Vol.2021-QS-2 No.2
2021/3/29

タブーとペナルティーを用いたアニーリングアルゴリズム

篠原秀人[1], 西村光嗣[1], 山城悠[1,2]

[1] 株式会社Jij

[2] 東京工業大学 理学院物理学系

概要

量子アニーリングとは, 量子力学を利用した組み合わせ最適化問題を解くための計算技術である. 現在存在する量子アニーリングマシンでは, 実行可能解や最適解を得るためには複数回繰り返して解く必要があるが, この際それぞれの試行は独立しており繰り返しの回数が大きくなったり, 同じ解に辿り着きやすいなどと言った問題が存在する. そこでこれまでに得た解の情報を, 目的関数に反映させることによって, 効率的に解の探索を行う手法を提案する. また, 本提案手法が量子アニーリングにおけるfair samplingの問題にも適応可能なことを示す.

1. Introduction

量子アニーリング, アニーリング法とは, 量子力学の原理を利用して以下の最小化・制約なし２次2値整数計画問題を解くアルゴリズムである.

$$H = -\sum_{i<j} J^{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h^i\sigma_i$$
$$\sigma_i \in \{-1, 1\}$$

ここで, J^{ij}, h^i は実数値のパラメータである.

理論的には, 総計算時間を無限大の極限にすることによって, アニーリング法も量子アニーリング法も, 最適解が得られていることが知られている.

しかしながら, 実際の遷移速度では, 最適解が得られることは稀である. また, 実在する量子アニーリングマシン（D-wave）では, 現実的な様々な制約により, 最適解を得ることは稀であり, 量子アニーリング法を模した古典的なアルゴリズムであるアニ

ーリング法も, 最適解に収束することは知られているが, 問題サイズによっては, 現実的な時間内での試行回数では最適解を得られることは稀である.

現在の量子・古典的なアニーリング法では, 最適解を含む良い解を得るためには, 何度か繰り返し解を求める必要がある. この際それぞれの試行は独立しており, 前回得た解の情報を次の試行に用いることは現在行われていない.

このような何度も解を求める探索においては, 最適解でないにも関わらず同じ解を複数回得たり, 良くない解を何度も得てしまうという問題が存在する.

また, 量子アニーリングにはfair Samplingの問題が存在する. これは, いくつか複数の最適解が存在する場合, 古典的なアニーリング法ではそれぞれの最適解が等確率で得られるのに対し, 量子アニーリングを用いるとそれぞれの解を得る確率にバイアスが生じてしまい, 場合によっては特定の最適解が得られないという問題である [1]. この問題を解決する手段として, 例えば量子アニーリングに用いる横磁場の形状を多体相互作用を持つものに変更するなどの先行研究 [2]を初めとする様々な研究があるものの, 根本的な解決には至っていない.

提案手法では, これまでに得た解の情報を, 目的関数を変形することによって保存し, より効率的な探索を目指す. 前回までの解の情報を, 目的関数の反映させる手法として, 数理最適化におけるヒューリスティックアルゴリズムとしてよく用いられる誘導局所探索法とタブー探索法を用いる.

本来のタブー探索では, これまでに得た局所最適解を, 移動禁止リストとして保存するが, アニーリング法実行時には, メモリとして解を保存することができないため, タブーリストをWishart Planted Ensembleを用いてその解に対してペナルティーを課す手法を提案する.

また, 本提案手法がfair samplingの問題にも適応することを示す. 具体的には, 本手法を用いて目的関数を変形することにより, 複数の大域的な最適解が得られることを示す.

2. 研究背景

ここでは, 量子アニーリング法と, 一般的な数理最適化で用いられる局所探索法, そして前章でのべたfair samplingの問題を説明する.

Vol.2021-QS-2 No.2
2021/3/29

数理最適化では, 最適解の求解が現実的に困難な場合には, よくヒューリスティックアルゴリズムが用いられる. ヒューリスティックアルゴリズムは, 得られる解に精度の保証は無いが, これまでの経験的に良い解が得られることがわかっている手法である. 解の精度に保証がないという観点から量子・古典アニーリング法も, ヒューリスティックアルゴリズムとみなすことができる.

2.1 量子アニーリング法における探索

量子アニーリングは, 制約なし2次2値整数計画問題を解く量子力学に基づいたアルゴリズムである. 量子アニーリングでは, 自明な基底状態を持つハミルトニアンから, 求めたい問題ハミルトニアンへ時間的な発展をする. 時間発展の速度を十分に大きくすることによって, 最終的に問題ハミルトニアンの基底状態を得られることが知られている.

量子アニーリングでは, 時間発展の途中で測定をすることができず, 実際に解を測定するのは, 時間発展が完了した後である.

また, 以上の量子アニーリングの操作を模した古典的なアルゴリズムがアニーリング法である. これらの古典・量子アニーリング法では, 1回の試行で十分な精度の解が得られなかった場合には, 以上の試行を繰り返し行う必要があり, 1回の試行の操作の回数が大きくなる.

2.2 局所探索法

局所探索法とは, 最適解を求める事が困難な最適化問題に対して, なるべく良い解を求めるヒューリスティックなアルゴリズムである. 局所探索法では, 初期解と呼ばれる何らかの解を予め用意しておき, その解から何らかの操作を加え, 次の解の候補を1つ以上生成する. この操作を近傍操作と呼ぶ. そして, その解の候補の中から目的関数の値が一番小さい値の解に移動する, というのを繰り返すアルゴリズムである. 終了条件は, 指定の反復回数やある解の近傍に目的関数値が改善するような解が存在しなくなった場合にするのが一般的である. この, 解の近傍にそれ以上良い目的関数値の解が存在しないような解を局所最適解と呼ぶ.

これらのアルゴリズムは, 良い解どうしは似通った構造を持っているだろう, という概念に基づいており, この概念は proximate optimality principle (POP) 呼ばれる. すなわち, ある解から何らかの操作を加えてその解の近傍を探索する事により, 良い解からさらに良い解を見つけようというのが局所探索法の考え方である.

局所探索法では, ある解からスタートして, その解から何らかの操作を加え, その中で目的関数値が一番良い解を次の解に選ぶので, 局所最適解に陥ってしまうことが問題点として上げられる. この局所解からの脱出を達成するために, 局所探索法を発展させたアルゴリズムとして, 誘導局所法とタブー探索法が存在する.

2.2.1 誘導局所探索法

誘導局所法では, 局所探索において近傍操作を加えた解の候補から次の解を選ぶ段階で, 評価の基準に目的関数fを用いるのではなく, 目的関数に変形を加えた評価関数f'を用いる. このf'を適応的に変形することによって, 局所解からの脱出を実現する. すなわち, これまでの探索で得た局所最適解の構成要素の一部に対してペナルティーを目的関数fに加え, 新しい目的関数f' の元で, 同様の局所探索を行う. この際に, 適切なペナルティーを与えることによって, 前回得た局所最適解は, f'の元では局所最適解にはならず, さらなる探索が可能になる.

これは, 目的関数を変形することによって, 前回までに得た探索の結果を保存しているとみなすことができる.

解のどの構成要素に, どのペナルティーを加えるかは, 問題によって工夫が必要であるが, Voudouris, Tsang[4]によって, 汎用的な手法が提案されている.

以下では, 巡回セールスマン問題を例に, 具体的な方法を説明する.

それぞれの辺(i,j) に対して, ペナルティー$p_{i,j}$ を用意し, $p_{i,j} := 0$ として初期化する.

このペナルティーを用いて, 元の目的関数fを変形したf'を以下のように定義する.

$$f'(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + \alpha \sum_{(i,j)\in E_{tour}(\boldsymbol{x})} p_{i,j}$$

ここで, $(0 <)\alpha$ はアルゴリズムにおけるパラメータであり, 元の目的関数fは解$\boldsymbol{x}$で得られた順回路の長さである. また, $E_{tour}(\boldsymbol{x})$ は, 解$\boldsymbol{x}$ に含まれる辺集合である.

ペナルティー$p_{i,j}$のかけ方は, ある局所最適解$\boldsymbol{x'}$ が得られた場合に, $E_{tour}(\boldsymbol{x'})$ の中で, $d_{i,j}/(1+p_{i,j})$ が最大となる辺(i,j)に対して,

$$p_{i,j} = p_{i,j} + 1$$

とする. ここで, $d_{i,j}$ は, 辺(i,j) の重みである.

すなわち, 前回の探索で得られた解の要素（ここでは辺）の中で, これまでにペナルティーが加わってない辺かつ, 辺の長さが大きいものにペナルティーを加えていく.

αの値をある程度大きくとることで, 得られた局所最適解$\boldsymbol{x'}$ は, f'の元では局所最適解にはならず, 探索を続行することが可能である.

2.2.2 タブー探索

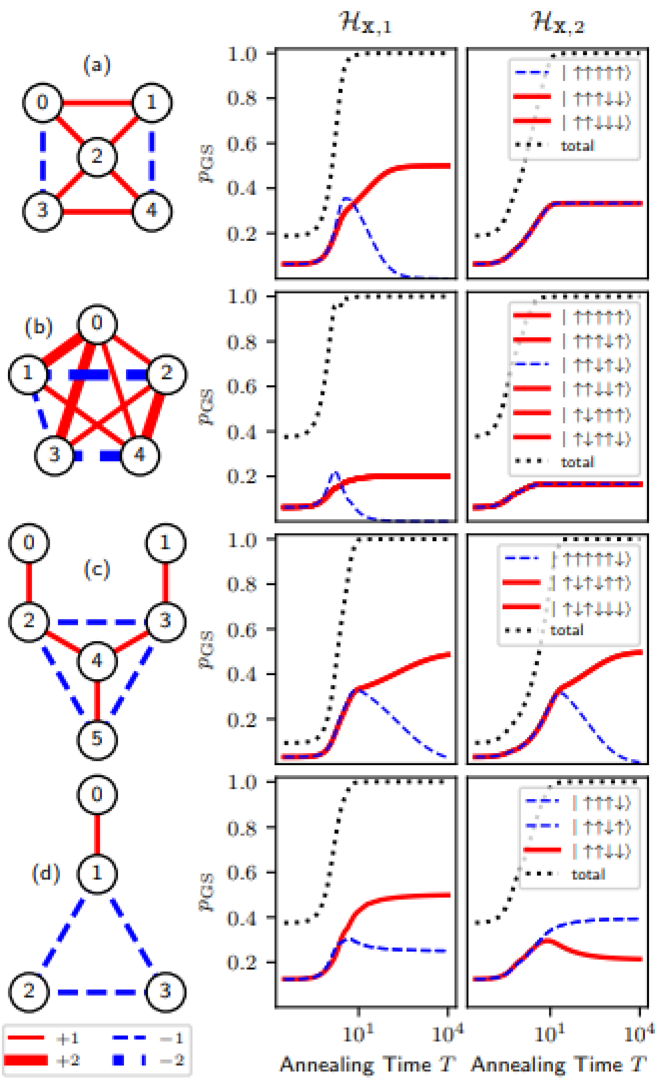
タブー探索では, 局所探索において近傍操作を加え解の候補を作成した後, 次にどの解に移動するか, という方法について工夫を加えたアルゴリズムである. 解xの近傍$N(x)$の中で, 自分自身x 以外の解の中で, 目的関数値が最小となる解に移動する. 次に移動する解の中で, 自分自身を除くことによって, 局所最適解に陥った場合でも, 続けて探索することができる.

また一方で, 現在の解xが局所最適解だった場合に, 近傍$N(x)$ の中から, 自分自身x以外の中で最良の解に移動する, という操作を続けて行うと, いくつかの操作を繰り返して, 再びもとの解xに戻ってくる可能性がある. このような減少をサイクリングと呼ぶ. タブー探索では, このサイクリングを防ぐために, タブーリストと呼ばれる解の集合を用意し, これに含まれている解への移動を禁止する.

このタブー探索は, これまでに得た解の情報を直接タブーリストとして保存している. アニーリング法では, 禁止リストを保存しておき, それらの移動を制限することができないので, 何らかの手法を用いて, 目的関数にこれらの情報を反映させる手法が必要である.

2.3 Fair sampling

量子アニーリングには, 古典アニーリング法とは違い 複数の最適解が存在する際に等確率でそれらの解を得ることができないfair samplingの問題が存在するが, これを詳しく説明するために先行研究 [2]の論文中の図 (Fig. 1)を以下に引用しながら解説を行う.



左図は量子アニーリングにて用いた数スピンのインスタンスを表しており, 右図はそれらのインスタンスにて量子アニーリングを実行した際の, アニーリング時間に対する各最適解への遷移確率を表している. $\mathcal{H}_{\mathbf{x},1}$ が通常の横磁場を用いた量子アニーリング, $\mathcal{H}_{\mathbf{x},2}$が本先行研究にて提案された量子揺らぎを用いた量子アニーリングを表しているが, いずれの場合も各最適解が得られる確率が大きく違い, 解によっては得られる確率が0となってしまっている場合も存在する. これにより, ナイーブな量子アニーリングでは全ての最適解を網羅することができないという問題がある.

3. 提案手法

ここでは, 本研究の提案手法を示す. 本提案手法では, アニーリング法に誘導局所探索とタブー探索法を組み合わせて, アニーリング法で得た解を, 次のアニーリングの結果に反映させる.

ここで, アニーリング法で得た解を一つの局所最適解とみなすことにより, その解全体や解の構成要素に対して, それぞれペナルティーとタブーをかけ, 目的関数を変形することによって, これまでの解を反映させる.

タブー探索では, これまでに得た解をタブーリストとして保存して, それらの解への移動を禁止するが, アニーリング法ではこれができないため, その解の構成全体に対してペナルティーをかけることによって, これを実現する.

解の構成全体にペナルティーをかける手法として, 指定した解を最適解として持つ目的関数を生成することが可能な Wishart Planted Ensemble (WPE)[3] を用いる.

これらの手法は, 用いるアニーリング法が, 古典・量子問わず実行することが可能である.

以下では, 具体的に巡回セールスマン問題を対象としたアルゴリズムを示す.

3.1 誘導局所探索法 + アニーリング法

ここでは, アニーリング法に誘導局所探索法を組み合わせたアルゴリズムの具体的な手順を示す.

基本的な方針としては, アニーリング法で得た解を一つの局所最適解とみなして, 局所探索法におけるペナルティーを加え目的関数を変形する, という操作を繰り返す.

この際ペナルティーの加え方としては, 2.2.1で使用したペナルティーのかけ方を採用する.

以下に具体的な手順を示す.

Step 0 : 各辺(i, j) に対して, $p_{i,j} = 0$ とする.

Step 1 : 目的関数$f'(\boldsymbol{x}) = f(x) + \alpha \sum_{(i,j)\in E} p_{i,j} x_{i,t} x_{j,t}$ の元でアニーリング法を用いて, 解$\boldsymbol{x'}$ を得る.

Step 2 : $d_{i,j}/(1 + p_{i,j})$ が最大となるような辺 (i, j)に対して, $p_{ij} = p_{i,j} + 1$ とし, Step1に戻る.

以上の操作を規定の回数行う. ここで, $d_{i,j}$ は各頂点間の距離, αはアルゴリズムのパラメータである.

3.2 タブー探索 + アニーリング法

ここでは, アニーリング法にタブー探索を組み合わせたアルゴリズムの具体的な手順を示す.

基本的な方針は, 誘導局所探索法のときと同様に, アニーリング法で得た解を一つの局所最適解とみなして, その解をタブーリストに加える. このとき, その解をタブーにしているという情報を, 目的関数に加えるために, その解を最適解として持つ目的関数を, WPEによって作成する.

以下に具体的な手順を示す.

Step 1 : 目的関数f'の元で アニーリング法を用いて, 解$\boldsymbol{x}'$ を得る.

Step 2 : WPEを用いて, $\boldsymbol{x}'$を最適解に持つハミルトニアン W_k を作成し, $f' = f - \beta \sum_k W_k$ とする.

以上の操作を規定の回数行う.

この際, 得た解全てに対して, ペナルティーW をかけると, 目的関数の形が変わりすぎて, 良い解が得られない可能性があるため, 全てではなく部分的にかける手法を採用する.

つまり, これまでに得た解の中で, いくつかの特に悪い解に対してWをかけることによって, その悪い解の周りは探索しないようにする.

3.3 タブー探索 + 誘導局所探索法 + アニーリング法

以上の2つの手法を組み合わせた手法を説明する.

基本的な方針としては, 特に悪い解に対してタブーをかけながらも, 良い解に対しては, 部分的なペナルティーをかけることによって, 良い解の周りを重点的に探索されることを目指す.

以下に具体的な手順を示す.

Step 0 : 各辺(i, j) に対して, $p_{i,j} = 0$ とし, 目的関数$f'(\boldsymbol{x}) = f(x) + \alpha \sum_{(i,j)\in E} x_{i,t} * x_{j,t}$ とする.

Step 1 : 目的関数$f'(\boldsymbol{x}) = f(x) + \alpha \sum_{(i,j)\in E} p_{i,j} x_{i,t} x_{j,t} - \beta \sum_k W_k$ の元でアニーリング法を用いて, 解$\boldsymbol{x}'$ を得る.

Step 2 : $d_{i,j}/(1+p_{i,j})$ が最大となるような辺 (i,j)に対して, $p_{ij}=p_{i,j}+1$ とする.

step 3 : WPEを用いて, $\boldsymbol{x}'$を最適解に持つハミルトニアン W_k を作成する.

以上の操作を規定の回数繰り返す.

3.4 Fair samplingにおけるタブー探索の応用

ここでは, 量子アニーリングにおいて生じるfair samplingの問題に対し, 3.2で述べたタブー探索を用いる手法を紹介する.

基本的な方針として, アニーリングにて得られたある1つの最適解に対し3.2の手法で目的関数にタブーをかける操作を繰り返すことにより, 全ての最適解を得るという戦略を取る.

使用するインスタンスとして, 先行研究[2]にて用いられた小スピン系のインスタンスを用い, 次の手法を取る.

以下に具体的な手順を示す.

Step 1 : シュレディンガー方程式の時間発展を用いて量子アニーリングを行い, 解$\boldsymbol{x}'$を得る.

Step 2 : WPEを用いて, $\boldsymbol{x}'$を最適解に持つハミルトニアン W を作成し, $f'=f-W$ とする.

以上の操作を繰り返し行う.

アニーリングに用いる量子揺らぎとして通常用いられる横磁場 (先行研究[2]の$\mathcal{H}_{\mathbf{x},1}$)を用い, スケジュールに関しては先行研究[2]と同じものを用いた. 量子アニーリングの数値計算としてQuTip (http://qutip.org/) を用いた.

4. 数値実験

4.1 古典アニーリング法における数値実験

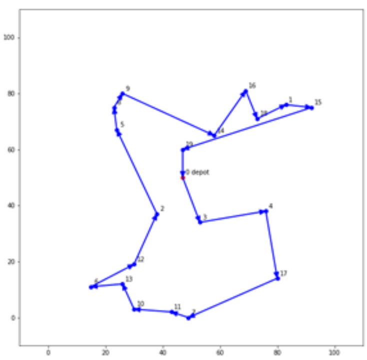
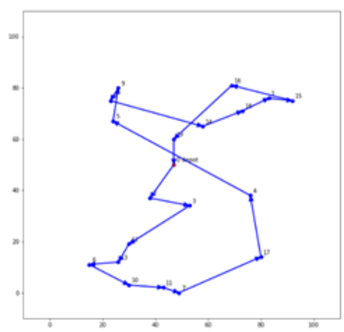
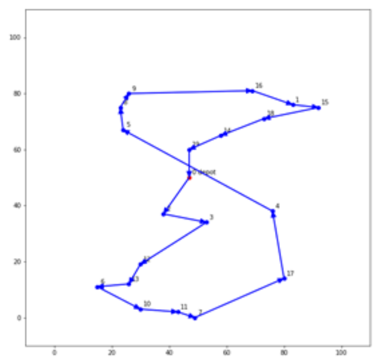
本提案手法が有効性を検証するために, 非対称巡回セールスマン問題を用いて, 数値実験を行う.

解の対称性を省くことを目的として, 通常の巡回セールスマン問題（以下 TSP ）ではなく, 非対称巡回セールスマン問題（以下 ATSP）を扱う. 数値実験のアニーリング法では, 古典的な方法であるアニーリング法を Pyqubo を用いて実装した.

それぞれの手法に対して, 都市数$N = 20$ で, それぞれ1000回アニーリングを行った際の目的関数値の最小値, 分散, 平均値を以下の表に示す.

	Annealing	Tabu + Annealing	Tabu + Guided + Annealing
平均値	520.1432191	520.542441	510.875912
分散	473.3685593	506.7671997	499.3080908
最小値	464.9074158	456.5952084	453.1275893

また, アニーリング法, タブー探索 + アニーリング法, タブー探索 + 誘導局所探索法 + アニーリング法のそれぞれの実験で得た中で一番良かった解の得た順回路を以下に示す.

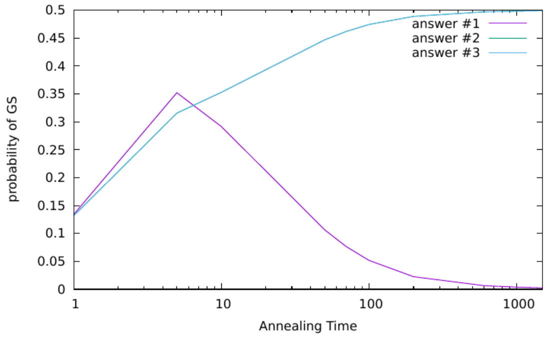




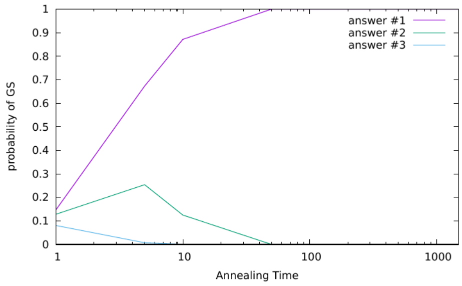
平均値及び最小値に関して, タブー探索 + 誘導局所探索 + アニーリング法のアルゴリズムで最善の結果を得ることができた. しかしながら, 図を見て分かる通り, まだ最適解にたどり着くことはできていないため, さらなる改良が必要である.

4.2 量子アニーリングにおけるFair samplingの数値実験

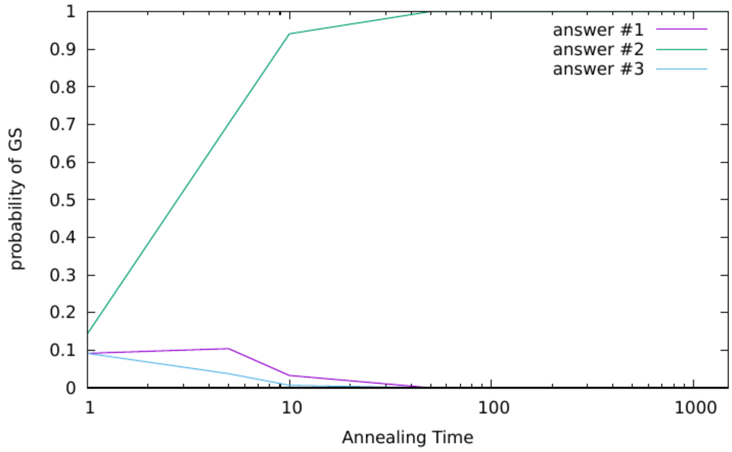
続いて, 本提案手法を量子アニーリングで解いた際の結果を示す. 参考文献[2]のFig. 1に示されているインスタンス(a)にて実験を行った結果を示す.

下図の左が元の目的関数を用いて量子アニーリングを行った結果で, 参考文献[2]のFig. 1の(a)のアニーリング結果と同じ図である. answer #1〜#3が各最適解を示す. ここで, answer#3に対し3.4に述べた手法で目的関数にペナルティを与え, 再びアニーリングを行うと右図のようになり, answer#1の得られる確率が増大していることがわかる.





さらに, answer#1に対してもペナルティを与え, 再びアニーリングを行うと下図のようになり, ペナルティをかけられていないanswer#2の得られる確率が増大することがわかる.



これにより, 提案手法であるタブー探索を用いることにより, 量子アニーリングを用いて全ての最適解を得ることができることがわかった.

また, 参考文献[2]のFig. 1の他のインスタンスでも同じような結果が得られた.

参考文献

[1] : Yoshiki Matsuda, Hidetoshi Nishimori and Helmut G Katzgraber, Quantum annealing for problems with ground-state degeneracy, J. Phys.: Conf. Ser. **143** 012003 (2009)

[2] : Mario S. Könz, Guglielmo Mazzola, Andrew J. Ochoa, Helmut G. Katzgraber, and Matthias Troyer, Uncertain fate of fair sampling in quantum annealing, Phys. Rev. A **100**, 030303(R) (2019)

[3] : Firas Hamze, Jack Raymond, Christopher A. Pattison, Katja Biswas, and H. G. Katzgraber, Wishart planted ensemble: A tunably rugged pairwise Ising model with a first-order phase transition, Phys. Rev. E **101**, 052102 (2020)

[4] : Christos Voudourisa and Edward Tsang, Guided local search and its application to the traveling salesman problem, European J. Operational Research, vol.113, 469-499 (1999)