欠損の無い単一原子アレー形成の為の最適経路探索プログラムの開発

中川研究室　学部 4 年　西本捺美

1.　研究背景

原子を極低温まで冷却すると原子は量子的な性質を現す。その性質は量子情報処理に応用でき、現在様々な研究が行われている。量子情報処理の一例として、量子シミュレーションが挙げられる。量子シミュレーションは、計算機では解析困難な物理系を他の量子系を用いて再現するというものである。結晶や磁性体、超伝導など多数の原子が存在する系では計算量が指数関数的に増加するため、物性を解析するのは難しい。例えば最もシンプルなイジングモデルを考えると、原子が５０個ある系を仮定するとそれぞれのスピンの向きを考えるため、2^{50} 通りの状態が存在することになり、計算機での計算は困難である。この問題に対し、冷却原子を並べることで目的の物理系を実験室で再現、観測可能にする試みが行われている。我々の研究室ではこのような量子シミュレーションの実現を目指して、計算機で計算困難かつ実験室で再現可能である、５０～１００個ほどの原子からなる原子アレーの作成を目標としている。

2.　研究目的

単一原子アレー形成において課題が存在する。目的の形に並べた光双極子トラップにより原子をローディングし原子アレーを形成するが、１つのトラップに原子がローディングされる確率は 1/2 であるため、n 個のトラップがある場合全てのトラップに原子が充填される確率は$(1/2)^{50}$ となり、50 個の原子がある場合、1 回のローディングには 100 ms の時間を要するため、全ての原子がローディングされるまで約 357 万年かかる計算になる。よって、何度ローディングを繰り返しても欠損のある原子アレーが作成され、目的の位置に原子が全てローディングされるまで時間がかかるという問題が起きる。この問題に対し、短時間で欠損のない原子アレーを作成するためにローディングした原子を欠損位置に光ピンセットを用いてこのように再配置するという方法に着目する。原子の初期位置ごとに原子の輸送経路をパターン化し、データを保存しておくことですぐに再配置を完了できるようにする。トラップからの原子の拡散をなるべく防止するため、出来るだけ少ない手順や衝突を避けた経路での原子の輸送パターンを作成する必要がある。本研究では、原子の欠損につながるような要因である、輸送距離や原子を動かす手数などを輸送コストとして考え、輸送コストの少ない原子とターゲットの輸送経路を選ぶアルゴリズムの選択とプログラムの開発を目的として研究を行った。

3.　総当り法

まず、考えうる全ての組み合わせを検索し最適な解を求めるという総当たり法を利用したプログラムを作成した。ある原子a_iを、ターゲットt_jへ輸送する時にかかるコストをd_{ij}と表す。全てのコストを距離行列Dとして表し、コストの合計d_{total}が最小となるaとtの組み合わせ$f\colon T \to A$を求める。($\mathrm{T} = \{t_i | 1 \le i \le N\}$, $A = \{a_j | 1 \le j \le N_A\}$, N:ターゲットの総数,N_A:原子の総数)

$$d_{i,f(i)} = |t_i - f(t_i)| \qquad (1)$$

$$d_{total} = \sum_i d_{i,f(i)} \qquad (2)$$

$$\mathrm{D} = \begin{bmatrix} d_{1\,1} & d_{1\,2} & \cdots & d_{1\,25} \\ d_{2\,1} & d_{2\,2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ d_{25\,1} & d_{25\,2} & \cdots & d_{25\,25} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 5 & \cdots & 28.3 \\ 5 & 0 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 28.3 & 25 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \qquad (3)$$

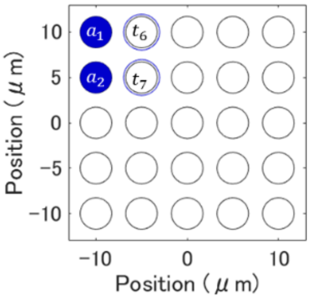

図 1　原子とターゲットの位置例

$$\begin{cases} (i)\ d_{1\,6} +\ d_{2\,7} = 5 + 5 \qquad d_{total} = 10 \\ (ii)\ d_{2\,6} +\ d_{1\,7} = 7.1 + 7.1 \qquad d_{total} = 14.2 \end{cases} \qquad (4)$$

輸送コストの値は簡単のために、原子とターゲット間の直線距離とした。例として$d_{1\,6}$の値は図 1 より 5 μmである。この場合、原子とターゲット間の直線距離の合計が最小である組み合わせが最適解として求められ、図 2.2 の場合の問題を考えると原子とターゲットの組み合わせは①$a_1 \to t_6$、$a_2 \to t_7$ ②$a_1 \to t_7$、$a_2 \to t_6$の 2 通り存在し、式(4)よりa_1をt_6へ輸送しさらにa_2をt_7へ輸送する組み合わせが解である。

この方法では全ての組み合わせを計算する為、原子やターゲットの数が多くなるにつれて組み合わせの総数が爆発的に増加するという問題がある。我々の研究室では将来的に 7 × 7 個のトラップ内に 5 × 5 個の大きさの原子アレーを作成したいと考えているが、例えばその範囲の中で原子 40 個に対してターゲット 25 個の総当たりを考えるとすると、組み合わせの総数は $_{40}P_{25}$ 通り、つまり約6.24×10^{35}通りとなり計算は不可能に近い。よって、総当り法は比較的小さい範囲の原子アレーを作成する場合に有用な手法だと言える。また最適な解を求めることが出来るため、他のアルゴリズムにより求めた解と比較しその解が最適かどうかの指標として利用することが出来る。

4.　ハンガリー法

n 人の人に n 個の仕事を割り当てる時、それぞれの人がそれぞれの仕事をする為にかかるコストを最小にするような割り当てを考える問題がある。ハンガリー法はこの割当問題を簡単に解くことができるアルゴリズムであるが、n 個の原子に n 個のターゲットを割り当てる問題として置き換えハンガリー法を利用する。それぞれのターゲットに対する原子の輸送コストを表 1 のように表す。今回は簡単のため原子とターゲット間の直線距離を輸送コストとした。これを行列として書き表したものがコスト行列である。$t_1 - a_4$、$t_2 - a_5$、$t_3 - a_6$という割り当てを順列 $\sigma = \langle 4,5,6 \rangle$ と表し、コスト行列が C のとき順列σに対応して割り当てたときの総コストを $C(\sigma)$で表すことにする。$C(\sigma)$を最小にするσを求めることに問題は帰着される。

	a_1	a_2	$\cdots$	a_{25}
t_1	0	5	$\cdots$	28.3
t_2	5	0		25
$\vdots$	$\vdots$		$\ddots$	$\vdots$
t_{25}	28.3	25	$\cdots$	0

表 1　輸送コスト(単位：μm)

具体的な解き方を表 2 を例として説明する。

手順 1：各行の各要素からその行の最小値を引き、さらに各列の各要素からその列の最小値を引く(図 2)。

手順 2:0 を各行各列から一つずつ選ぶことができれば、その 0 の位置の組が割り当て案となる。出来なければ次の手順に進む。

手順 3：全ての 0 をできるだけ少ない数の縦か横の線で覆う(図 3)。

手順 4:線で覆われていない要素から、それらの最小値を引き、縦横の線の重なっている要素に加える(図 4)。手順 2 に戻り割り当て案が完成するまで手順 3～4 を繰り返す。

	A	B	C	D
a	5	4	7	6
b	6	7	3	2
c	8	11	2	5
d	9	8	6	7

表 2　コスト表

0	0	3	2
3	5	1	0
5	9	0	3
2	2	0	1

図 2 手順 1

0	0	3	2
3	5	1	0
5	9	0	3
2	2	0	1

図 3　手順 3

0	0	5	4
1	3	1	0
3	7	0	3
0	0	0	1

図 4 手順 4

1			
			1
		1	
	1		

図 5　割り当て案 1

	1		
			1
		1	
1			

図 6　割り当て案 2

コスト行列は 1:1 の組を作り出すので正方行列でなくてはならないが、原子とターゲットの数に差異があった場合、ダミーのターゲットを増やし正方行列にする必要がある。ハンガリー法は、アルゴリズムの計算量が$O(n^3)$で表されるように総当り法$O(n!)$と比較し計算が簡単である。原子やターゲットの個数により総当り法では計算が不可能である場合でも、ハンガリー法であれば計算が可能になると考えられる。

5.　総当り法を利用したプログラム

プログラムは MATLAB により作成した。原子とターゲット間の直線距離を輸送コストとして、最適な原子とターゲットのペアを矢印で結び表示させる。以下にプログラムによって表示された図を載せる。黒丸がトラップの位置、青丸が原子の初期位置、赤丸がターゲットの位置である。トラップの配列は正方格子以外にも座標を変えて様々な形に配置させた。

○5×5 正方格子　原子 6 個、ターゲット 3 個の場合の例

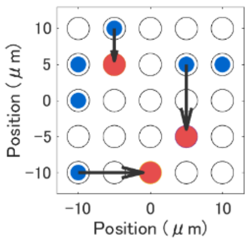

図 7　総当り法 1　解①

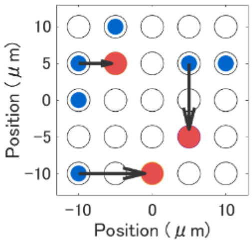

図 8　総当り法 1　解②

図 7、8 のように総当り法のプログラムでは、等価な解は全て表示されるようにした。この場合　${}_6P_3 = 120$通りの組み合わせから、総輸送距離が最小である解が 2 つ選ばれたことを示す。

○ 7 × 7 正方格子　原子 9 個、ターゲット 9 個の場合の例

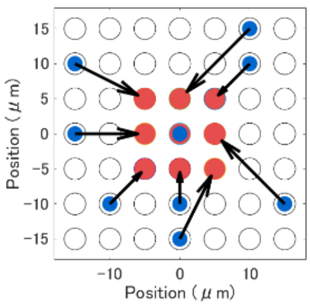

図 9　総当り法 2

${}_9P_9 = 362880$通りの中で総輸送距離が最小な解が 1 つのみ求められたことを示す。

○様々な形の原子アレー例

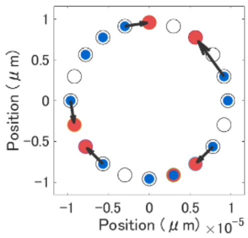

図 10　リング型

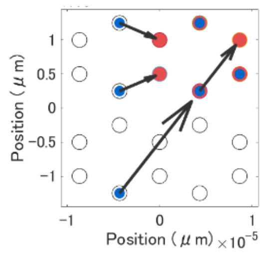

図 11　ハチの巣型

図 10 では　${}_{10}P_5 = 30240$通り、図 11 では　${}_6P_6 = 720$通りの中からそれぞれ最適解が 1 つ求められたことを示す。

6. ハンガリー法を利用したプログラム

前記のプログラムとは異なり、等価な解があったとしてもプログラム上で最初に求められた解だけを表示する仕様である。

〇原子 13 個、ターゲット 13 個の場合の例

〇原子 20 個、ターゲット 20 個の場合の例

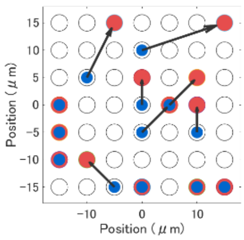

図 12 ハンガリー法 1

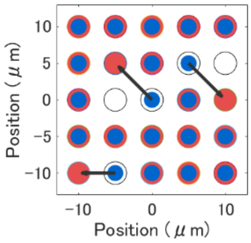

図 13 ハンガリー法 2

上記の結果から、1 回の動作で総当り法より多くの原子やターゲット数の計算が可能であった。

また、原子とターゲットを同様に配置し、2 つのプログラムで結果に差異が出るか比較することでハンガリー法の解の最適さを検証した。以下が比較した結果である。

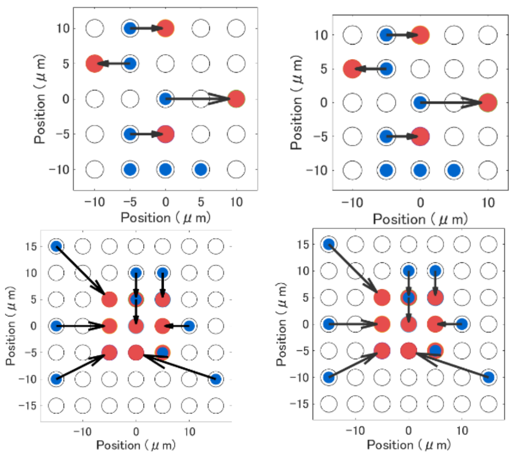

図 14　総当り法(左)とハンガリー法(右)の比較

図 14 の左側が総当り法による計算結果、右側がハンガリー法による計算結果である。隣同士の結果を比較すると、全く同じ解が求められたことがわかる。総当たり法で求められた結果は最適解であるので、原子やターゲットの数が 9 個以下の範囲でハンガリー法は最適な解を求めることを評価できた。

7. 結論

原子輸送経路の検索に適したアルゴリズムから 2 つのプログラムを作成し、経路を原子とターゲットを結ぶ線として表示することが出来た。総当り法とハンガリー法の結果が比較する限り等しくなったことから、少なくとも原子やターゲットの数が少ない場合でのハンガリー法の最適性が示された。またその計算量の少なさから、ハンガリー法は輸送経路をあらかじめ計算しデータとして保存するという最終的な目的にも使用できるアルゴリズムとして現実的であると考えられる。

今回は輸送経路の計算に使用するアルゴリズムを考え、それらを使ったプログラムの開発と簡単な条件の場合の下でのシミュレーションを行った。それらの結果から考えられる今後の研究の課題として、まず当初の目的としていた 50 個程度の原子の場合に計算が可能になるよう、コスト行列を解く際に発生するプログラムのエラーを取り除くことが挙げられる。また、実際に実験に応用できるようなプログラムにすることを目指し、様々な条件に対応可能な仕様を実装することが挙げられる。例として、輸送コストの値の検証である。経路として避けたいトラップの位置や優先的に選びたい位置を輸送コストの重みとして値に反映することによって、より柔軟な場面に対応できると考えられる。さらに、今回の結果のみでは原子の数が 9 個以上だった場合のハンガリー法の最適性が評価できなかったため、輸送コストの値を変えることで評価する必要がある。

8. 参考文献

Woojun Lee, Hyosub Kim, and Jaewook Ahn.Defect-free atomic array formation using Hungarian matching algorithm.*Phys.Rev.* A, 053424 (2017)