イジングモデルによる 有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題の解法

吉村 夏一[1]　多和田 雅師[2]　田中 宗[2]　新井 淳也[3]　巴 徳瑪[3]　八木 哲志[3]　戸川 望[1]

概要：近年，組合せ最適化問題の準最適解を高速に得られるハードウェアとして，イジングマシンが注目されている．イジングマシンはイジングモデルのみを入力として受け付けるため，組合せ最適化問題ごとにイジングモデルへのマッピングを考える必要がある．組合せ最適化問題として誘導部分グラフ同型問題に注目する．ネットワークや木，系列などの構造を持つ多くの現実問題はその構造を頂点集合と辺集合からなるグラフで表すことができる．誘導部分グラフ同型問題は対象となるグラフ構造の中に特定の構造を持つ誘導部分グラフが存在するか否かを判定する問題であり，集積回路から不正回路を探索する際などに出現する．現実問題をグラフ構造に落とし込む際，無向グラフでは表現できず有向グラフが必要な場合もある．本稿では，有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題をイジングマシンによって解く手法を提案する．提案手法ではイジングモデルのエネルギー関数として，一方の有向グラフが他方の有向グラフに対して，誘導部分グラフ同型となるときイジングモデルのエネルギーが最小となるよう定式化する．提案手法により有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題を実際にイジングモデル上で求解した結果を報告する．

1. はじめに

1.1 イジングマシン

近年，組合せ最適化問題の準最適解を高速に求め得る新しいアーキテクチャとして，イジングモデル [8] を用いた様々なイジングマシンが注目され研究されている [1,5,7,10,19,20]．組合せ最適化問題とは，与えられた制約を満たした上で評価関数を最大または最小とする決定変数の組合せを探索する問題である．IoT (Internet of Things) の普及に伴い実社会で用いられるシステムや制御は複雑になっているため，制御に必要なパラメータ数などの決定変数が増加している．そのため膨大な組合せの解の候補から高速に最適解や実現可能な準最適解を得ることが重要となる．

イジングマシンでは，自然現象を模倣するイジングモデルに組合せ最適化問題をマッピングすることで，効率的に準最適解を求め得るとして期待され，様々な組合せ最適化問題のマッピング手法が検討されている [3,11,14,16–18]．

1　早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 情報理工・情報通信専攻
Dept. Computer Science and Communications Engineering, Waseda University
2　早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構
Green Computing System Research Organization, Waseda University
3　NTT ソフトウェアイノベーションセンタ
NTT Software Innovation Center

1.2 誘導部分グラフ同型問題

組合せ最適化問題の 1 つに誘導部分グラフ同型問題がある．誘導部分グラフ同型問題は 2 つのグラフが与えられたとき，一方のグラフが他方の誘導部分グラフになっている同型か否かを判定する問題であり，特定のグラフ構造を持つデータや集積回路を探索するときに出現する組合せ最適化問題である．誘導部分グラフ同型問題は NP 完全問題であり効率よく決定的に解く方法は発見されていない [4,9]．誘導部分グラフ同型問題はイジングモデルへのマッピングにより，イジングマシンを用いて発見的に解く手法が提案されている [2,21]．

従来の手法 [21] では無向グラフのみを対象としたイジングモデルへのマッピングを提案している．現実問題をグラフ構造に落とし込む際，無向グラフでは表現できず有向グラフが必要な場合もある．集積回路を例にとると，AND ゲートや OR ゲートなどのゲートを頂点とし，配線を辺としてブーリアンネットワーク [12] として表現されることが多い．ブーリアンネットワークは有向グラフによって表現され，有向辺は信号の向きを表している．

本稿では，有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題をイジングマシンによって解く手法を提案する．提案手法ではイジングモデルのエネルギー関数として，一方の有向グラフが他方の有向グラフに対して，誘導部分グラフ同型となるときイジングモデルのエネルギーが最小となるよう

定式化する．無向グラフから有向グラフに拡張することでより多くの現実問題を取り扱うことができる．

1.3 本稿の貢献

本稿の貢献は以下の 3 つである．

(1) 2 つの有向グラフに対し，一方の有向グラフが他方の有向グラフの誘導部分グラフとなるときにエネルギーが最小となるイジングモデルのエネルギー関数を提案した．

(2) 誘導部分グラフ同型問題の同型か否かの判定を，基底状態のエネルギーが下限値 $\beta m/4$ となるか否かという解釈に変換し，定理として証明した．

(3) 提案手法によりマッピングした誘導部分グラフ同型問題を実際にイジング計算シミュレータを用いてイジングモデル上で解き，元の問題の解として解釈することで，解を取得した．

1.4 本稿の構成

本稿の構成を以下に示す．2 章で，有向グラフの誘導部分グラフ同型問題を定式化する．3 章で，有向グラフの誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングする．4 章で，有向グラフの誘導部分グラフ同型問題を実際にイジングモデル上で解いた実験の結果を示す．5 章で，本稿をまとめ，今後の課題を示す．

2. 有向グラフの誘導部分グラフ同型問題

本章では有向グラフにおける隣接行列と置換行列を導入し，有向グラフにおける誘導部分グラフ同型問題を定式化する．

2.1 誘導部分グラフ同型問題

頂点集合 V と辺集合 E からなる有向グラフ $G=(V,E)$ を考える．2 つの頂点 $u,v\in V$ が頂点 u を始点とし頂点 v を終点とする辺を持つとき，$(u,v)\in E$ で表す．ここで，本稿で取り扱う有向グラフは始点と終点が同じ頂点となる，すなわち，自己ループを持たないとする．また任意の 2 頂点間に存在する有向辺の数は高々 1 つとする．グラフ $G=(V,E)$ の頂点の接続を表した行列として，隣接行列 A を以下のように定義する．

$$A=\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,n} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,n} \\ & \vdots & & \ddots & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \cdots & a_{n,n} \end{pmatrix}$$
$$a_{i,j}=\begin{cases} 1 & (\text{頂点 } i \text{ が始点で } j \text{ が終点の接続がある}) \\ 0 & (\text{頂点 } i \text{ が始点で } j \text{ が終点の接続がない}) \end{cases} \tag{1}$$

ただし，$n=|V|$ とする．

いま，2 つの有向グラフ $G_1=(V_1,E_1)$ と $G_2=(V_2,E_2)$ $(|V_2|=m>|V_1|=n\geq 2)$ を考える．また隣接行列をそれぞれ A_1 と A_2 とする．与えられた 2 つの有向グラフ G_1 と G_2 の頂点を写像する行列として，置換行列 X を以下のように定義する．

$$X=\begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & \cdots & x_{2,m} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & \cdots & x_{3,m} \\ & \vdots & & \ddots & \\ x_{n,1} & x_{n,2} & x_{n,3} & \cdots & x_{n,m} \end{pmatrix} \tag{2}$$
$$x_{i,v}=\begin{cases} 1 & (v\in V_2 \text{を } i\in V_1 \text{に写像する}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

置換行列 X は G_1 と G_2 の頂点の対応を示している．以上のもと誘導部分グラフ同型問題を定義する．

定義 1. 2 つのグラフ $G_1=(V_1,E_1)$, $G_2=(V_2,E_2)$ $(|V_2|=m>|V_1|=n\geq 2)$ とし，隣接行列を A_1，A_2 とする．誘導部分グラフ同型問題とは，$XA_2X^{\mathrm{T}}=A_1$ となるような置換行列 X が存在するか否かを求める問題である．

例 1. 有向辺の誘導部分グラフ同型問題の例題を示す．図 1 に示すように頂点数が 4 の有向グラフ $G_1=(V_1,E_1)$ と頂点数が 9 の有向グラフ $G_2=(V_2,E_2)$ の 2 つのグラフを考える．2 つのグラフの隣接行列はそれぞれ以下のようになる．

$$A_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

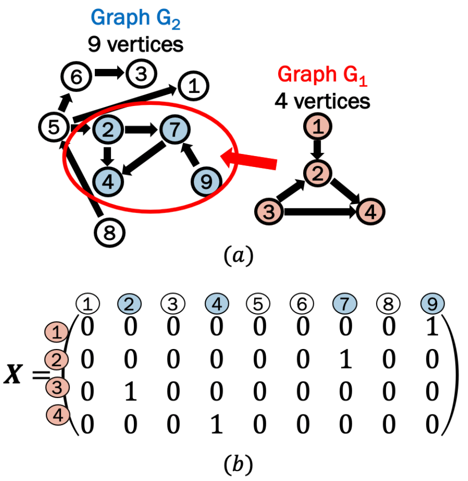

図 1　頂点数 4 と頂点数 9 の有向グラフの誘導部分グラフ同型問題例．

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&0&0 \\ 1&1&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0&0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

与えられた 2 つのグラフ G_1 と G_2 の頂点を写像する行列として，置換行列 X を図 1 に示す通り与えると，$XA_2X^{\mathrm{T}} = A_1$ が成立する．つまり，G_2 は誘導部分グラフとして G_1 を持つ．実際，図 1 の通り，グラフ G_2 は誘導部分グラフとしてグラフ G_1 と同型のグラフを内部に持つ．図 1 ではグラフ G_2 において，グラフ G_1 と誘導部分グラフ同型である頂点を青く色付けしてある．

3. 有向グラフの誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルマッピング

本章では，イジングモデルを紹介し，有向グラフの誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングする．イジングモデルのエネルギー関数として 4 つの項を導入する．

3.1 イジングモデルと QUBO

イジングモデルとは，磁性体の振る舞いを表す統計力学のモデルである．磁性体のスピンに働く局所磁場とスピン間に働く相互作用によって，磁性体全体の振る舞いを検討するためのモデルである．イジングモデルは無向グラフ $G_I = (V_I, E_I)$ 上に定義される．V_I, E_I はそれぞれスピンが配置される頂点集合及び頂点間の辺集合である．イジングモデルは，磁性体の性質を表す上下の向きを持つスピン σ_i と，2 つのスピン間で及ぼしあう相互作用の力を表す相互作用係数 J_{ij}，及び外部から与えられた磁場の力を表す外部磁場係数 h_i で表される．スピン σ_i は ± 1 の 2 値のいずれかを取り，J_{ij} 及び h_i は実数である．このとき，このイジングモデルが持つエネルギー $\mathcal{H}$ は式 (5) で表される．

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i,j)\in E_I} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i\in V_I} h_i\sigma_i - \mathrm{const} \tag{5}$$

イジングモデルはエネルギー $\mathcal{H}$ が低いほど安定な状態であり，最低エネルギー状態を基底状態と呼ぶ．ここで，const は定数を表す．

イジングモデルにおいてスピン $\sigma_i (= \pm 1)$ の代わりに，0 または 1 を取るバイナリ変数 n_i を導入することを考える．バイナリ変数 n_i を用いて 2 次式まででエネルギー関数を表せる場合，これを QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) と呼ぶ．バイナリ変数 $n_i = 0, 1$ とスピン $\sigma_i = -1, 1$ は以下の式で互いに変換することができる．

$$n_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \tag{6}$$

また，QUBO のエネルギー関数 $\mathcal{H}$ は一般に

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i,j)\in E_I} v_{ij}n_in_j - \sum_{i\in V_I} w_in_i - \mathrm{const} \tag{7}$$

と書ける．ここで，v_{ij} は 2 つのバイナリ変数 n_i, n_j の間の相互作用係数，w_i はバイナリ変数 n_i に作用する局所的な強制力である．本論文では，イジングモデルと等価な QUBO による定式化を行う．

3.2 誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルへのマッピング

置換行列 X の各要素 $x_{i,v}$ $(1 \le i \le n, 1 \le v \le m)$ は 0 か 1 の 2 値，つまり，バイナリ変数で表現される．誘導部分グラフ同型問題は $XA_2X^{\mathrm{T}} - A_1$ の非零要素数を最小化する置換行列を求める問題である．このような置換行列 X を与えるときに最小となる QUBO 表現のエネルギー関数 $\mathcal{H}$ を提案する．提案するエネルギー関数 $\mathcal{H}$ は，$\mathcal{H}_A$，$\mathcal{H}_B$，$\mathcal{H}_C$，$\mathcal{H}_D$ の 4 項から構成される．3.2.1 節から 3.2.5 節で議論するように提案手法ではイジングモデルで使用するスピン数は置換行列 X の要素数，つまりグラフ G_1 とグラフ G_2 の頂点数の積で表され，nm 個である．

3.2.1 $\mathcal{H}_A$：部分グラフ頂点割当重複禁止制約

部分グラフ頂点割当重複禁止制約とは，グラフ G_1 の頂点がグラフ G_2 のどの頂点に対応するかを決める制約である．部分グラフ同型問題では，グラフ G_1 の頂点数 n がグラフ G_2 の頂点数 m よりも小さいため，グラフ G_1 の各頂点はグラフ G_2 の任意の頂点に一意に対応する必要がある．したがって，置換行列 X において，同じ行内にただ一つだけ 1 が存在し，それ以外の要素は 0 の値を取る．

まず，置換行列 X の i 行目にただ一つだけ 1 が存在する制約を式で表すと以下のようになる．

$$\sum_{v=1}^{m} x_{i,v} = 1 \quad (1 \leq i \leq n) \tag{8}$$

例 1 では図 1 にある通り，置換行列 X を行方向に見ると 1 の数はただ 1 つになっている．

この制約条件をイジングモデルにマッピングするために，以下の項を導入する．ここで，列方向で総和を考えているので，与える頂点数は m である．

$$\left(1 - \sum_{v=1}^{m} x_{i,v}\right)^2 \quad (1 \leq i \leq n) \tag{9}$$

この項は式 (8) を満たすとき最小値 0 を取る．置換行列 X のすべての行について式 (8) を満足するには，すべての行について式 (9) の値の総和を考え，これを最小化すれば良い．つまりイジングモデルのエネルギー $\mathcal{H}_A$ は以下の式になる．

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i=1}^{n} \left(1 - \sum_{v=1}^{m} x_{i,v}\right)^2 \tag{10}$$

3.2.2 $\mathcal{H}_B$：グラフ頂点割当制約

グラフ頂点割当制約とは，グラフ G_2 の頂点がグラフ G_1 のどの頂点に対応するかを決める制約である．グラフ G_2 の頂点数 m がグラフ G_1 の頂点数 n よりも大きいため，グラフ G_2 の全ての頂点がグラフ G_1 の頂点に割り当てられるとは限らない．つまり，前節で検討した部分グラフ頂点割当重複禁止制約のように置換行列における全ての列で 1 が必ず 1 つ存在するとは限らない．よって，置換行列の同じ列内にただ一つだけ 1 が存在するか，全ての要素が 0 の値を取る．

まず，置換行列の v 列目にただ一つだけ 1 が存在するか，全ての要素が 0 の値を取る制約は以下で表される．

$$\sum_{i=1}^{n} x_{i,v} \in \{0, 1\} \quad (1 \leq v \leq m) \tag{11}$$

例 1 では図 1 にある通り，置換行列 X を列方向に見ると，2 列目はただ 1 つだけ 1 が存在するが，3 列目は全ての要素が 0 になっている．

同じ列内にただ 1 つだけ 1 が存在するか，全ての要素が 0 の場合に値が最小になるように以下の項を導入する．ここで，行方向で総和を考えているので，与える頂点数は n である．

$$\left(\frac{1}{2} - \sum_{i=1}^{n} x_{i,v}\right)^2 \quad (1 \leq v \leq m) \tag{12}$$

この項は式 (11) を満たすとき最小値 1/4 を取る．置換行列 X のすべての列について式 (11) を満足するには，すべての列について式 (12) の値の総和を考え，これを最小化すれば良い．つまりイジングモデルのエネルギー $\mathcal{H}_B$ は以下の式になる．

$$\mathcal{H}_B = \sum_{v=1}^{m} \left(\frac{1}{2} - \sum_{i=1}^{n} x_{i,v}\right)^2 \tag{13}$$

3.2.3 $\mathcal{H}_C$：接続情報違反禁止制約 I

接続情報違反禁止制約 I とは，置換行列を用いて G_2 の各頂点を G_1 の各頂点に置換したあとに，G_1 で存在していない有向辺が G_2 では存在することを禁止する制約である．この制約 I は辺の向きも考慮するため，G_1 で接続する頂点が G_2 で接続する場合であっても，有向辺の向きが異なる場合は同様に禁止する．

この制約をイジングモデルにマッピングするために，制約を違反するときにペナルティとなる項を導入する．G_1 中の 2 つの頂点 i，j において，i を始点とし j を終点とする有向辺が存在しないとき $(i,j) \notin E_1$ と記す．また G_2 において，頂点 i，j に対応する頂点を u，v とし，u を始点とし v を終点とする有向辺が存在するとき $(u,v) \in E_2$ と記す．G_1 が G_2 の誘導部分グラフであるとき，このような対応付けを禁止する必要がある．

制約を違反するときに値が大きくなる項として，置換行列 X の要素 $x_{i,v}$ を用いてこの制約をイジングモデルのエネルギー $\mathcal{H}_C$ として表すと以下のようになる．

$$\mathcal{H}_C = \sum_{(i,j) \notin E_1} \sum_{(u,v) \in E_2} x_{i,u} x_{j,v} \tag{14}$$

3.2.4 $\mathcal{H}_D$：接続情報違反禁止制約 II

接続情報違反禁止制約 II とは，置換行列を用いて G_2 の各頂点を G_1 の各頂点に置換したあとに，G_1 で存在している有向辺が G_2 では存在しないことを禁止する制約である．この制約 II も制約 I と同様に有向辺の向きも考慮する．

接続情報違反禁止制約 II は $\mathcal{H}_C$ と同様に制約式を計算できる．G_1 中の 2 つの頂点 i，j において，i を始点とし j を終点とする有向辺が存在するとき $(i,j) \in E_1$ と記され，G_2 において，頂点 i，j に対応する頂点を u，v としたとき $(u,v) \notin E_2$ となる対応付けを禁止する．この制約をイジングモデルのエネルギー $\mathcal{H}_D$ として表すと以下のようになる．

$$\mathcal{H}_D = \sum_{(i,j) \in E_1} \sum_{(u,v) \notin E_2} x_{i,u} x_{j,v} \tag{15}$$

3.2.5 イジングモデルマッピングされたエネルギー関数

イジングモデルマッピングされたエネルギー関数は，各エネルギー関数の式 (10)，(13)，(14)，(15) の重み付き和で以下のように表される．

$$\mathcal{H} = \alpha\mathcal{H}_A + \beta\mathcal{H}_B + \gamma\mathcal{H}_C + \delta\mathcal{H}_D \tag{16}$$

ただし，$\alpha, \beta, \gamma, \delta\,(> 0)$ はハイパパラメータであり，基底状態が 3.2.2 節および 3.2.3 節で示した制約を満足すること

を考慮して設定する．

また，式 (16) において，エネルギー $\mathcal{H}$ の下限は $\beta m/4$ になる．ここで，誘導部分グラフ同型問題の同型か否かの判定は，基底状態のエネルギーが下限値 $\beta m/4$ となるか否かという解釈となる．まず小定理 1 および小定理 2 を示す．

小定理 1. 誘導部分グラフ同型ならば，$\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たす．

証明 . 3.2.1 節から 3.2.4 節の議論にある通り，式 (10)，(13)，(14)，(15) は，与えられた誘導部分グラフ同型問題に対し置換行列 X が存在するときに最小値をとる．ここで，式 (10)，(13)，(14)，(15) の最小値はそれぞれ以下のようになる．

$$\mathcal{H}_A = 0 \tag{17}$$

$$\mathcal{H}_B = \frac{m}{4} \tag{18}$$

$$\mathcal{H}_C = 0 \tag{19}$$

$$\mathcal{H}_D = 0 \tag{20}$$

最終的に得られるエネルギー関数は，式 (16) の各項の重み付き和で表される．各項 $\mathcal{H}_A$，$\mathcal{H}_B$，$\mathcal{H}_C$，$\mathcal{H}_D$ がそれぞれ最小値となり，その値は以下のように計算することができる．

$$\mathcal{H} = \beta \mathcal{H}_B = \frac{\beta m}{4} \tag{21}$$

□

小定理 2. $\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たすならば，誘導部分グラフ同型である．

証明 . 小定理 2 の対偶として，誘導部分グラフ同型でないならば $\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たさないことを証明する．

誘導部分グラフ同型問題において同型でないと仮定する．このとき，どのような置換行列 X に対しても誘導部分グラフ頂点割当重複禁止制約，グラフ頂点割当制約，接続増加禁止制約，接続減少禁止制約のいずれかを満たさない．そのような置換行列 X を表すスピンに対して制約式式 (10)，(13)，(14)，(15) のいずれかは最小値を取らない．つまり，$\mathcal{H}_A > 0$ か，$\mathcal{H}_B > m/4$ か，$\mathcal{H}_C > 0$ か，$\mathcal{H}_D > 0$ を少なくとも 1 つ以上満たすため $\mathcal{H} > \beta m/4$ となる． □

小定理 1 と小定理 2 から以下の定理が導かれる．

定理 1. 誘導部分グラフ同型問題を式 (16) によりイジングモデルにマッピングしたとき，基底状態のエネルギー $\mathcal{H}$ が $\beta m/4$ になれば，そのときに限り同型と判定できる．

証明 . 小定理 1 と小定理 2 より定理 1 が成立する． □

4. 評価実験

3 章で提案した有向グラフの誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルマッピングに対し，誘導部分グラフ同型になるグラフペアを問題の入力として，提案手法によりイジングモデルマッピングした．またマッピングしたモデルをイジング計算シミュレータにより解き，得られたスピンの状態を元の解として解釈することで解を取得した．

表 1 SA 設定値.

SA 設定項目	値
初期解	ランダム
開始温度	100000
冷却率	0.99984
Inner Loop	1000
Outer Loop	100000

4.1 イジング計算シミュレーション

本実験では，Simulated Annealing (SA) [13] によるイジング計算シミュレーションにより，イジングモデルの基底状態あるいは準基底状態を得た．SA によるイジング計算シミュレーションは以下の手順に従った．

(1) 初期解 (スピンの初期状態) をランダムに設定する．

(2) ランダムに 1 つのスピンの状態を交換し，Metropolis 法 [6, 15] を実行する．エネルギー関数が小さくなる場合は受理，エネルギー関数が大きくなる場合は確率 $p = \exp(-\Delta E/T_k)$ で受理する．ここで，T_k は k ステップ目の温度，ΔE は新しい解候補のエネルギーから現在の解のエネルギーを引いた差を表す．

(3) Inner loop の回数だけ (2) を試行したら温度を下げる．現在のステップ数を k，冷却率を r とすると，$T_{k+1} = rT_k$ となる．ここで，冷却率は Outer loop の回数だけ更新されたとき，最終温度になるように設定する．

(4) Outer loop の回数だけ (2) - (3) を繰り返す．

SA を実行するにあたり必要な各種設定項目と設定値を表 1 に示す．本実験では 1 回の SA 試行により，1 個の解を取得する．

実行環境は OS が macOS Catalina 10.15.5，CPU が 2.8GHz Intel Core i7，メモリが 16GB，SA の実行に使用した言語は C++である．

4.2 入力グラフとハイパパラメータ

本実験では，一方が他方の誘導部分グラフとなるように，頂点間の辺を作成し 2 つのグラフを生成した．実験をするにあたり，ハイパパラメータ $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は全て 1 で設定した．1 つのグラフペアに対して SA の試行を行い，基底解が得られた確率を取得した．

4.3 実験

本実験では，有向グラフの誘導部分グラフ同型問題を提案手法によりイジングモデルにマッピングし，イジングモデル上において解を取得した．実験には解が存在することを保証された 2 つのグラフのペアと，解が存在しないことを保証された 2 つのグラフのペアを問題の入力として与えた．それぞれのグラフペアを誘導部分グラフ同型問題とし SA によりシミュレーションを行い，基底状態が得られた確率とその他解が得られた確率を取得した．表 2 に結果を

表 2 誘導部分グラフ同型問題の実験結果

頂点数 (n, m)	スピン数 $(n \times m)$	解の保証	$N_{H_{\min}}$[%][a]	N_{others}[%][b]
(3,4)	12	存在しない	0	100
(3,4)	12	存在しない	0	100
(3,4)	12	存在する	75	25
(3,4)	12	存在する	70	30
(5,10)	50	存在する	41	59
(5,50)	250	存在する	82	18

[a] $N_{H_{\min}}$：イジングモデルが基底状態となった確率
[b] N_{others}：その他の状態となった確率

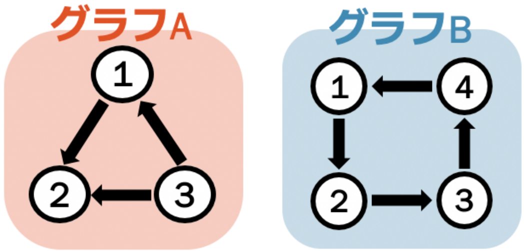

図 2 誘導部分グラフ同型問題の入力グラフペア 1.

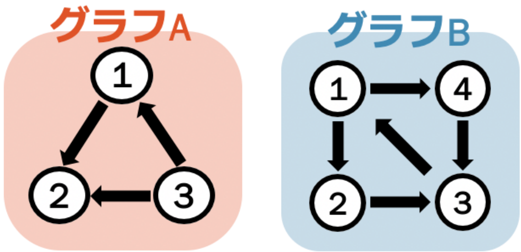

図 3 誘導部分グラフ同型問題の入力グラフペア 2.

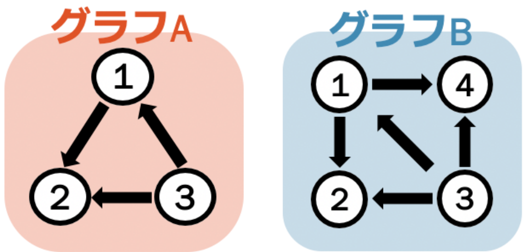

図 4 誘導部分グラフ同型問題の入力グラフペア 3.

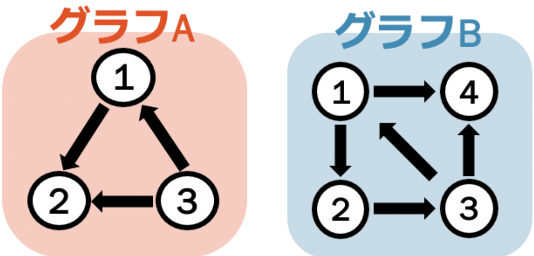

図 5 誘導部分グラフ同型問題の入力グラフペア 4.

示す．

まず表 2 における 1 行目の，解が存在しないことを保証されたグラフペアの結果をみる．頂点数が小さいグラフが 3 で大きいグラフは 4 である．図 2 に 1 行目の結果に対する入力したグラフのペア (以下グラフペア 1 と呼ぶ) を示す．図 2 に示す通り，グラフペア 1 におけるグラフ B はグラフ A を誘導部分グラフとして有さない．表 2 の 1 行目の結果をみると，イジングモデルが基底状態となった解を取得せず，その他の解を 100%の確率で取得しているので，本稿の手法が正しいことがわかる．

次に表 2 における 2 行目の，解が存在しないことを保証されたグラフペアの結果をみる．頂点数が小さいグラフが 3 で大きいグラフは 4 である．図 3 に 2 行目の結果に対する入力したグラフのペア (以下グラフペア 2 と呼ぶ) を示す．特に辺の向きに注意すると，グラフ B の頂点 1, 頂点 2, 頂点 3 とグラフ A の辺に注目すると，グラフ B の頂点 2 と頂点 3 の間の有向辺の向きが逆であるのがわかる．したがって，グラフペア 2 もグラフペア 1 と同様にグラフ B はグラフ A を誘導部分グラフとして有さない．表 2 の 2 行目の結果をみると，イジングモデルが基底状態となった解を取得せず，その他の解を 100%の確率で取得しているので，本稿の手法が正しいことがわかる．

次に表 2 における 3 行目の，解が存在することを保証されたグラフペアの結果をみる．頂点数が小さいグラフが 3 で大きいグラフは 4 である．図 4 に 3 行目の結果に対する入力したグラフのペア (以下グラフペア 3 と呼ぶ) を示す．図 4 に示す通り，グラフペア 3 におけるグラフ B はグラフ A を誘導部分グラフとして有する．表 2 の 3 行目の結果をみると，イジングモデルが基底状態となった解を取得しているため，本稿の手法が正しいことがわかる．

次に表 2 における 4 行目の，解が存在することを保証されたグラフペアの結果をみる．頂点数が小さいグラフが 3 で大きいグラフは 4 である．図 5 に 4 行目の結果に対する入力したグラフのペア (以下グラフペア 4 と呼ぶ) を示す．グラフペア 3 と同様にグラフ B はグラフ A を誘導部分グラフとして有する．ただし，選ばれる頂点の番号がグラフペア 3 とは異なる．グラフペア 4 のグラフ B におけるグラフ A と同型になるグラフを抽出される際に選ばれる頂点は頂点 1 と頂点 3 と頂点 4 である．こちらも表 2 の 4 行目の結果をみると，イジングモデルが基底状態となった解を取得しているため，本稿の手法が正しいことがわかる．

表 2 における 5 行目，6 行目の実験では上記の 4 行の入力ペアよりも入力するグラフサイズの規模を大きくして実験した．問題として入力したグラフペアは，頂点数が小さいグラフがもう一方の誘導部分グラフとなるように，辺密度 $\rho = 0.5$ として，自己ループを許さず，任意の頂点間の辺を高々 1 つになるようにランダムに生成し作成した．5 行目は頂点数 5 のグラフと頂点数 10 のグラフに対する結果 (以下 (5,10) のグラフペアと呼ぶ) を示している．対して 6 行目は頂点数 5 のグラフと頂点数 50 のグラフに対する結果 (以下 (5,50) のグラフペアと呼ぶ) を示している．2 つの実験をみても，規定の試行回数で基底解を取得できたため，ランダムにグラフを作成した場合にも，提案手法によって有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルを用いて解くことが可能であることが示された．加えて，表 2 をみると (5,50) のグラフペアの方が基底解を取得した確率が高いことがわかる．これは，ランダムに辺を生成した上で，小さいグラフを大きいグラフに埋め込むことで同型になりうる解を保証しているためであり，その意図的に埋め込んだ解となる誘導部分グラフ以外の予期せぬ解が偶然発生する確率が高いからである．

5. おわりに

本稿では有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題をイジングマッピングする手法を提案し，実際にイジング計算シミュレータより解を取得した結果を示した．実験結果から，提案手法により有向グラフに対する誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングすることが可能であることを確認した．今後の課題として，より大きな類似誘導部分グラフ同型問題についての実験結果と，実際のアニーリングマシンを用いた実験結果を取得することが挙げられる．

参考文献

[1] P. I. Bunyk, E. M. Hoskinson, M. W. Johnson, E. Tolkacheva, F. Altomare, A. J. Berkley, R. Harris, J. P. Hilton, T. Lanting, A. J. Przybysz, J. Whittaker, “Architectural considerations in the design of a superconducting quantum annealing processor,” *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, vol. 24, pp. 1–10, 2014.

[2] C. S. Calude, M. J. Dinneen, R. Hua, “QUBO formulations for the graph isomorphism problem and related problems,” *Theoretical Computer Science*, vol. 701, pp. 54–69, 2017.

[3] V. S. Denchev, S. Boixo, S. V. Isakov, N. Ding, R. Babbush, V. Smelyanskiy, J. Martinis, H. Neven, “What is the computational value of finite-range tunneling?” *Physical Review X*, vol. 6, no. 3, pp. 031 015–1–19, 2016.

[4] S. Fortin, “The graph isomorphism problem,” Department of Computing Science, University of Alberta, Tech. Rep., 1996.

[5] H. Goto, K. Tatsumura, A. R. Dixon, “Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems,” *Science advances*, vol. 5, no. 4, pp. 1–8, 2019.

[6] W. K. Hastings, “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications,” *Biometrika*, vol. 57, pp. 97–109, 1970.

[7] T. Inagaki, Y. Haribara, K. Igarashi, T. Sonobe, S. Tamate, T. Honjo, A. Marandi, P. L. McMahon, T. Umeki, K. Enbutsu *et al.*, “A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems,” *Science*, vol. 354, no. 6312, pp. 603–606, 2016.

[8] E. Ising, “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, no. 1, pp. 253–258, Feb. 1925.

[9] D. S. Johnson, “The NP-completeness column: an ongoing guide,” *Journal of algorithms*, vol. 6, no. 3, pp. 434–451, 1985.

[10] M. W. Johnson, M. H. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk *et al.*, “Quantum annealing with manufactured spins,” *Nature*, vol. 473, no. 7346, pp. 194–198, 2011.

[11] S. Kanamaru, D. Oku, M. Tawada, S. Tanaka, M. Hayashi, M. Yamaoka, M. Yanagisawa, N. Togawa, “Efficient Ising model mapping to solving slot placement problem,” in *2019 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE)*, 2019, pp. 1–6.

[12] S. A. Kauffman, “Metabolic stability and epigenesis in randomly constructed genetic nets,” *Journal of theoretical biology*, vol. 22, no. 3, pp. 437–467, 1969.

[13] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, “Optimization by simulated annealing,” *Science*, vol. 220, no. 4598, pp. 671–680, 1983.

[14] A. Lucas, “Ising formulations of many NP problems,” *Frontiers in Physics*, vol. 2, pp. 1–15, 2014.

[15] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines,” *The journal of chemical physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.

[16] K. Tanahashi, S. Takayanagi, T. Motohashi, S. Tanaka, “Application of Ising machines and a software development for Ising machines,” *Journal of the physical society of Japan*, vol. 88, no. 6, pp. 061 010–1–10, 2019.

[17] S. Tanaka, R. Tamura, B. K. Chakrabarti, *Quantum spin glasses, annealing and computation.* Cambridge University Press, 2017.

[18] K. Terada, D. Oku, S. Kanamaru, S. Tanaka, M. Hayashi, M. Yamaoka, M. Yanagisawa, N. Togawa, “An Ising model mapping to solve rectangle packing problem,” in *Proc. VLSI Design, Automation and Test (VLSI-DAT)*, 2018, pp. 1–4.

[19] S. Tsukamoto, M. Takatsu, S. Matsubara, H. Tamura, “An accelerator architecture for combinatorial optimization problems,” *FUJITSU Science and Technology Journal*, vol. 53, pp. 8–13, 2017.

[20] M. Yamaoka, C. Yoshimura, M. Hayashi, T. Okuyama, H. Aoki, H. Mizuno, “A 20k-spin Ising chip to solve combinatorial optimization problems with CMOS annealing,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 51, no. 1, pp. 303–309, 2016.

[21] N. Yoshimura, M. Tawada, S. Tanaka, J. Arai, S. Yagi, H. Uchiyama, N. Togawa, “Efficient Ising model mapping for induced subgraph isomorphism problems using Ising machines,” in *2019 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE-Berlin)*, 2019, pp. 1–6.