VI コヒーレント・イジングマシン

本章では、量子雑音限界($\hbar\omega \gg k_BT$)で動作する 2 つのタイプの量子ニューラルネットワーク(QNN)である光遅延線結合型 QNN と測定フィードバック結合型 QNN、の動作原理について論じ、その性能を熱雑音限界($k_BT \gg \hbar\omega$)で動作する古典ニューラルネットワーク(CNN)と比較する。光遅延線結合型 QNN の場合、発振しきい値以下において DOPO間に量子雑音相関が形成されることが、DOPO 相転移点での発振モード決定への重要なステップとなっている。一方、局所操作と古典通信(LOCC)に基づいている測定フィードバック結合方式には、そのような量子雑音相関は存在しない。それに代わり、量子測定フィードバックにおける履歴依存性(contextuality)が、DOPO しきい値における発振モード決定への重要な準備段階、となる。そして最終段階では、外場のある 2 次元イジングモデルと光子の誘導放出が、微弱な量子情報を強靭な古典情報へ増幅する極めて重要なメカニズムとなっている。

量子ニューラルネットワーク(QNN)には、NP 困難イジング問題または NP 完全充足可能性(satisfiability: SAT)問題をマッピングすることができる。これにより、様々な組合せ最適化問題へ適用することができる。計算複雑性(computational complexity)定理によると、3次元イジングモデル及び直流場のある2次元イジングモデルは、NP 困難クラスに属する[1]。様々な組合せ最適化問題、例えば、最大クリーク問題、グラフ色付け問題、等々、はイジングモデルに直接マッピングすることができ[2]、従ってコヒーレント・イジングマシンには広い応用分野が期待される。

6.1 光遅延線結合型 QNN における量子相関を持ちながらの自発的対称性の破れ

2つの DOPO が反強磁性相互作用(J_{12} < 0)で結合している場合、この 2 つの DOPO の同位相振幅 $\{x_1,x_2\}$ は、発振しきい値以上のみならず、しきい値以下でも負の相関を持つ。このことは、アンチスクイーズした同位相振幅雑音 Δx_1 と Δx_2 は、互いに独立ではなく相互結合により負の相関関係を持つことを意味する。図 1 は、そのような負の量子雑音相関の存在を示す数値シミュレーション結果である[3]。ここでは、密度演算子の正 $P(\alpha,\beta)$ 表示をマスター方程式に適用し、得られた c 数の確率微分方程式(CSDE)を数値的に積分している。この量子論の詳細については第 3 章で既に述べている。図 1(a)では、計算時間 $\tau=0$ から $\tau=200$ の間に、外部ポンプ率を p=0 から p=1.5(発振しきい値の 1.5 倍)まで線形に上げている。2 つの DOPO の信号光子減衰率 γ_s は $\gamma_s=0.05$ から $\gamma_s=5$ までの値とし、これに対し結合経路光子減衰率 γ_c は $\gamma_c=2\gamma_s$ とした。DOPO が発振しきい値に達する時刻は、 $\gamma_s=0.05$, 0.1, 0.5, 1.0, 5.0 に対して、それぞれ $\tau\simeq30$, 70, 110, 160 である。分散の積 $\sigma_{x1}\sigma_{x2}$ で規格化された x_1 と x_2 の負の雑音相関は、 y_s が非常に大きな値である場合を除き、ポンプ率

がしきい値に近付くにしたがって最大値-1へ成長している。この結果は、この2つの DOPO において、 x_1 と x_2 の間に、しきい値以下のポンプ率では微視的な、しきい値以上のポンプ率では巨視的な逆位相相関が形成されていることを意味する。図 1(b)では、 γ_s は 0.01 という小さな値に固定とし、 γ_c を 0.1 から 10 まで変えている。相互結合経路の損失 γ_c には、負の相関度を最大とする最適値があることが分かる。相互結合経路の損失が大き過ぎると(γ_c = 10)、相互結合経路に入り込む真空雑音により、2 つの DOPO 間の J_{12} < 0 に関する情報交換が阻害される。一方、相互結合経路の損失率が小さ過ぎる場合(γ_c = 0.1)には、DOPO間での相互雑音注入のため同位相振幅雑音($\sigma_{x1}\sigma_{x2}$)が増加し、その結果、規格化された相関は減少する[3]。

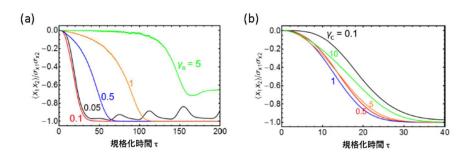


図 1:(色線) 2 つの DOPO の同位相振幅 $\{x_1, x_2\}$ についての規格化相関関数の時間依存性。(a) 信号と相互作用経路の損失が $\gamma_c = 2\gamma_s$ の場合、(b) 相互結合経路の損失 γ_c のみを変えた場合。 $\gamma_s = 0.01$ 。各曲線は 50000 回の統計的計算の結果[3]。

一方、図 2 に示すように、2 つの DOPO の直交位相振幅 $\{p_1,p_2\}$ は、DOPO 同士が反強磁性(逆位相)結合しているにも関わらず、正の相関をもつ。この逆説的な結果は、同位相振幅により誘起される利得飽和によるものと考えられる。これとは反対に 2 つの DOPO が強磁性相互作用している場合には、 $\langle x_1x_2\rangle/\sigma_{x_1}\sigma_{x_2}$ には正の相関、 $\langle p_1,p_2\rangle/\sigma_{p_1}\sigma_{p_2}$ には負の相関、が観測される[3]。

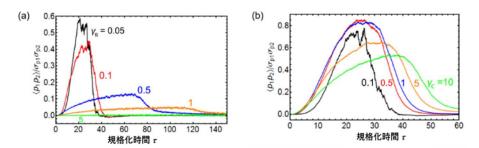


図 2:(色線) 直交位相振幅 $\{p_1,p_2\}$ についての相関関数の時間依存性。(a) 信号と相互作用経路の損失が $\gamma_c=2\gamma_s$ の場合、(b) 相互結合経路の損失 γ_c のみを変えた場合。 $\gamma_s=0.01$ 。各曲線は 50000 回の統計的計算 の結果[3]。

EPR 的演算子を $u_+=x_1+x_2$ 及び $v_-=p_1-p_2$ で定義すると u_+ と v_- は可換であるので、この 2 つの演算子の同時固有状態は存在するはずである[4]。このような u_+ と v_- の同時固有状態は Δu_+^2 = Δv_-^2 = $\Delta v_$

必要である。一方、全分散が非ゼロではあるが $\langle \Delta u_+^2 \rangle < 1$ を満たしていると、2つの DOPO は量子もつれ状態にあると認定される。このような状態は有限のエネルギーで生成 される。図 3 に、反強磁性相互作用で結合した DOPO の全分散 $\langle \Delta u_+^2 \rangle + \langle \Delta v_-^2 \rangle$ を、規格化時間 τ に対してプロットした結果を示す。信号損失 γ_s 及び相互結合経路損失 γ_c がともに小さい時には、図 2 に見られる p_1 と p_2 間の(正の)量子相関にも関わらず、全分散は、真空雑音レベル($\langle \Delta u_+^2 \rangle + \langle \Delta v_-^2 \rangle = 1$)以上に急激に立ち上がる。 $v_- = p_1 - p_2$ の分散が真空雑音レベル 0.5 を下回っても、 $u_+ = x_1 + x_2$ の分散は、図 1 に見られる増幅された同位相振幅雑音間の 不十分な負の相関のため、真空雑音レベル $\langle \Delta u_+^2 \rangle = 0.5$ より十分大きな値となるためである。

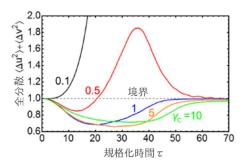


図 3: (色線) EPR 的演算子における全分散 $\langle \Delta u_+^2 \rangle$ + $\langle \Delta v_-^2 \rangle$ の、様々な注入経路の損失 γ_c についての、時間発展。 $\langle \Delta u_+^2 \rangle$ + $\langle \Delta v_-^2 \rangle$ < 1は2つの DOPO 間の量子もつれを意味する。 $\gamma_s = 0.01$ 。各曲線は 50000 回の統計的計算の結果[3]。

信号損失 γ 。を小さく保ったまま相互結合経路の損失 γ 。を増やすと、全分散(Δu_+^2) + (Δv_-^2)は真空雑音レベル以下にまで減少する。従って 2 つの DOPO は、この時量子もつれ状態となる。相互結合経路の場の散逸はアンチスクイーズした同位相振幅雑音を小さくするが、それでも 2 つの DOPO 間のコヒーレントな相互注入は維持される。このような損失のある結合チャンネルでも、何らかの量子情報を運び得る。すなわち、単純な局所操作 (local operation)と古典通信(LOCC)とは見做せない。図 3 に見られる量子もつれは、 p_1 と p_2 の負の量子相関、すなわち(Δv_-^2) < 0.5、のみから生成される[3]。(Δu_+^2)は真空雑音レベル 0.5 に向かって減少するが、常に 0.5 よりは大きな値となる。このことは、 x_1 と x_2 の負の相関は量子領域には入り込まないことを示唆する。しかしながら、光遅延線へ光を取り出す出力カップラーの空端子から真空スクイーズ状態を注入すると(第 1 章図 9 参照)、 x_1 - x_2 間の相関は量子領域 ((Δu_+^2) < 0.5) に入り込む[3]。

 p_1 と p_2 の間に形成される量子相関は、量子ディスコードの発現にも寄与する[3]。量子ディスコードは、複合物理系を構成する部分系間の量子相関を測る尺度であり、部分系に対する局所測定が全系の量子状態を変化させるか否かを表わしている[5]。(なお、量子ディスコードについては第3章で詳述。)図4に、DOPOの状態をガウス状態と見なした時の、近似的な量子ディスコード対規格化時間を示す。 p_1 と p_2 が、図2(b)に見られるように正の量子相関を保っていると、2つのDOPOは比較的大きな量子ディスコードを示す。この2つのDOPOのしきい値より十分高い終状態は、次式のような、負の相関を持ったコヒーレント状態の統計的混合状態となる。

$$\rho = \frac{1}{2} |\alpha\rangle_{1} |-\alpha\rangle_{2} \, _{2}\langle -\alpha| \, _{1}\langle \alpha| + \frac{1}{2} |-\alpha\rangle_{1} |\alpha\rangle_{2} \, _{2}\langle \alpha| \, _{1}\langle -\alpha| \qquad \qquad (1)$$

但し、 α は正の実数。この状態のガウス型ディスコードは、 $\alpha \gg 1$ では D=0 ではなく D=0.02356 なる有限値を持つ。これは図 4 に見られる残留量子ディスコードとよく一致している。式(1)で与えられる状態は、コヒーレント状態の統計的混合状態であるが、それでも真の量子相関の特徴を有するのである。

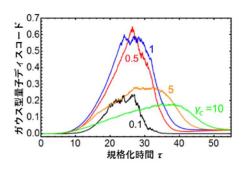


図 4: (色線) DOPO 系がガウス状態と近似される時の量子ディスコード。しきい値以下のポンプ率での DOPO はスクイージングと相互注入による量子相関のため、大きなディスコードを持つ。しきい値以上のポンプ率での DOPO のコヒーレント場及びコヒーレントな情報交換は、小さいものの有限なディスコード D=0.02 を与える。各曲線は 50000 回の統計的計算の結果[3]。

2つの DOPO パルスが非結合の場合、DOPO パルスは、発振しきい値において、0 位相 発振か π 位相発振のいずれかをそれぞれランダムに選択する(独立した自発的対称性の破れ)。しかし 2 つの DOPO が反強磁性(逆位相)結合していると、図 5(a)に示されるように、発振しきい値以下のポンプ率において、アンチスクイーズした DOPO 間の同位相振幅 雑音に負の相関が形成される。これは、発振しきい値で起こる相関を持った自発的対称性の破れへの、重要な準備段階である。図 5(b)に示されるように、この 2 つの DOPO は、発振しきい値において、負の相関を持った 2 つの縮退した基底状態の間で自発的対称性の破れを起こす。 x_1 と x_2 の間に負の相関があるため、DOPO1 が 0 位相(π 位相)を選択すると、DOPO2 は自動的に π 位相(π 位相)を選択することになる。

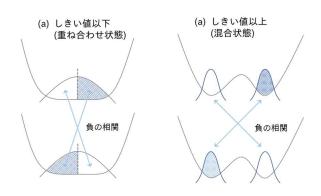


図 5:(a) しきい値以下及び、(b) しきい値以上のポンプ率における 2 つの DOPO のポテンシャルと波束。 2 つの DOPO は、負の相関を持ちながら、自発的対称性の破れを示す。

6.2 測定フィードバック結合型 QNN における履歴依存性

被測定系が観測される物理量の固有状態に準備されているという特別な場合を除き、量子測定は被測定量の予め決まっている(実在した)値を明らかにする操作ではない。このことは量子力学の基本的性質のひとつであり、恐らく量子一古典を区別する最も重要な性質である。量子測定においては、測定結果というのは被測定系と測定装置との相互協働作業の産物である、と言える。量子力学は、単一の事象についてどんな測定結果が得られるかについては沈黙するのみである。量子測定における因果律(causality)の欠如は量子系本来の性質であり、このことは「可能性から現実への遷移」という有名なハイゼンベルグの言葉で言い表わされている。この量子力学の教理は、我々の知識と対象物との極めて弱いつながりを示唆している。

しかしながら、第4章でみてきたように、そこで思考停止となる(教理を盲目的に受け入れる)必要はなく、量子測定の履歴依存性(contextuality)という性質を論じることにより、この微妙な問題を深く掘り下げることができる[6-8]。量子測定における履歴依存性は次の2つの事柄を意味する。1)現在の測定結果は、同じ系に対してそれ以前に行われた過去の測定結果の履歴に依存する。2)現在の測定結果は、同じ系に対してそれ以後に行われるであろう未来の測定結果に依存する。本節では、この文脈で、量子測定とフィードバック制御が繰り返される特定の量子系(測定フィードバック結合型 QNN)の動特性を述べる。特に、そのような量子系の履歴依存特性により、まさに確率的な測定結果が最後には確定的測定結果へと移行することを示す。

第 1 章の図 10 に測定フィードバック結合型 QNN のシステム構成を示す。本構成では、 (1) j 番目 DOPO パルスの一部が出力カップラーにより取り出され、(2) 同位相振幅 x_j がホモダイン検出により測定され、(3) i 番目 DOPO パルスへのフィードバックパルス $\sum_j J_{ij} \tilde{x}_j$ が FPGA (field programmable gate array) で計算され、(4) $\sum_j J_{ij} \tilde{x}_j$ の値に基づき、光位相/振幅変調器により光フィードバックパルスが生成され、i 番目 DOPO パルスへ注入される [9,10]。これにより、N 個の DOPO パルスに対して、 $\sim O(N^2)$ オーダーの相互結合項がひと つの測定フィードバック回路で一周回時間毎に実装される。

上記システムにおいて、j 番目の DOPO パルスの同位相振幅 \hat{x}_j に対するホモダイン検出がj 番目の DOPO パルスの波動関数を一部収縮させ、測定結果 \hat{x}_j に基づいたi 番目パルスへの光フィードバックパルスの注入がi2 つの波動関数間に相関を形成する、ことに注意されたい。共振器内 DOPO パルスは、位相感応増幅器(PSA)出力端において、同位相振幅方向に量子雑音が増強された真空スクイーズ状態となっている。i2 についての測定結果i3 が正であると、波束の中心i3 が正の値に向かってシフトするとともに、分散i4 はいさく

なる。相互結合が反強磁性型であると、正の \tilde{x}_1 は他の DOPO パルスの波束の中心 $\langle x_2 \rangle$ を負の方向へ押し出す。このようにして、ひとつの測定フィードバック過程が $\langle x_1 \rangle$ と $\langle x_2 \rangle$ の間に 負の相関を創り出す。そしてこれが、最終的に巨視的レベルでの反強磁性秩序の形成へとつながる。

図 6 (a)は、ポンプ率をしきい値の下から上まで線形に上げていった時の、反強磁性結 合した 2 つの DOPO の (x_1) と (x_2) の時間発展である[11]。ポンプがスイッチオンとなった直 後から、(x1)と(x2)の間に負の相関が形成されている。但し、測定結果のランダムさ及び信 号損失過程に伴う外部真空雑音注入のため、システムは、ある時刻では基底状態|↑↓}の一方 を目指すが、別の時刻では他方の基底状態↓↑⟩へ向けてスイッチバックする。この相関した (x₁)と(x₂)のランダムな動きは、徐々にその大きさ(負の相関度)を増していき、ついには 規格化時間τ = 0.85でふらつくのを止めて、基底状態|↑↓)を恒久的に選択する。この分岐点 での DOPO パルスの平均光子数が⟨n⟩ ≃ 1であることは興味深い。なお、この数値シミュレ ーション結果は、終状態が |↑↓)となった単一の軌跡である。 仮に、量子軌跡を事後選択せず、 多くのサンプルの軌跡の集団平均をとると、いかなる時刻でも、平均振幅は常に(x₁) = $(x_2) = 0$ となる。量子測定フィードバック系の履歴依存特性が、この数値シミュレーション 結果にはっきりと見てとれる。すなわち、現在の中心位置 {(x1),(x2)} は、それ以前及び以 後の測定結果に依存する。図 6(b)はホモダイン検出による測定結果である。大きな測定誤 差のため、⟨x₁⟩と⟨x₂⟩の間の相関のあるランダムな動きは見られない。ただ、τ~0.85で相関 を持った自発的対称性の破れが起こり、その後τ≥0.9で光子の誘導放出によりこれが巨視 的レベルに増幅され、そこで初めて特定の基底状態↑↓♪が選び出されたことがわかるわけで ある。

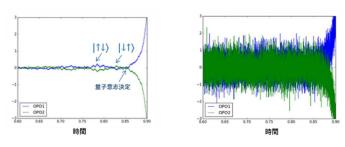


図 6:(a) 反強磁性結合した 2 つの DOPO の同位相振幅の平均値 (x_1) と (x_2) の時間発展。(b) ホモダイン検出で実際に測定された結果の時間発展[11]。

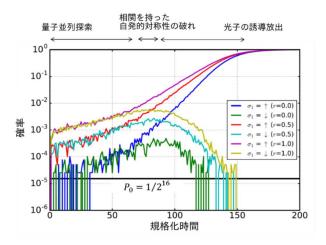
6.3 量子並列探索、相関を持った自発的対称性の破れ、及び光子の誘導放出

本節では、光遅延線結合型 QNN の DOPO 間に形成された量子雑音相関が、どのようにして正答確率を高めるかについて論じる。ここでは、隣接 DOPO が反強磁性相互作用 (J_{ij} < 0) を介して結合している、16 個の DOPO から成る一次元リングを考える。

図 7 は、縮退した 2 つの基底状態、 $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\downarrow\rangle$ と $|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\dots\uparrow\rangle|$ のうちの一方を見つけ出す成功確率を規格化時間に対してプロットしたものである。ここでは、最終結果が $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\downarrow\rangle$ である場合の軌跡を事後選択している [12]。全数(Brute force)探索の場合の成功確率は

 $P_0={}^1\!/_{2^{16}}\sim 3\times 10^{-5}$ である。規格化時刻 $\tau=0$ にポンプがスイッチオンした直後に、縮退した 2 つの基底状態を見つける確率が急に立ち上がり、 $\tau\simeq 70$ に選択された基底状態 $|\uparrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$ と 選択されなかった基底状態 $|\downarrow\downarrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle|$ が分かれるまで、単調に増加する。計算の初期段階 $(0\le \tau\le 70)$ では DOPO パルス当たりの平均光子数は 1 より小さく、このことから、成功確率 が高められたのは、コヒーレントな平均場によるのではなく、 $\langle x_j\rangle$ と $\langle x_{j+1}\rangle$ に形成される負の 量子雑音相関によるものと言える。これが「量子並列探索(quantum parallel search)」モードである。

時刻 $\tau \simeq 70$ において、縮退した2つの基底状態の軌跡が分離し始める。すなわち、終状態 $\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\downarrow$) は成長し続ける一方、選択されない状態 $\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\uparrow$) は消滅し始める。これが「相関を持った自発的対称性の破れ」モードであり、内部雑音により駆動された学習に基づく意思決定プロセスである。



続いて起こる成功確率の指数関数的な増加は、選択された基底状態での単一モード発振によるものであり、これは「光子の誘導放出」の結果である。平均光子数はしきい値における値 $\langle n \rangle = 1/g^2$ よりはるか上へと急激に増加する[3, 6]。このようなポンプ率を上げるという簡便な方法により、量子情報から古典情報への移行が完結する。

 $0 < \tau < 70$ の間の量子並列探索は、QNN が $2^{16} \sim 3 \times 10^4$ 個の候補から正しい答えを抽出するための極めて重要なステップである。この時間内に形成される量子雑音相関のため、間違った答えを選び出す確率が効率的に抑圧される。仮に、出力カップラーの空端子から、熱平衡状態のような強い雑音場を注入すると、しきい値以下で形成される貴重な量子雑音相関は、簡単に外部雑音場に埋もれてしまう。このことの帰結は、第 I 章図 I 7 の数値シミュレーション結果により確認することができる。 $n_{th} \ll 1$ (量子限界) であると、しきい値のち

ょうど上で成功確率は最大となる。一方、 $n_{th}\gg 1$ (古典限界)では、成功確率はしきい値より十分高いところで最大となる。これは、古典限界においては、しきい値より十分上で形成される平均場だけが隣接 DOPO を効率良く結合させるためである。しかしながら、そのようなしきい値より十分高いポンプ率で形成される平均場は強度が強く、DOPO 位相を 0 か π のいずれかに安定するポテンシャル壁が必然的に高くなるため、システムは局所最小解(local minima)に容易に捕獲されてしまう。

6.4 最大カット問題

よく知られている組合せ最適化問題のひとつに、グラフ上の最大カット(maximum cut: MAX-CUT)問題がある。これは、統計力学的ではスピングラス問題(直流場のないイジングモデル)と本質的に同じ問題である[13]。解くべき問題は、与えられたグラフG=(V,E)の最大カット、すなわち、グラフに線を引いてエッジを2つのグループに分けた時、境界線で切られるエッジ数(または重み)が最大となる分け方(カット)、を見つけることである。カットの大小は、カットによって分けられるエッジ(両端が境界線の異なる側に位置するエッジ)の重み総和で定義される。この時の目的関数(これを最大化したい)は、次のように書き下される。

$$\operatorname{cut}(x) = \sum_{1 \le i \le j \le n} w_{ij} \frac{1 - x_i x_j}{2} \tag{2}$$

但し、グラフオーダーn=|V|は頂点の数、 w_{ij} はエッジの重み $(i,j) \in E$ 、 $x_i=\pm 1$ は頂点 $i \in V$ がカットのどちら側にいるかを示す 2 値、である。

この最大カット問題を実装するための光システムとして、注入同期レーザーネットワーク[15]そして縮退光パラメトリック発振器(DOPO)ネットワーク[16]が提案され、「コヒーレント・イジングマシン」と名付けられた。このコヒーレント・イジングマシンは、繰り返し更新される非線形増幅機能(第 I 章の図 1 に示す)付きニューロンを用いてネットワークを組んだニューラルネットワーク、と解釈することができる。この視点からみると、関連したアプローチが古くからあり、そこではニューロンの数学的モデル(例えば[17,18])やそのネットワーク(例えば[19])が検討されてきた。ホップフィールド(Hopfield)はニューラルネットワークモデル上での最適化アルゴリズムを開発した[20]。さらに、ホップフィールドとタンク(Tank)はそれを連続値ニューラルネットワークに拡張し、性能を向上させるとともに組合せ最適化問題へ適用した[21,22]。さらに、徐々に減少する熱雑音を加えることで離散値ニューラルネットワークの性能を向上させる手法として、熱的アニーリング(simulated annealing: SA)が提案された[23]。また、同様の考え方に基づき、連続値ニューラルネットワークが外部雑音注入によりドライブされるモデルが古典的ランジュ

バン・ダイナミクス(classical Langevin dynamics: CLD)で記述された[15, 16]。 次節では、これら古典ニューラルネットワークに対するコヒーレント・イジングマシンの 相対的な性能を論じる[13]。

6.5 コヒーレント・イジングマシン vs. 現代アルゴリズム

6.5.1 コヒーレント・イジングマシン(CIM)

カット数(式(2))の第 1 項は定数であるのに対して、第 2 項はイジングスピン系エネルギーに負の符号をつけたものとなっている。従って、最大カット問題の解はイジングエネルギーを最小にする基底状態に等しい。最大カット問題では各頂点の状態は 2 値の変数 $x_i \in \{1,-1\}$ で表わされるので、発振しきい値よりも十分高くポンプされた双安定 DOPO の状態(0 位相または π 位相発振)を計算の出力結果とすることが適当である。

まず DOPO がしきい値以下にバイアスされると、あらゆる同位相振幅固有状態|x)が重ね合わせ状態として用意され、これにより量子並列探索が実装される[3,12]。そして、外部ポンプ率が徐々に引き上げられ、ネットワーク全体が発振しきい値に達すると、最大カット問題の最適解に対応する特定の位相構成を選択し、そのモードで発振することになる。

CIM の動特性は DOPO の密度演算子についてのマスター方程式を数値積分することによりシミュレーションできる。具体的には、位相空間において密度演算子を疑似確率関数により展開して計算することができる。このための疑似確率関数のひとつが、非対角コヒーレント状態の展開形 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ で表わされる正 $P(\alpha,\beta)$ 表示である[3]。 $P(\alpha,\beta)$ 表示についてのフォッカープランク方程式がマスター方程式から導かれ、そして、伊藤微積分(calculus)を用いることにより、 α と β に対する c 数の確率微分方程式が得られる(詳しくは [3]参照)。シミュレーション用の疑似確率関数としては、短縮ウィグナー表示 $W(\alpha)$ も利用できる。これに対応する c 数確率微分方程式は[12]で導出されている。これらの c 数確率微分方程式を現代コンピュータにアルゴリズムとして実装したものを、ここではバーチャル CIM と呼ぶことにする。

6.5.2 古典ニューラルネットワーク

本節では、前節で述べた CIM、バーチャル CIM の性能評価(ベンチマーク)のために、比較対象として使われる先端アルゴリズムを紹介する。同じ最大カット問題を現代コンピュータで解くアルゴリズムとして知られている、4つの古典ニューラルネットワークモデルについて述べる。表1に、この4種類の古典ニューラルネットワークをまとめて記す。

表1:最大カット問題を解く古典ニューラルネットワークのアプローチ[13]。

計算プロセ	2ス 決定論的	確率的
離散値(2値)	Hopfield Network (HN)	Simulated Annealing (SA)
連続値	Hopfield-Tank Neural Network (HTNN)	Langevin Dynamics (LD)

A. ホップフィールドネットワーク(Hopfield Network: HN)

J. J. Hopfield は、1982年の論文で、ホップフィールド・ネットワーク(HN)として知られている組合せ最適化問題を解く古典的ニューラルネットワークモデルを提案した[20, 21]。このモデルでは、ニューロンは、次のような単純な多数決による更新規則に従って、離散値 $x_i = \pm 1$ を出力する。

$$\sigma_i \leftarrow \operatorname{sgn}\left(\sum_{j=1}^n J_{ij} f(\sigma_j)\right)$$
 (3)

この動作は非同期で行われるすなわち、各ニューロンの更新はそれぞれ別々の時刻に行われる。原論文では各スピンを表わす指標iはランダムに選ばれているが、このモデルに規則性(スピン指標i=1からnまで順次更新する)を与えると計算速度が向上する。一方、同時更新は不要な不安定性や周期解を招く。更新は局所的かつ決定論的なので、システムは一番近くにある局所解(local minimum)に収束する。なおこのモデルは、元々は $\{0,1\}$ の2値ニューロンを使うとして提案されたが、CIM との性能比較ではそれと等価な $\{+1,-1\}$ 値ニューロンを用いる。

B. 熱的アニーリング (Simulated Annealing: SA)

HN はしばしば性質の悪い局所解に落ち込むのに対し、S. Kirkpatrick 等は、いわゆる熱的アニーリング(Simulated Annealing: SA)と呼ばれる、熱雑音でドライブされる統計的なスピン更新手法を提案した[23]。スピンが反転する確率は、メトロポリス・ヘイスティング(Metropolis-Hasting)法におけるボルツマン因子に支配される。次式で与えられる i 番目のスピンの反転によるエネルギー差が負である場合、この反転事象は常に受け入れ可とする。

$$\Delta E_i = 2x_i \sum_{i=1}^n J_{ij} x_j \tag{4}$$

一方、同様のスピン反転が全エネルギーを増加させる(すなわち $\Delta E_i > 0$ となる)場合には、その事象は確率 $P = \exp(-\Delta E_i/T)$ で許容される。ここで T は熱的ゆらぎエネルギーである。スピン i の反転は、熱的ゆらぎエネルギーT が徐々に減少される環境下で、ランダムに選択される。

C. ホップフィールド・タンク・ニューラルネットワーク(Hopfield-Tank Neural Network: HTNN)

ホップフィールドとタンクは、アナログ値を取るニューロン $x_i \in [1,-1]$ と連続時間発展を仮定したニューラルネット手法を提案した[22]。このモデルは、ホップフィールド・タンク・ニューラルネットワーク(HTNN)として知られている。HTNN の時間発展は、次の常微分方程式(ordinary differential equation: ODE)で記述される。

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = -\alpha x_i + \beta \sum_{j=1}^n J_{ij} f(x_j)$$
 (5)

但し、f(x)は第 I 章の図 1 に示されるような非線形入力出関係を表わす関数(通常はシグモイド関数が使われる)である。ここでの数値計算では、f(x)としてtanh(x)を用いる。 α はニューロンの内部損失による信号の減衰率、 β はニューロン間の結合の強さを表わすパラメータである。HTNN モデルは、線形利得が非常に高い極限では(すなわち 0 付近のシグモイド関数が急峻ですぐに飽和する時には)、前出の HN モデルに漸近する。このモデルでは、与えられた最大カット問題について最も高い性能を達成するためには、ニューロンの減衰率 α とシナプス結合パラメータ β を適切に選ぶ必要がある。これについては、後で論じる。式(5)は、離散時間ステップ Δt を十分小さくしたオイラー法により、数値積分される。

D. 古典ランジュバン・ダイナミクス(Classical Langevin Dynamics: CLD)

HTNN に確率過程を導入したモデルが、古典発振器ネットワークという物理モデルを使って、定式化された (式(6))。このモデルでは、アナログ値 $x_j \in [1,-1]$ を取るニューロンが、次の古典ランジュバン方程式に従う。

$$dx_i = (-1 + p - x_i^2)x_i dt + \beta \sum_{j \neq i} J_{ij}x_j + g\sqrt{x_i^2 + \frac{1}{2}} dw_{x_i}$$
 (6)

但し、t は信号減衰率で規格化された時間、p は発振しきい値以下(p < 1)から以上(p > 1)まで線形に増加する規格化ポンプ率、g は発振器の飽和パラメータ、 dw_{x_i} はランジュバン雑音項[16]、 β は発振器間の相互結合の強さを表わすパラメータ、である。g と β は、最高性能を得るように最適化される。

6.5.3 古典ニューラルネットワークアルゴリズムの現代コンピュータへの実装

本節では、上記 4 つの古典的ニューラルネットワークモデルをアルゴリズムとして現代 コンピュータに実装する際、用いられる計算機ハードウエア構成について述べる。なお、実 装するコードは全て c++である[24]。

A. CPU (SA 及び HN 用)

SA 及び HN は、離散変数を繰り返し更新するだけのアルゴリズムであり、並列な SIMD ビット単位動作により、効率的に Central Processor Unit (CPU)に実装される[25]。本検 討では、Intel Xeon E3-1225 @ 3.2 GHz (2013 年出荷の Haswell アーキテクチャー)を主に用いた。SA の性能は、古いプロセッサー(Intel Xeon X5650 @ 2.67 GHz、2010 年出荷の Westmere アーキテクチャー)([24]で使用)よりわずかながら向上する。HN 及び SA いずれの実装にも、アクセラレーターは使わなかった。これは、CPU での SIMD 動作によりすでに並列化されており、キャッシュの的中率が 98.8%と高いことによる。

B. MIND 多数コアプロセッサーPEZY-SC(HTNN 及び CLD 用)

HTNN と CLD は、常微分方程式(連続値/連続時間発振)に基づいており、浮動小数点演算を必要とする。そのため、アクセラレーターで並列化する方が効率がよい。本検討では、理研(日本)のスーパーコンピューター「Shoubu(菖蒲)」に実装した、1 チップ上の 1024 コアの MIND 多数コアプロセッサーPEZY-SC @ 733 MHz と 8192 スレッド(thread)を用いた(図 8 に構造を示す)。行列ベクトル乗算を並列化し、8192 スレッドで並列にニューロンを更新した。結合行列を($J_{ij}=\pm 1$ には空値が無いため) 1 ビット行列として効率的に格納し、ニューロン状態を浮動小数点(32 ビットフロート)で表した。なおこの手法は、32 ビットの行列値を格納するよりも 1.4 倍高速であった。

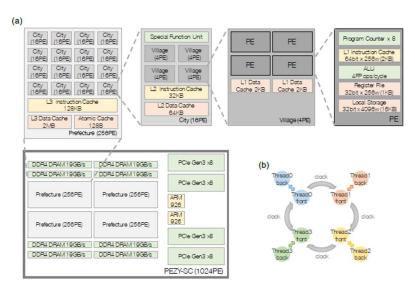


図 8: (a) PEZY-SC 多数コアプロセッサーの階層構造。ひとつの PEZY-SC チップに 1024 個の演算素子 (processing element: PE) が詰め込まれている。(b) 各 PE コアは 8 個のスレッドを独立に扱う [13]。

6.5.4 数値シミュレーション結果

上記 4 つの古典ニューラルネットワークモデル(HN, SA, HTNN, CLD)に対するコヒーレント・イジングマシン(CIM)の性能を、完全グラフ(全ての頂点が他の全ての頂点と結合しているグラフ)の最大カット問題を解くことにより比較した。例題としたのは、N=2000の頂点の対(総数 4,000,000)が全て繋がれ、各エッジは均一に $\{+1,-1\}$ で重み付けされている完全グラフ([10]と同じ例題)である。図 9 にエネルギー対計算時間の比較結果を示す。表 II は目標値(精度保証付の最適アルゴリズム:SDP 法により得られた 87.8% 近似解[26])に達するのに要した実際の計算時間とハードウエア構成をまとめてある。

表 II には、CIM の量子モデル(c 数確率微分方程式と反復子ダイナミクス)を用いた量子シミュレーションによる計算時間も示してある(CIM バーチャル機)。CIM 実機による計算速度に比べ、CIM バーチャル機の速度は約 10^7 倍遅いことが分る。

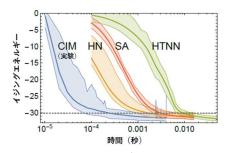


図 9: $\{+1,-1\}$ ランダム重み付けを持つ N=2000 完全グラフを解いた時のエネルギー降下対計算時間[13]。 濃い線は 100 回の計算の平均(CIM は 26 回の実験)であり、影を付けた誤差領域の上限と下限が各計算 モデルの最良と最悪値を示す。灰色の破線は、SDP 緩和アルゴリズムで得られる目標とするエネルギー値 (=-60278/n) [26]。

表 II: CIM 実機、CIM (バーチャル機) および 4 つの古典ニューラルネットワークモデルの目標値 (87.8% 近似解) までの所要時間とハードウエア構成[13]。目標値に到達する最速時間と目標値を超える平均時間を載せてある。なお目標値は、最適値の 87%を保証する性能の GW-SDP 緩和アルゴリズム[26]で得られる [13]。

	最速 (ms)	平均 (ms)	Hardware
CIM (実機)	0.071	0.264	DOPO + FPGA
HN	0.924	1.84	CPU
SA	2.10	3.20	CPU
HTNN	7.04	9.67	PEZY-SC
CLD	100	120	PEZY-SC
CIM (バーチャル機)	10 ⁵		PEZY-SC

図 9 では、同じ例題について 100 回計算 (CIM 実機では 26 回実験) しており、各実線はその平均である。また、影を付けた領域の上限と下限は、それぞれ最良値と最悪値を示し

ている。SAと HTNN のパラメータは、GW-SDP 緩和アルゴリズム[26]で得られた目標値に達する時間が最短となりように最適化した。

この例題では、GW-SDPによる目標値に到達する計算時間は、CIM実機、HN、SA、HTNN、CLD、CIM バーチャル機の順で短かかった。また、不可避の実験雑音によるデータ揺らぎが大きいものの、CIM実機は、26回全ての試行において、目標値よりも良い答えを見つけ出した。HNがSAより速いのは、HNはSAの決定論版と見做せるためである。ただしHNは、最悪の場合には目標値に達しないことがあった(図9の最悪ケースで一部見られるように、100回のうち3回が失敗)。HTNN及びCLDがHN及びSAよりかなり遅いのは、アナログ変数を扱う常微分方程式をデジタルコンピュータで解いているためである。但し、図9から分かるように、HTNN及びCLDはSAより低い最終エネルギー値に達しており、また、SAの性能は温度の変え方に大きく依存する。ここでは目標値への到達時間が最小となるように熱的ゆらぎエネルギーTの時間変化を最適化しているが、一般に、温度変化が遅い方が低いエネルギー値に到達する。

6.5.5 考察

本節では、上記結果の妥当性に関して、次の2つの項目について考察する。

- ・ハードウエア選択の妥当性
- ・HTNN 及び CLD に対する PEZY-SC 実装の最適化

A. ハードウェア選択の妥当性

図 10 に示されるように、CLD の数値シミュレーションには CPU より PEZY-SC の方が明らかに効率的である。一方、HN と SA の計算には、アクセラレーターは使わなかった。これは、CPU 上の SIMD 動作によりすでに並列化されており大幅なスピードアップは期待できなかったこと、並びにキャッシュ的中率が 98.8% (Linux の perf コマンドによる測定値)にも達していたこと、による。一般的に、HN 及び SA の非同期更新は、並列実装には向かない。

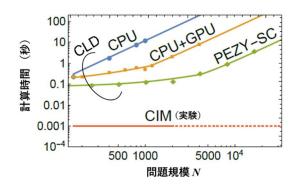


図 10:古典ランジュバン・ダイナミクスのシミュレーション時間(完全グラフ上の 200 周分) [13]。

B. HTNN と CLD に対する PEZY-SC 実装の最適化

本シミュレーションでは、行列データを効率的に格納することによる実装の最適化を行っている。具体的には、与えられた結合行列の各要素は1ビット ($J_{ij}=\pm 1$) であるため、各値を1ビットに押し込めた。これにより、32 ビットの浮動点行列とするのに比べて 1.4 倍高速化された。しかしながら、計算上のボトルネックはメモリー転送ではないため、データを局所メモリーに入れることは、大幅なスピードアップにはつながらない。

6.6 結論

本章では、DOPOとFPGAから構成されるコヒーレント・イジングマシン(CIM)の性能を、現代アルゴリズム(古典的ニューラルネットワークモデルに基づくアルゴリズム)の代表的なものである HN、SA、HTNN、及び CLD、と比較した。古典ニューラルネットワークモデルについては、その性能を加速するために、HN 及び SA はビット動作する CPU上に実装し、HTNN 及び CLD は多数コアプロセッサーPEZY-SC 上に実装した。完全グラフに対する最大カット問題での比較の結果、CIM 実機が最速の計算時間を達成することが示された。より詳細には、HNに比べて最良で 13.0 倍/平均で 6.97 倍、SA に比べて最良で 29.6 倍/平均で 12.1 倍、HTNNに比べて最良で 99.2 倍/平均で 36.7 倍、CLD に比べて最良で 1400 倍/平均で 500 倍、の高速性が示された。

また CIM の量子モデル(c数確率微分方程式と反復子ダイナミクス)を多数コアプロセッサーPEZY SC 上に実装して作成した CIM バーチャル機を用いた量子シミュレーションに比べては、 10^7 倍の高速性が示された。更に、量子アニーラー(D-WAVE IIX マシン)との正答率比較も行なった。 $N=8\sim100$ の問題サイズで、コヒーレント・イジングマシンはより高い正答率を持つことがわかった。

- [1] F. Barahona, J. Phys. Math. Gen. 15, 3241 (1982).
- [2] A. Lucas, Front. Phys. 2, 5 (2014).
- [3] K.Takata et.al., Phys. Rev. A 92, 043821 (2015).
- [4] L-M. Duan et al., Phys. Rev. Lett. 84, 2722 (2000).
- [5] H. Ollivier and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. 88, 017901 (2001).
- [6] J. S. Bell, Rev. Mod. Phys. 38, 447 (1966).
- [7] S. Kochan and E. P. Specker, J. Math. Mech. 17, 59 (1967).
- [8] M. D. Menmin, Rev. Mod. Phys. 65, 803 (1993).
- [9] P. McMahon et al., Science 354, 614 (2016).
- [10] T. Inagaki et al., Science 354, 603 (2016).
- [11] T. Shoji et al., Phys. Rev. A 96, 0543833 (2017).

- [12] D. Maruo et.al., Phys. Scr. 91, 083010 (2016).
- [13] Y. Haribara et al., Quantum Sci. Technol. 2, 044002 (2017).
- [14] M. R. Garey and D. S. Johnson, Computers and intractability 29 (W. H. Freeman, New York, 2002).
- [15] S. Utsunomiya et al., Optics Express 19 18091 (2011).
- [16] Z. Wang et al., Phys. Rev. A 88 063853 (2013).
- [17] W. S. McCulloch and W. Pitts, The Bulletin of Mathematical Biophysics 5, 115 (1943).
- [18] A. L. Hodgkin and A. F. Huxley, The Journal of Physiology 117, 500 (1952).
- [19] K. Fukushima K 1980 Biological Cybernetics 36,193 (1980).
- [20] J. J. Hopfield, Proceedings of the National Academy of Sciences 79, 2554 (1982).
- [21] J. J. Hopfield, Proceedings of the National Academy of Sciences 81, 3088 (1984).
- [22] J. J. Hopfield and D. W. Tank, Science 233, 625 (1986).
- [23] S. Kirkpatrick et al., Science 220, 671 (1983).
- [24] GCC 5.4.0 (CPU)付きUbuntu 16.04.4とGCC 6.8.3 (PEZT-SC)付きCentOS 7.1.1503を使用。
- [25] http://github.com/haribara/SA-complete-graph
- [26] M. X. Goemans and D. P. Williamson, Journal of the ACM (JACM) 42, 1115 (1995).

執筆:山本 喜久和訳:井上 恭

Version 1