# シミュレーテッドアニーリングの並列化手法の性能向上

榎本観[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

## 1. 概要

近年、組合せ最適化問題をヒューリスティクスで解く手法としてイジング模型の最適化問題が注目されており、この最適化問題を解くために、量子アニーリングを用いた量子デバイスやこれにインスパイアされたイジングマシンなど様々なデバイス、アルゴリズムが開発されている。このアルゴリズムの一つとして、元のシステムを冗長化したイジング模型を用いることにより並列計算を用いた高速化が可能となるモメンタムアニーリング[1]と呼ばれるアルゴリズムが開発されたが、特定の性質を持つ問題に対して最適解から遠い解を得てしまう問題が存在する。我々はシステムの冗長化手法を工夫することによりこの問題を軽減する手法を考案した。

## 2. 背景

### 2.1 モメンタムアニーリング

イジング最適化問題とは、与えられた対角成分のない$N$次実対称行列の$J$ に対し、以下に示す二次形式である目的関数

$$H(\sigma) = \frac{1}{2}\sigma^t J\sigma = \sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j$$

を最小化するようなスピン列$\sigma \in \mathfrak{S}^N := \{-1,+1\}^N$を求める問題であり、一般に多項式時間では解けない問題であることが知られている。このような問題に対してよく用いられるメタヒューリスティクスアルゴリズムとしてシミュレーテッドアニーリングが挙げられるが、アルゴリズムの数学的性質上スピンを1つずつ逐次的に更新する必要があり、この処理が計算速度においてボトルネックとなる。

モメンタムアニーリング[1]は上の$H(\sigma)$ のスピン列を$\sigma^L, \sigma^R \in \mathfrak{S}^N$に冗長化し、目的関数を

$$H'(\sigma^L, \sigma^R) = \sum_{i\neq j} J_{ij}\sigma_i^L\sigma_j^R - 2\sum_i w_i\sigma_i^L\sigma_i^R$$

で定義してシミュレーテッドアニーリングを行う計算手法である。この手法はスピン列$\sigma^L, \sigma^R$が同一の配位となる場合に元の目的関数と等価になり、さらにスピン列$\sigma^L(\sigma^R)$の更新の際にスピン列$\sigma^R(\sigma^L)$の情報しか必要としないためにスピン列$\sigma^L, \sigma^R$を並列して更新できる特徴があり、GPGPU等の並列計算機を用いた高速な計算が可能となる。目的関数第2項はスピン列$\sigma^L, \sigma^R$が同一の配位を持つようにペナルティをかける働きをする項であり、係数$w_i$が小さすぎるとスピン列$\sigma^L, \sigma^R$が同一の配位となりにくくなる一方、$w_i$が大きすぎると第一項に含まれる最適化問題を表現する$J$の効果を消してしまう問題があるが、先行研究[1]では$H'$を最小にするスピン列と、元の目的関数である$H$を最小にするスピン列が同一となるような$w_i$の条件についても論じており、

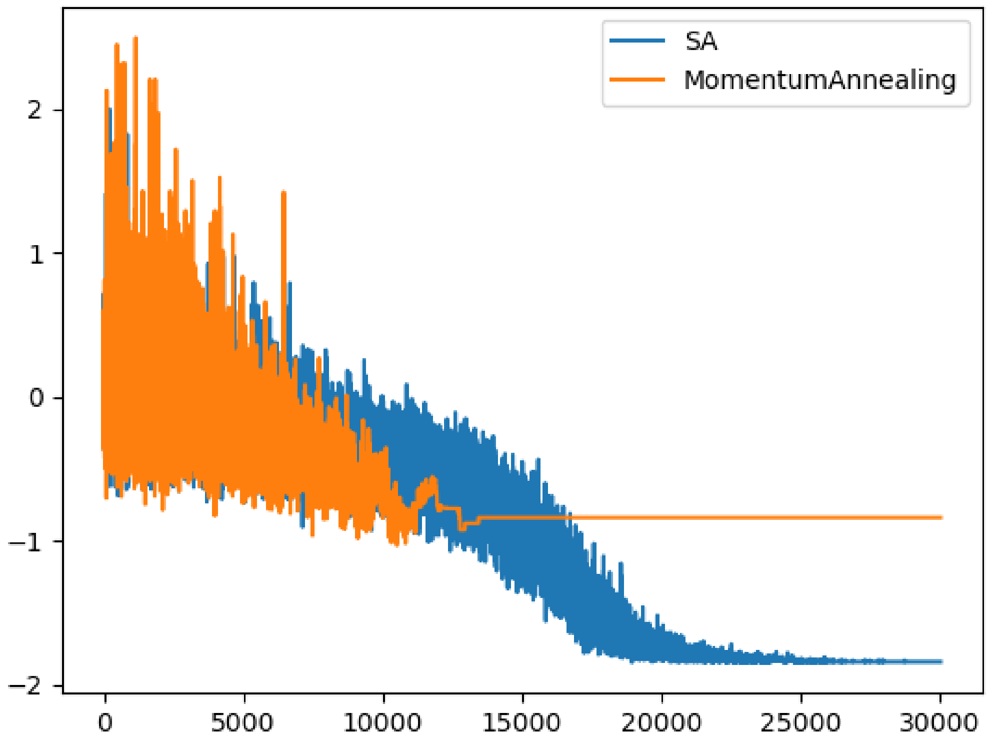
$$w_i = \begin{cases} \sum_j |J_{ij}|/2 - \sum_{j\in C} |J_{ij}|/4 & (i \in C) \\ \lambda/4 & (i \notin C) \end{cases}$$

とすれば良いことが知られている。ここで、$\lambda$は行列$J$の最大固有値、$C$は添字集合$\{1,2,...,N\}$の任意の部分集合を表す。

## 2.2 モメンタムアニーリングの問題点

モメンタムアニーリングは、アニーリングの過程でスピン列$\sigma^L,\sigma^R$が同一の配位を取ることを前提としているため、スピン列$\sigma^L,\sigma^R$が同一の配位を取りにくくなるような行列$J$が与えられた際にパフォーマンスを発揮しない問題がある。特に行列$J$に含まれる要素に正の値が多いモデルの場合、スピン列$\sigma^L,\sigma^R$が互いに逆を向いたほうが第1項のエネルギーが減少するため、このような問題点が顕著に現れる。

下図はアニーリングにおけるモンテカルロステップに対する目的関数の値を表している。目的関数として$-1$から$+1$を取るランダムな配位で$J$を設定している。途中で目的関数の値が固まってしまっているのが見て取れる。




# 3. 手法

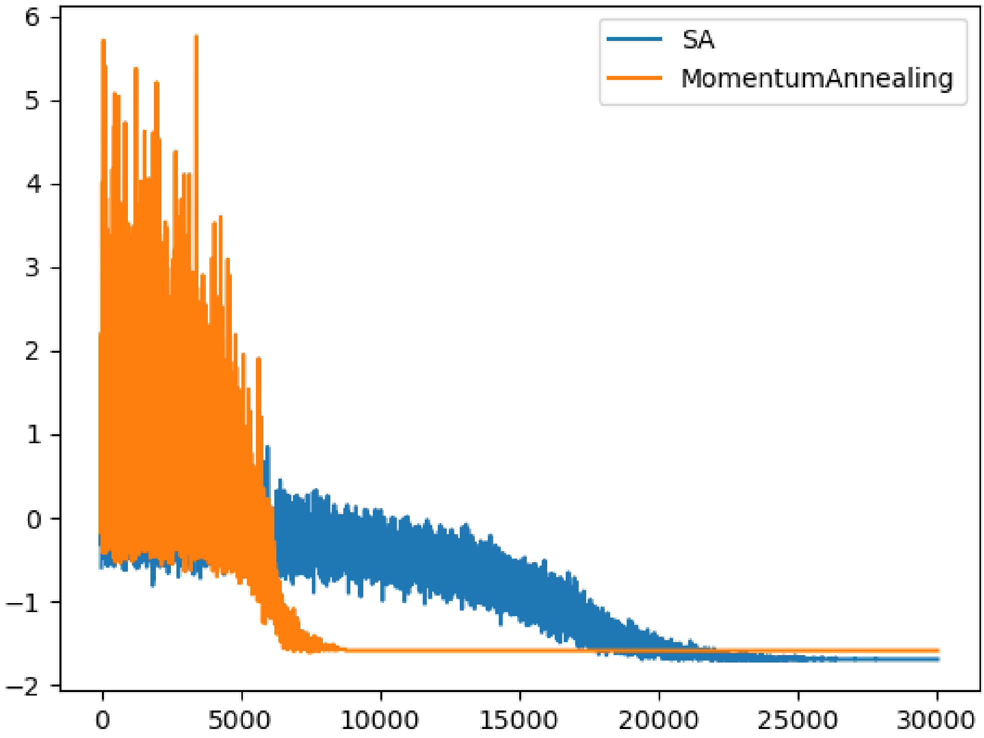
これらの問題を解決するために、参考文献[1]を拡張した以下のコスト関数を利用した。

$$H^d(\sigma^1,\sigma^2,\cdots\sigma^{2^d}) = \frac{1}{d}\sum_{i<j(ham(i,j)=1)}\left\{\sum_{k\neq l} J_{kl}\sigma_k^i\sigma_l^j - 2\sum_k w_k\sigma_k^i\sigma_k^j\right\}$$

ここで、$ham(i,j)$とはイジング模型としてのインデックス$i$と$j$のハミング距離を指す。

# 4. 数値計算結果

上式を用いた計算の結果、以下の通りになった。




この結果を見ると、MomentumAnnealingのコストがSAに匹敵していることがわかる。

この詳細については本講演にて述べる。

# 参考文献

[1] Takuya Okuyama, Tomohiro Sonobe, Ken-ichi Kawarabayashi, and Masanao Yamaoka, Binary optimization by momentum annealing, Phys. Rev. E **100**, 012111 (2019)