すと,

$$\hat{\sigma}_i^z |\sigma_i\rangle = \sigma_i |\sigma_i\rangle = \begin{cases} (+1) |\sigma_i\rangle & (|\sigma_i\rangle = |\uparrow\rangle \text{ の場合}) \\ (-1) |\sigma_i\rangle & (|\sigma_i\rangle = |\downarrow\rangle \text{ の場合}) \end{cases} \quad (3.6)$$

と表される. 式 (2.6) を用いて, 式 (2.4) の左辺  $\hat{H}_0 |s_a\rangle$  を計算すると,

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |s_a\rangle &= -\frac{1}{2} \sum_{ij}^N J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z |s_a\rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j |s_a\rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$(\sigma_i, \sigma_j = \{1, -1\}) \quad (3.8)$$

となる. 式 (2.7) の意味することは, スピングラス模型を観測したとき, ある確定したスピン配置  $|s_a\rangle$  を取っており, そのエネルギーが  $-\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j$  となるということである. このエネルギーは古典的スピングラス模型のエネルギーと一致する. つまり  $\hat{H}_0$  が支配的な状況では, スピングラス模型は重ね合わせを取らず, ある一つの状態に収まる.

次に, 式 (2.1) において横磁場  $\Gamma$  が非常に小さく,  $H_1$  項が支配的である状況を考える. このとき, 式 (2.4) は近似的に

$$\hat{H}_1 |s_a\rangle = E_a |s_a\rangle \quad (3.9)$$

と表される. 式 (2.9) の左辺のうち,  $\hat{\sigma}_i^x \hat{s}_a$  について,

$$\hat{\sigma}_i^x \hat{s}_a = \lambda \hat{s}_a \quad (3.10)$$

とすると, 最大固有値  $\lambda_1$  に対応する固有ベクトルは  $\frac{|\sigma_i\rangle + |-\sigma_i\rangle}{2}$  となる. よって, 式 (2.9) の基底状態に対応する波動関数  $|s_a\rangle$  は,  $N$  個の状態の重ね合わせとして

$$\begin{aligned} |s_a\rangle &= 2^{-N/2} (|\sigma_1\rangle + |-\sigma_1\rangle) (|\sigma_2\rangle + |-\sigma_2\rangle) \\ &\quad \cdots (|\sigma_N\rangle + |-\sigma_N\rangle) \end{aligned} \quad (3.11)$$

となる. つまり  $\hat{H}_1$  が支配的な状況では, スピングラス模型はすべての状態の重ね合わせの状態を取る.

以上をまとめると,  $\hat{H}_1$  が支配的な状況ではスピングラス模型は複数の状態の重ね合わせの状態を取り,  $\Gamma$  を小さくするにつれて状態が収束していき,  $\hat{H}_0$  が支配的な状況になると, スピングラス模型は一つの状態に収束する. この  $\Gamma$  を徐々に小さくしていくという戦略は, 量子アニーリングマシンの実装において非常に重要となる.

実際の量子アニーリングマシンでは, コンピュータ内に量子状態をとることのできるデバイスを構築することになる. しかし, 今回考えるのは量子アニーリングマシンのシミュレートであり, 複数の状態の重ね合わせをとる量子的なスピングラス模型をソフトウェア上で表現する必要がある. これを可能とするために, 次章では, PIMC を用いてひとつの量子的スピングラス模型を, 多体の古典的スピングラス模型に展開することを考える.

## 4 量子的スピングラス模型の経路積分表示

式 (2.1) で与えられるハミルトニアンで分配関数  $Z$  を表示すると,

$$\begin{aligned} Z &= \sum e^{-\beta E_a} \\ &= \sum_a^{2^N} \langle s_a | e^{-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)} | s_a \rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

ここで, 鈴木・トロッター分解を用いると, 式 (2.2) の最右辺の  $e^{-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)}$  は,

$$\begin{aligned} e^{-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_1)} &= \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1})^m \\ &= \underbrace{(e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1})(e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1}) \cdots (e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1})}_{m \text{ 個}} \end{aligned} \quad (4.2)$$

と展開される. 式 (3.2) を式 (3.1) に代入すると, 分配関数  $Z$  は,

$$Z = \sum_a^{2^N} \langle s_a | \underbrace{(e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1})(e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1}) \cdots (e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{m} \hat{H}_1})}_{m \text{ 個}} | s_a \rangle \quad (4.3)$$

となる. 文献 [1] によれば, 式 (3.3) を変形していくと分配関数  $Z$  は, 次のような形になる.

$$Z = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{a_1, a_2, \dots, a_m}^{2^N} \prod_{k=1}^m [\frac{1}{2} \sinh(\frac{2\beta\Gamma}{m})]^{N/2} \exp(\frac{\beta}{2m} \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{j,k}^{(a_k)} + \beta \tilde{J} \sum_i^N \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{i,k+1}^{(a_k)}) \quad (4.4)$$

$$= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{a_1, a_2, \dots, a_m}^{2^N} [\frac{1}{2} \sinh(\frac{2\beta\Gamma}{m})]^{Nm/2} \exp(\frac{\beta}{2m} \sum_k^m \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{j,k}^{(a_k)} + \beta \tilde{J} \sum_k^m \sum_i^N \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{i,k+1}^{(a_k)}) \quad (4.5)$$

ただし,

$$\tilde{J} = -\frac{1}{2\beta} \ln \tanh(\frac{\beta\Gamma}{m}) \quad (4.6)$$

である.  $Z$  をさらに変形すると,

$$Z = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{a_1, a_2, \dots, a_m}^{2^N} [\frac{1}{2} \sinh(\frac{2\beta\Gamma}{m})]^{Nm/2} \exp(-\beta[-\frac{1}{2m} \sum_k^m \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{j,k}^{(a_k)} - \tilde{J} \sum_k^m \sum_i^N \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{i,k+1}^{(a_k)}]) \quad (4.7)$$

となる. ここで, 分配関数が,

$$Z = \exp(-\beta E) \quad (4.8)$$

で表されたことを思い出すと,

$$E(a_1, a_2, \dots, a_m) = -\frac{1}{2m} \sum_k^m \sum_{i,j}^N J_{ij} \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{j,k}^{(a_k)} - \tilde{J} \sum_k^m \sum_i^N \sigma_{i,k}^{(a_k)} \sigma_{i,k+1}^{(a_k)} \quad (4.9)$$

として,

$$Z = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{a_1, a_2, \dots, a_m}^{2^N} [\frac{1}{2} \sinh(\frac{2\beta\Gamma}{m})]^{N/2} \exp(-\beta E(a_1, a_2, \dots, a_m)) \quad (4.10)$$

と表すことができる. ただし,  $E(a_1, a_2, \dots, a_m)$  は, スピン配置  $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_m}$  によって与えられるエネルギーを表す.

式 (3.10) は、トロットースライスごとに全通り ( $2^N$  通り) のスピン配置を考え、その分配関数の和を取っているものと捉えることができ、項数は  $2^N \cdot m$  となる。ここで、出発点であった式 (3.1) と、「鈴木・トロッター分解+式変形」によって導かれた式 (3.10) を比較してみる。式 (3.1) では、 $\hat{H}_1$  に起因する式 (2.11) のような量子的な状態の重ね合わせが存在した。一方、式 (3.10) では、その重ね合わせが  $2^N \cdot m$  個の和に帰着していることがわかる。また、式 (3.10) を用いれば、 $a_1, a_2, \dots, a_m$  を具体的にある値に定めて  $Z$  を評価することにより、基底状態を探ることが可能となる。プログラム上では、式 (3.9) を評価することによって基底状態を探るのが有効であろう。以上でもって、式 (3.1) で表されるような 1 つの量子的なスピングラス模型の分配関数が、複数の古典的なスピングラスの分配関数の和（経路積分形）として表現されたといえる。

最後に、式 (3.9) を観察し、量子アニーリングの挙動を考える。式 (3.9) 第 1 項は  $m$  個の古典的スピングラス模型の平均のエネルギーを表し、第 2 項は  $m$  個の古典的スピングラス模型がそれぞれに相互作用することを示唆している。2 章の最後では、横磁場  $\Gamma$  を小さくしていくことで、スピングラス模型を一つの状態に収束させることができることを述べた。式 (3.9) 第 2 項の  $\tilde{J}$  は  $\Gamma$  が小さくなるにつれて大きくなるため、第 2 項が式全体に与える影響は徐々に大きくなっていく。また、第 2 項の、 $\sigma_{i,k}, \sigma_{i,k+1}$  について、 $\sigma_{i,k}, \sigma_{i,k+1}$  のスピンの向きがそろったときに  $E$  は小さな値をとるため、各トロットースライスは横磁場  $\Gamma$  が小さくなるに連れてスピンの向きを揃えていくことがわかる。

以上より、式 (3.9) でエネルギーが測定されるスピングラス模型を実装した仮想的な量子アニーリングマシンでは、横磁場  $\Gamma$  が大きいときには各トロットースライスが独立に動きながら基底状態に近づいていき、 $\Gamma$  を小さくするに連れてトロットースライスの向きが徐々に揃っていくことがわかる。この性質は実際の量子アニーリングマシンの性質をある程度再現できているといえる。再現できていない点としては、以下の 2 点が挙げられる。

1. 実際の量子アニーリングマシンでは、複数の重ね合わせった状態は完全に並行して状態遷移する。一方通常の計算機では一つの CPU に複数の状態 (複数のトロットースライス) を割り当てなければならない。よって、CPU 時間は実際の量子アニーリングマシンより長くなる。ただし、並列化して 1 つのスライスに 1 つの CPU を割り当てれば再現性は向上する。

2. 実際の量子アニーリングマシンでは、非常に大きい数の重ね合わせ状態を実現することが可能である。現状、2000bit の量子アニーリングマシンが実現されているが<sup>1</sup>、2000bit の量子アニーリングマシンが表現できる重ね合わせ状態の数は  $2^{2000} = (2^{10})^{200} \simeq (10^3)^{200} = 10^{600}$  個である。しかし、現実にはエミュレータ内で実現できる  $m$  の数はせいぜい 10~1000 個ほどである。

しかし、エミュレータはランダムイジング模型を用いて最適化問題を解くという目的は果たしており、性能の劣った量子アニーリングマシンと捉えればよい。性能が劣っていても、量子アニーリングマシンの性質は十分に観察することができるだろう。次章では、古典アニーリングと比較しながら、量子アニーリングマシンの性能を最適性と最適値の信頼性、処理速度の 3 点から評価する。

## 5 プログラム仕様

ここでは、3 章に示した理論を用いて、量子アニーリングを実際にも実装することを考える。アルゴリズムは文献 [1] を参考にして次のように実装した。

### アルゴリズム

<sup>1</sup> 「量子アニーリングによる量子コンピューティングの現状と未来」西森秀俊氏講演レポート

1. 各  $\Gamma$  ステップにおいて, サイト数だけ ( $N^2$  回) モンテカルロを回す.
2. 各モンテカルロステップで, メトロポリス法を用いて, スピン配置を更新する.
3.  $\Gamma, \beta$  の値を更新する.
4. 1 ~ 3 の繰り返し.
5. すべてのスライスのエネルギーが同じになればプログラムを終了する.

また, プログラムの MPI 並列化も行った. 並列プログラムの仕様を以下に箇条書きで示す.

- ・各プロセスは,  $m_{sub} = ((\text{トロッター数} / \text{プロセス数}) + 2)$  個のスライスをもつ.
- ・各プロセスは独立して, 担当するスピングラスの最適化を行う.
- ・各プロセスで, 以下の境界条件を適用する.

$$\begin{aligned} spin(:, :, m_{sub})[lower] &= spin(:, :, 2)[upper] \\ spin(:, :, 1)[upper] &= spin(:, :, m_{sub} - 1)[lower] \end{aligned}$$

- ・各プロセス内のすべてのスライスのエネルギーが同じになり, かつ各プロセスの最も下のスライスのエネルギーが全て同じになったとき, プログラムを終了する.

次に実行方法を示す.

#### 逐次プログラム

```
$ git clone https://github.com/thanatoth/QuantumAnnealing.git
$ cd ./QuantumAnnealing/base/src
$ make
$ cd ../grapher
$ make graph
$ make view
```

#### 並列プログラム (スーパーコンピュータ上)

```
 $\pi$ _vizfront 上で,
$ git clone https://github.com/thanatoth/QuantumAnnealing.git
$ cd ./QuantumAnnealing/parallel/src
$ make
$ cd ../job
$ qsub js_qa.sh
```

## 6 エミュレータの構築

### 6.1 量子アニーリングの挙動

まず、図2のような簡単な構造のスピングラス模型の最適値を求めることを考える。パラメータ、 $\beta$ ,  $\Gamma$  の更新方法は暫定的に以下のように設定した。

- ・  $m = 10$
- ・  $\Gamma_0 = 3$
- ・  $\Gamma$  は,  $\Gamma = \Gamma * 0.99$  と更新し, 非線形に減少させる.
- ・  $\beta$  は,  $\beta = 10$  に固定する.

図2のスピングラス模型は、イジング模型と同様の構造で、カップリング  $J$  を  $[-1,1]$  としたものと考えて良い。ただし、図2において点は各サイトを、線は相互作用を示す。

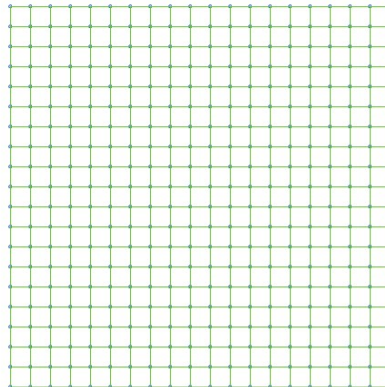


図2: 実験対象としたスピングラス模型

図2のスピングラス模型を対象として、まず量子アニーリングを用いた最適解探索の挙動を調べる。図2はスライス数を5としたときの、各スライスの1サイトあたりのエネルギー遷移を示している。各スライスの状態が横磁場を弱くしていきながらステップを重ねるに連れて、一つの状態に収束していく様子が見て取れる。

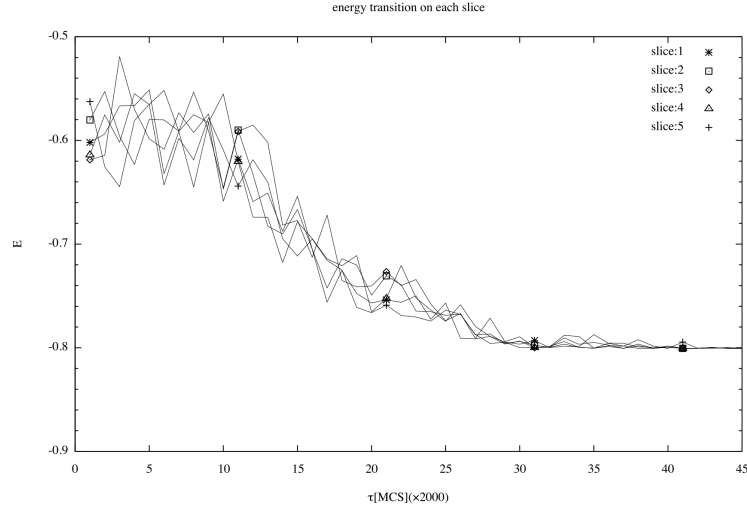


図 3: 各スライスのエネルギー遷移

## 6.2 エミュレーターの要件

まず量子アニーリングと古典アニーリングの関係について考える. 簡単のため, 量子アニーリング過程を, 古典アニーリングを施した後に行うとする. 量子アニーリング過程は単に, トロッター数だけ並行して古典アニーリングを行い, 最も低いエネルギーをもつ状態を取り出す過程であると捉えることができる. よって, 古典アニーリングによって得られる解の期待値が式 (5.1) で表されるのに対して, 量子アニーリングによって得られる解の期待値は式 (5.2) で表される. ただし,  $M = 1, 2, \dots, m$  である.

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N_{trial}} \sum_i^{N_{trial}} E_i \quad (6.1)$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N_{trial}} \sum_i^{N_{trial}} \min_{j \in M} \{E_j\} \quad (6.2)$$

$m$  の値を十分大きく取れば,  $\min_{j \in M} \{E_j\} < E_i$  が成立するため, 量子アニーリングによって得られる解の期待値は古典アニーリングで得られる解の期待値よりも小さな値となる. よって, 量子アニーリングで得られる解の値が古典アニーリングで得られる解よりも小さくなることは, エミュレータ設計における重要な要件となる.

## 6.3 実験

図 2 のスピングラス模型を対象として, 古典アニーリングと量子アニーリングの比較を行った. 量子アニーリングでは, パラメータを  $m = 10, \Gamma_0 = 3, \beta = 10$ , スケジューリング関数を  $\Gamma = \Gamma_0 \alpha^\tau$  に, 古典アニーリングでは  $\beta_0 = 3, \beta = \beta_0 \alpha^\tau$  と設定した. ただし,  $\alpha = 0.995$  であり,  $\tau$  は  $N$ (サイト数) モンテカルロステップごとに 1 増える値である. 結果を表 1 に示す. ただし, 期待値は 15 回の試行により算出し, SA の収束は値が変化しなくなったステップ数  $(E(\tau) - E(\tau - 1) < 10^{-9})$  が初めて満たされたときの  $\tau$  を表す.

表 1 から, 量子アニーリングのほうが, 最適性, 値の信頼性 (標準偏差の小ささ), 収束速度全てにおいて優れていることがわかる. 以上より, 少なくとも単純なスピングラス模型に対しては, 量子アニーリング手法は, 古典アニーリング手法より優れた性能を持つことが確かめられた.



表 1: 古典アニーリングと量子アニーリングの比較

	$\langle E \rangle$	$\sigma_E$	ステップ数 ( $\tau$ ) の期待値
QA	-322.17	1.82	847
SA	-315.35	2.296	1324

## 7 彩色問題への適用

次に, これまで構築した量子アニーリングマシンを, 冒頭で述べた彩色問題に適用する. 今回彩色の対象とした図形は図 4 のようなものである. 図 4 は, 領域の左上, 左下, 右上, 右下のうちのいずれか 2 つの点と領域の中央の点で構成される 4 つの三角形をもとに, 再帰的に中央に 3 つの三角形を生成していくことで描かれる図である.

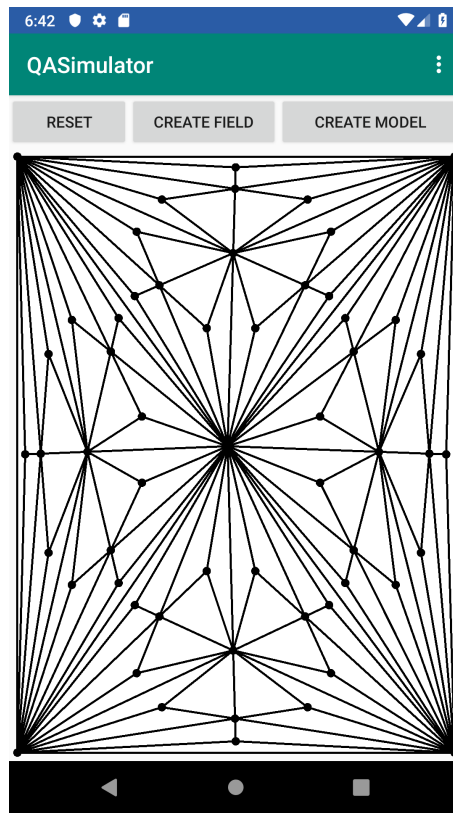


図 4: 彩色対象の図形

図 4 を, 図 1 と同様にグラフ化すると図 5 のようになる.

彩色問題を量子アニーリングマシンを解くためには, ハミルトニアン与设计と, グラフのスピングラス模型へのマッピングが必要である. 次章では, 以上について順に議論していく.

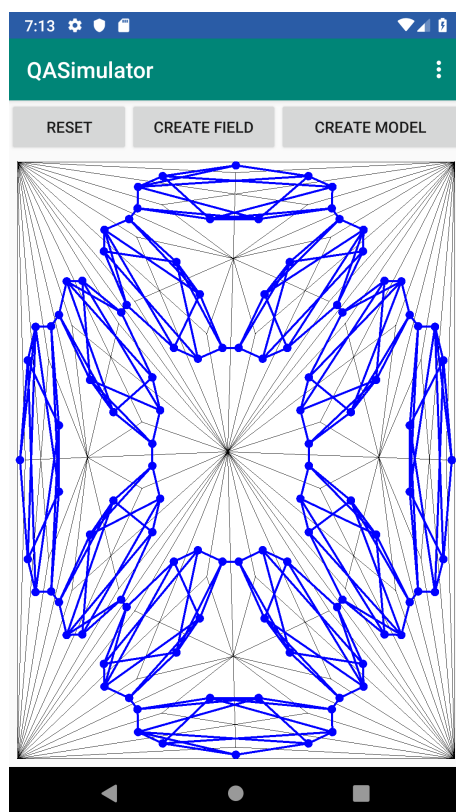


図 5: 彩色対象の図形のグラフ化

## 8 彩色問題を解くための準備

### 8.1 スピングラス模型へのマッピング

まず, 図5のような彩色グラフをスピングラス模型にマッピングすることを考える. 以後  $k$ -彩色のことを, パラメータの都合上  $C$ -彩色と呼ぶ.  $C$ -彩色では, まず  $C$  の数だけスピングラス模型を用意する. そして, それぞれのスピングラス模型に対して  $m$  個のトロッタースライスを考える. その上で, エネルギーは重ね合わせが考慮された  $c$  個のスピングラス模型のエネルギーの和として求める. また, スピングラス模型の各サイトは図5のグラフにおける各頂点 (ノード) を表し, スピンは  $1$  または  $-1$  をとる.

### 8.2 ハミルトニアン設計

3章で議論したのと同様に, ハミルトニアンを横磁場項  $\hat{H}_1$  とそれ以外の項  $\hat{H}_0$  に分けて考える. 彩色グラフが満たすべき条件は以下である.

- ・一つの頂点には一つの色のみが割り当てられる (条件 1)
- ・となりあう頂点は異なる色である (条件 2)

以上の条件を  $\hat{H}_0$  に適用すると,  $\hat{H}_0$  は  $N$  をサイト数,  $C$  を塗り分ける色の数として, 式 (8.1) のような形となる.

$$\hat{H}_0 = A \sum_i^N (1 - \sum_{c=1}^C x_{i,c})^2 - \frac{1}{2m} \sum_k^m \sum_{i,j}^N J_{ij} \sum_{c=1}^C \hat{\sigma}_{i,c} \hat{\sigma}_{j,c} \quad (8.1)$$

ただし, 式 (8.1) 第1項目  $x_{i,c}$  は式 (8.2) のように定義される.

$$x_{i,c} = \begin{cases} 0 & (\hat{\sigma}_{i,c} = |\uparrow\rangle) \\ 1 & (\hat{\sigma}_{i,c} = |\downarrow\rangle) \end{cases} \quad (8.2)$$

式 (8.1) 第1項目は, 1つの頂点に1つの色が割り当てられている場合にのみ値が0となり, それ以外の場合では正の値を取る. つまり, 第1項目は条件1を反映しており, ペナルティ項として機能する. 次に第2項目について考える. カップリング  $J_{ij}$  を

$$J_{ij} = \begin{cases} -1 & (\text{ノード } i \text{ とノード } j \text{ が隣接する}) \\ 0 & (\text{ノード } i \text{ とノード } j \text{ が隣接しない}) \end{cases} \quad (8.3)$$

とすると, 隣接するノード間にのみ, スピンを逆向きにしようとするような相互作用が働くことになる. よってスピン配置が最適化されたとき,  $J_{ij} = -1$  の相互作用が働くノードは, 互いに異なるスピンを持ち, それは異なる色を持つことを意味する. つまり, 第2項目は条件2を反映しているといえる. 最後に  $\hat{H}_1$  であるが, これは単純に,

$$\hat{H}_1 = -\tilde{J} \sum_i^N \sum_c^C \hat{\sigma}_{i,c} \hat{\sigma}_{i,c} \quad (8.4)$$

となる. 以上の  $H_0$  と  $H_1$  から, エネルギー  $E$  を求めると,

$$E = A \sum_k^m \sum_i^N (1 - \sum_{c=1}^C x_{k,i,c})^2 - \frac{1}{2m} \sum_k^m \sum_{i,j}^N J_{ij} \sum_{c=1}^C \sigma_{k,i,c} \sigma_{k,j,c} - \tilde{J} \sum_k^m \sum_i^N \sum_c^C \sigma_{k,i,c} \sigma_{k+1,i,c} \quad (8.5)$$

となる.

## 9 彩色グラフの最適化

ここでは, 前章で設計したハミルトニアンを 6 章で構築した量子アニーリングマシンに適用し, 実際に図 4 で示した彩色問題を解く. 彩色問題で設定しなければならないパラメータは  $\Gamma_0$ ,  $\beta$ ,  $m$  と, 式 (8.5) 中の  $A$  である.  $A$  を 0.05 刻みで変化させて検証した結果  $J = [-1, 1]$  という条件のもとでは,  $A = 0.85$  とすれば条件 1, 条件 2 を最も満足することがわかった. パラメータは 6.3 節での実験と同様に,  $\Gamma_0 = 3$ ,  $\beta = 10$ ,  $m = 10$  とし, スケジュール関数は,  $\alpha = 0.999$  として,  $\Gamma = \Gamma_0 \alpha^\tau$  とした. また, グラフ彩色問題では, 任意のグラフが 4 色で塗り分けられることが知られている. よって, 今回は 4 色で塗り分けることとした. 彩色結果を図 6 に示す.

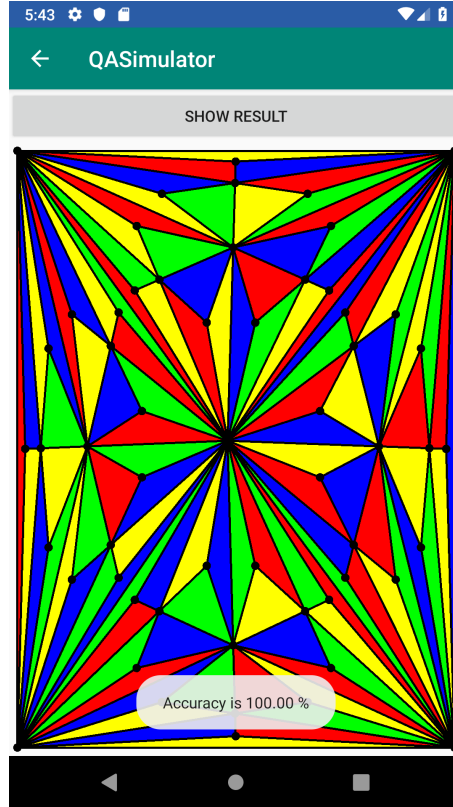


図 6: 彩色結果

このとき, 図中の辺の数 320 のうち, 隣接するノード  $u, v$  の色が異なる数の割合は,

$$320/320 \cdot 100 = 100.00 \quad (9.1)$$

となった. こうして, 図 4 のような図形を量子アニーリング法を用いて 4 色で正確に彩色することに成功した. また, 彩色問題のハミルトニアンの設計が妥当であることが実証されたといえる.

## 参考文献

- [1] R. Martonak, G. E. Santoro, E. Tosatti, "Quantum annealing by the path-integral Monte Carlo method: The two-dimensional random Ising model" (2002)

- [2] 田中宗, 栗原健一, 宮下精二 「量子アニーリング法を用いたクラスタ分析」 (2009)
- [3] A.Lucas "Ising formulations of many NP problems", Frontiers in Physics 12 February 2014
- [4] O.Titiloye and A.Crispin "Quantum annealing of the graph coloring problem", Discrete Optimization **8**, 376-384(2011)