情報処理学会研究報告
IPSJ SIG Technical Report

Vol.2019-AL-172 No.7
2019/3/5

Simulated Quantum Annealing と Breakout Local Search の NP-hard 問題に対する実験的な比較

寺西 寛人[1,a)] 平石 秀史[1,b)] 今井 浩[1,c)]

概要：最適化問題は現実世界での応用を始め様々な要求の下，より良い近似解を短時間で求めようと研究がなされてきた．最適化問題に対する量子計算からのアプローチとして西森，門脇らによって考案された Quantum Annealing（QA）がある．QA は量子を用いて近似解を求める量子メタヒューリスティックで，最適化問題の一つである Ising model を解く専用計算機となっている．一方，Ising model と等価な問題である Max cut をはじめとする様々な NP-hard 問題に対して優れた結果を出している最先端の古典メタヒューリスティックの一つとして Benlic，Hao らによって考案された Breakout Local Search（BLS）がある．今研究では QA をマルコフ連鎖モンテカルロ法を用いて古典で近似的にシミュレートする Simulated Quantum Annealing（SQA）と BLS を実験的に比較を行った．データセットとして，現在 QA では解くことができない大規模なグラフを主に扱った．結果として，今回我々が用いたパラメータにおいて BLS は SQA より非常に良い結果を出した．また，ある程度時間をかけることを許せば BLS は最適解に非常に近い値を出力できることが観察できた．

1. 量子計算と古典計算の比較

近年，量子を用いた計算というのは Peter Shor が因数分解に対して古典計算よりも指数時間高速なアルゴリズム [1] を提案して以来，量子を用いることで古典よりも高速化できるのではないかという期待の下，盛んに研究されている．また、最適化問題は現実世界での応用を始め様々な要求の下，より良い近似解を短時間で求めようと研究がなされており，最適化問題の近似解を求めるフレームワークをメタヒューリスティックと呼ぶ．

上記二つの経緯の下，西森，門脇らによって導入された量子アニーリング（Quantum Annealing; QA） [2] は量子の性質を利用し最適化問題の近似解を求める量子メタヒューリスティックである．QA が解く対象としているのは最適化問題の一つであるイジングモデルの基底状態の探索であり，QA はいわばイジングモデルの専用計算機と呼ぶこともできる．QA は古典メタヒューリスティックの一つである焼きなまし法（Simulated Annealing; SA）に対して，特定の条件の下で優位性がみられることが知られている．例えば，スピン間のエネルギーギャップが $\frac{1}{poly(n)}$ であるときに QA が SA よりも指数的に少ないステップ数で最適解を発見できる [3] などがある．

QA を模すことによって QA の計算能力を古典でも再現できないかということで，QA を近似的に（例えば，イジングモデルの分配関数の近似値を元にマルコフ連鎖モンテカルロ法でランダムウォークを生成することで）シミュレートした古典メタヒューリスティックでシミュレーテッド量子アニーリング（Simulated Quantum Annealing; SQA）がある．Crosson、Harrow らは SQA が，ある特定の問題の下で QA と同様に SA よりも指数時間早いことを示した [4]．それでは，SQA は SA に対して他の問題の下でも同様に優位性がみられるのであろうか．張，平石，今井はいくつかの NP-hard 問題の下で SQA と SA の計算能力を実験的に比較し，結果として SQA は SA よりもわずかに優位性が見られることを確認している [5]．

本稿では SA と異なる古典のメタヒューリスティックであるブレイクアウトローカルサーチ（Breakout Local Search; BLS）に注目した。BLS は Benlic，Hao らによって提案された最先端の古典メタヒューリスティックの一つであり，イジングモデルと等価な最大カット問題をはじめとして様々な NP-hard 問題に対して非常に優れた結果を出している [6], [7]．局所解から抜け出し良い近似解を得るために，BLS は

- 現在の解の探索状況に応じて，解を強く（ランダムに）

1 東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
Department of Computer Science. Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo
a) teranishi@is.s.u-tokyo.ac.jp
b) hiraishi1729@is.s.u-tokyo.ac.jp
c) imai@is.s.u-tokyo.ac.jp

混ぜるか弱く（決定的に）混ぜるか適応的に決定する.
- タブーリストを用いて短期間で同じ解に繰り返し辿り着くことのないようにする.

などを行っている．私たちは BLS と SQA を 4 つの NP-hard 問題のデータセットの下で実験的に比較を行った.

使用した **NP-hard** 問題とデータセット

- Max cut : メタヒューリスティックの比較の際によく用いられているデータセットである G-set [12] を用いた.
- Spin glass : 上記の G-set を作成したプログラムである rudy[11] を用いてトロイダル格子グラフを作成した.
- Vertex cover : 百万頂点越えを含む実世界の巨大複雑ネットワークのデータセットである SNAP [13] と KONECT [14]，その中でも最適解が判明しているものを用いた.
- SAT : 因数分解問題を元に Tough SAT Project [15] を用いて作成した。因数分解は量子計算では Shor のアルゴリズムを用いれば多項式時間で計算できる一方，古典計算では多項式時間で解けないと予想されている.

2. 実験について

実験に用いた環境は次の通りである.

- Linux server,
- CPU : Intel(R) Xeon(R) CPU X5675 3.07GHz,
- Memory : 300GBytes

実験に使用したコードは [10] の SQA のコードと BLS を C で実装した．パラメータ設定は表 1 の通りである．BLS のパラメータは [7] から与えた．SQA のパラメータは Max cut で頂点数 2000，辺数 19990 のグラフの下でそれぞれのパラメータに対して [10] での初期設定値付近の 3-5 つのパラメータを試し，10 回走らせた時の平均の解が最も良かったものを使用した.

データセットとしては Max cut，Vertex cover，SAT のものを取り扱った．SQA は Ising model を解くことのみに対応している．そのため，Vertex cover と SAT のデータセットを BLS では Ising model と等価な問題である Max cut に変換して解き，SQA では Max cut からさらに Ising model に変換して解いた.

Max cut:

無向グラフ (V, E)（V : 頂点集合，E : 辺集合）と各辺の重みを入力として受け取ったとき，カットは頂点集合の 2 分割（$V_1, V_2 \in V$，$V_1 \cap V_2 = \emptyset$）によって定義され，そのカットの大きさは V_1 と V_2 を結んでいる辺の重みの和で与えられる．Max cut は大きさが最大となるカットを求める問題である.

データセットとして [7] のようにメタヒューリスティックの計算能力の比較によく用いられている G-set [12] を対象とした．その中でも頂点数 800〜5000 で辺重みが 1、-1 のものを使用した．加えて，グラフの辺密度での比較やコヒーレントイジングマシン (Coherent Ising Machine; CIM) との比較ため，[9] で用いられている G-set のデータセットと頂点数 2000 の完全グラフについても実験を行った.

Spin glass:

Spin glass は Ising model の部分クラスである．Ising model はスピン $\sigma_i \in -1, 1$，スピン間の相互作用 J_{ij}，スピンと外部磁場の相互作用 h_i が与えられたとき，$H(\sigma) = \sum J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum h_i\sigma_i$ を最小にするようなスピンの割り当て（基底状態）を求める問題である．Spin glass はさらに外部磁場がなく相互作用がランダムに割り当てられるという条件がある.

データセットとして G-set を作成している rudy[11] を用いて頂点数 100×100，100×200 のトロイダル格子グラフを作成して使用した。100×100 は各辺に正負の 100001 以下の重みを，100×200 は正負の 200001 以下の重みをランダムにつけた。最適解は CPLEX を用いて求めた。SQA ではそのまま，BLS では Max cut に変換を行って解いた.

Vetex cover:

無向グラフ (V, E) を入力として受け取ったとき，頂点被覆は全ての辺の端点のどちらかを含んでいる V の部分集合として定義される．Vertex cover は頂点被覆の中で頂点数が最小のものを求める問題である.

データセットとして巨大複雑ネットワークのデータセットである SNAP [13] と KONECT [14] を対象とした．その中でも頂点数 6301〜1715255，辺数 20777〜15555041 で [8] によって最適解が判明しているものを使用した．c2000 に関しては最大クリークの値が分かっているので，補グラフをとって Vertex cover に変換した．Max cut への変換には元からあるグラフの辺の重みを 1 とし，新しい頂点を一つ加え，元のグラフの全ての頂点 v に対して重み $2 - deg(v)$ の辺を張ることで行った.

SAT:

SAT は一つの命題論理式を入力として受け取ったときに，それに含まれる変数に真偽を割り当てることで命題論理式全体を真にすることができるかという問題である.

データセットとして Tough SAT Project [15] を用いて因数分解を元にして構成した SAT を対象とした．因数分解は量子の性質を利用すれば Shor のアルゴリズムを用いて多項式時間で解くことができる一方，古典では多項式時間で解くことは難しいだろうとされている．Clique，Independent set，Vertex cover と順に変換をしていき，Max cut に変換を行った.

BLS と SQA の比較にはステップ数を 10^5〜10^7 に固定して，5〜10 回走らせた時の BLS と SQA の解の平均と最も良い解を用いた.

表 1　BLS と SQA のパラメータ設定

	Param.	Description	Value
BLS	L_0	解を混ぜる強さ（動かす回数）	$0.01\|V\|$
	T	強く（ランダムに）混ぜてから best found の更新に失敗する回数の閾値	100
	Φ	タブーリストの任期の最大値	$0.1\|V\|$
	P_0	弱い混ぜ方を適用する確率の最大値	0.8
	Q	2 つある動かし方（swap か flip）の内，どちらを適用するかの確率	0.5
SQA	Γ_0	初期の横磁場	3
	Γ_f	終端の横磁場	0.01
	e_0	スライス間で与える影響に関連する初期値	0.01
	e_f	スライス間で与える影響に関連する終端値	3
	P	スライス数	40
	T	温度	0.02

3. 実験結果と考察

実験結果を表 2，表 3 に示す．ほとんどのデータセットにおいて BLS は SQA よりも良い近似解を出していた．特に Vertex cover においては BLS と SQA の差が明確であった．一方で，Max cut では BLS の解の更新が落ち着いたステップ数のさらに数倍かけた時には SQA と BLS の解の差は小さくなっていた．この結果を受けて，Vetex cover のデータセットに対してステップ数を増やして SQA を走らせてみたが，BLS の解と比べて明確な改善は見られなかった．

また，完全グラフに対しても BLS は良い近似解を出していたが，非常に時間がかかっていた．この理由として，BLS は 1 ステップ経る毎に近傍解と現在の解の差（gain）を更新する必要があり，完全グラフでは頂点を動かす度に全ての近傍解に対して gain を更新する必要があったことが考えられる．

4. 結論

今回の実験は単純なパラメータやコードを用いており，改善の余地を残している．しかしながら，こういった制約の中でも BLS は非常に良い近似解を出しており，ある程度時間をかけることを許せば古典計算でも十分に良い解を出せることが分かる．

量子メタヒューリスティックが解くことが出来る問題サイズは未だ小さい．将来的に解ける問題サイズが大きくなった時に重要となるのは，非常に短い時間で良い近似解を出すことではないかと思われる．また，その際には今回の結果を古典計算との比較として用いることができるだろう．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP15H01677，JP16K12392，JP17K12639 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] P. W. Shor. *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. SIAM J. on Comp.*, 26(5):1484–1509, 1997.

[2] T. Kadowaki and H. Nishimori. *Quantum annealing in the transverse Ising model.* Physical Review E, 58(5355), 1998.

[3] E. Farhi, J. Goldstone and S. Gutmann. *Quantum adiabatic evolution algorithms versus simulated annealing.* arXiv:quant-ph/0201031, 2002.

[4] E. Crosson and A. W. Harrow. *Simulated quantum annealing can be exponentially faster than classical simulated annealing.* In *Proc. of the 57th FOCS*, pages 714–723, 2016.

[5] H. Chang, H. Hiraishi and H. Imai. *Comparing simulated annealing with simulated quantum annealing on max-cut and other NP-Hard problems.* presented at poster session in *17th AQIS*, 2017.

[6] U. Benlic and J-K. Hao. *Breakout local search for maximum clique problems.* Computers and Operations Research, 40(1):192–206, 2013.

[7] U. Benlic and J-K. Hao. *Breakout local search for the max-cutproblem.* Engineering Applications of Artifcial Intelligence, 26(3):1162–1173, 2013.

[8] T. Akiba and Y. Iwata. *Branch-and-reduce exponential/fpt algorithms in practice: A case study of vertex cover.* Theoretical Computer Science, 2016, 609: 211-225.

[9] I. Takahiro, H. Yoshitaka, I. Koji, et al. *A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems.* Science, 2016, aah4243.

[10] E. Savard. *Quantum Monte Carlo Code in Github*, https://github.com/ezrasavard/qmc

[11] G. Rinaldi: Rudy. www-user.tu-chemnitz.de/∼helnberg/rudy.tar.gz, 1998.

[12] G-Set. https://web.stanford.edu/˜yyye/yyye/Gset/

[13] J. Leskovec and A. Krevl. SNAP Datasets: Stanford Large Network Dataset Collection, http://snap.stanford.edu/data, jun, 2014

[14] konect network dataset – KONECT, April 2017. http://konect.uni-koblenz.de/

[15] Tough-SAT-Project. https://toughsat.appspot.com/

表 2 BLS と SQA の計算結果．上段が Max cut，中上段が Spin glass，中下段が Vertex cover，下段が SAT のデータセットとなっている．Optimum、Best、Average の全ての値は Max cut での値を示している．Vetex cover の最適解は [8] から cut size に変換したものを与えている．SAT での $|V|$ と $|E|$ は変換後のグラフの頂点数と辺数を表している．

データセット	名前	$\|V\|$	$\|E\|$	steps	Optimum	BLS Best	BLS Average	SQA Best	SQA Average	BLS-SQA Best	BLS-SQA Average
G-set	G1 (weight : 1)	800	19176	10^4		11568	11518	11477	11420	91	98
				10^5		11593	11574	11537	11521	56	53
	G2 (weight : 1)	800	19176	10^4		11541	11574	11489	11463	52	53
				10^5		11583	11552	11538	11521	45	31
	G43 (weight : 1)	1000	9990	10^4		6543	6484	6513	6502	31	-18
				10^5		6598	6581	6586	6568	12	13
	G44 (weight : 1)	1000	9990	10^4		6531	6495	6512	6493	19	2
				10^5		6608	6570	6573	6551	35	19
	G22 (weight : 1 or -1)	2000	19990	10^4		13120	13052	12890	12827	230	225
				10^5		13263	13235	13135	13109	128	126
	G23 (weight : 1)	2000	19990	10^4		13136	13071	12857	12837	279	234
				10^5		13285	13252	13143	13117	142	135
	G55 (weight : 1)	5000	12498	10^4		9823	9777	9224	9179	599	598
				10^5		10074	10055	9937	9920	137	135
				10^6		10137	10104	10000	9972	137	132
	G56 (weight : 1 or -1)	5000	12498	10^4		3553	3493	2916	2894	637	599
				10^5		3799	3766	3661	3641	138	125
				10^6		3843	3823	3710	3680	133	143
Spin glass	100×100	10000	20000	10^6	652214920	609181780	607764472	449606595	442511342	159575185	165253130
	100×200	20000	40000	10^6	1317546766	1232518856	1227407716	872446001	857412804	360072855	369994912
SNAP	p2p-Gnutella05	8846	31839	10^5	10836	10823	10790	10812	8442	11	2348
and	p2p-Gnutella06	8717	31525	10^5	10624	10611	10570	7324	7266	3287	3304
KONECT	p2p-Gnutella08	6301	20777	10^5	8494	8494	8485	5662	5626	2832	2859
	p2p-Gnutella09	8114	26013	10^5	11080	11075	11072	7512	7474	3563	3598
	petster-friendships-cat	148700	5449275	10^6	217194	214064	212902	181302	178472.8	32762	34429.2
	petster-friendships-dog	426820	8543549	10^6	553406	547036	545684.8	246858	247904.4	300178	297780.4
	web-Stanford	281903	1992636	10^6	326780	320252	318585.2	252498	242721.6	67754	75863.6
	flickr-links	1715255	15555041	10^7	2481236	2477100	2475772	2350398	2348883.2	126702	126888.8
	wiki-talk	2394385	5021410	10^7	4676444	4674572	4669437	4443454	4421415	231118	248022
	c2000.5	2000	999836	10^5	32	24	22	20	13	4	2
Tough SAT	10009×40127	49389	4335433	10^6	14624	14330	14305.3	8564	8287	5766	6018.3
(Integer				10^7		14350	14337	14304	14288	46	49
factoring)	29399×29401	52120	4525826	10^6	15416	15128	15088.8	9050	8517.8	6078	6571
				10^7		15148	15124.8	15086	15060.8	62	64
	35117×41143	54089	4646456	10^6	15978	15660	15641.2	8852	8587	6808	7054.2
				10^7		15692	15666.6	15660	15610	32	56.6

表 3 辺の張り方を変えたデータセットに対しての BLS と SQA の計算結果．CIM の実験結果は [9] から与えた．

名前	$\|V\|$	$\|E\|$	steps	CIM 5ms Best	CIM 5ms Average	BLS Best	BLS Average	SQA Best	SQA Average	BLS-SQA Best	BLS-SQA Average
G27 (random)	2000	19990	10^7			3341	3323	3125	3099	216	224
G39 (scale-free)	2000	11778	10^7	2361	2328	2381	2366	2262	2224	119	142
K2000 (complete)	2000	1999000	10^7	33191	32457	33278	33196	31901	31228	1377	1968