

エネルギー関数の変形により局所最適解を回避する QUBO アルゴリズム

吉村 友和^{1,a)} 白井 達彦^{1,b)} 多和田 雅師^{2,c)} 戸川 望^{1,d)}

概要: 組合せ最適化問題を用いて社会における多くの問題がモデル化できるため、高速・高精度に組合せ最適化問題を解く方法に関心が集まっている。組合せ最適化問題を Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) として定式化し、専用ハードウェア上でヒューリスティック法を用いて解く手法が存在する。ヒューリスティック法のひとつである Simulated Annealing (SA) は近傍探索時に確率的に解の悪化を許容することによって局所最適解を脱出するアルゴリズムである。エネルギー関数が多峰性を有する場合や起伏が大きい場合に、現実的な実行時間では SA の解は局所最適解に留まる問題が知られている。本稿ではエネルギー関数を表現する QUBO 行列を変形させエネルギー関数の概形を歪ませることにより、局所最適解から脱出し最適解あるいは最適解より近い値を求めるアルゴリズムを提案する。局所最適解に留まりやすい組合せ最適化問題の例としてグラフ分割問題を取り上げ、局所最適解を回避する提案手法の SA に対する有効性を検証する。

1. はじめに

1.1 研究背景と目的

組合せ最適化問題を用いて多くの社会の問題がモデル化できるため、短時間に組合せ最適化問題の最適解を得る方法に関心が集まっている。例えば組合せ最適化問題のうち、巡回セールスマン問題 [1] の最小距離の経路を短時間に得られればより効率的な配送が可能になり、最小カット問題 [2] の最小カットを短時間に得られれば集積回路のレイアウトをより効率的にできる可能性がある。組合せ最適化問題の多くは NP または NP 困難であり、従来のノイマン型コンピュータでは現実的な時間で解くことは困難だった。そこで D-Wave マシン [3]、デジタルアニーラ [4]、CMOS アニーリングマシン [5]、コヒーレントイジングマシン [6,7]、シミュレーテッド分岐マシン [8] といったイジング計算機と呼ばれる組合せ最適化問題に特化したハードウェアアクセラレータが開発されている。

イジング計算機に入力可能なデータ形式はイジングモデル [9] と呼ばれる。イジングモデルはもともとは統計力

学において用いられていたモデルである。組合せ最適化問題をイジングモデルとして表現するとき、その組合せ最適化問題の目的関数と制約条件がイジングモデルのエネルギー関数で記述される [10]。エネルギー関数を最小化する決定変数の状態をそのイジングモデルの基底状態と呼び、基底状態から元の組合せ最適化問題の解を得ることができる。イジング計算機はイジングモデルという 1 種類のデータ形式のみを取り扱うことで、ハードウェアアクセラレータとしての設計コストを抑え、性能を上下するアルゴリズム的なノウハウを集約している。イジングモデルと構造が等価かつ相互変換可能なモデルとして、Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) [11] と呼ばれる定式化がある。イジングモデルや QUBO はバイナリ変数の二次形式で表現される。二次形式で表現できない三次以上の項が現れるエネルギー関数も、変数を追加することで三次以上の項を二次項に変換し二次形式に落とし込むことができる [12]。これにより三次以上のエネルギー関数で表現される組合せ最適化問題もイジングモデルや QUBO を用いて一元的に解くことができる。

イジング計算機の多くはヒューリスティック法と呼ばれるアルゴリズムが動作している。ヒューリスティック法には逐次改善法 [13] や Simulated Annealing (SA) [13] がある。逐次改善法は現在の解から近傍解を探索し、解が改善（エネルギーが減少）していたら新たな解として受理し、解が悪化（エネルギーが悪化）していたら却下するアルゴリ

¹ 早稲田大学基幹理工学部情報通信学科

Waseda University, Shinjuku, Tokyo 169-8555, Japan

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

Waseda University, Shinjuku, Tokyo 162-0042, Japan

a) tomokazu.yoshimura@togawa.cs.waseda.ac.jp

b) tatsuhiko.shirai@aoni.waseda.jp

c) tawada@togawa.cs.waseda.ac.jp

d) togawa@togawa.cs.waseda.ac.jp

ズムである。最後に得られる解は初期解に依存し、しばしば局所最適解に陥る問題がある。逐次改善法を改良したアルゴリズムが SA である。SA は逐次改善法と同様に現在の解に対して近傍解を探索することに基づくが、近傍解が悪化していても、ある確率で新たな解として受理することによって局所最適解から脱出する。その確率を受理確率と呼ぶ。受理確率は温度と呼ばれるパラメータによって制御する。温度を徐々に下げることによって、受理確率は徐々に小さくなる。その結果、逐次改善法が初期解に依存する、局所最適解に留まりやすいといった欠点があるのに対して、SA はこうした点を改善している。SA は解の収束が遅く、エネルギー関数の起伏が大きかったり局所最適解を数多く有する組合せ最適化問題を解く場合、現実的な実行時間では局所最適解に留まる問題がある [14]。

本稿では逐次改善法や SA の局所最適解に陥る可能性がある点を改善したヒューリスティック法として、エネルギー関数の変形により局所最適解を回避する QUBO アルゴリズムの最適化手法を提案する。提案手法では、確率的に QUBO 行列を変形させることでエネルギー関数を変形させる。SA の温度と同様に、確率的に解に摂動を与えることで局所最適解からの脱出を図り、大域的に解の探索を行う。

1.2 本稿の貢献

本稿の貢献は以下の通りである。

- QUBO 行列変形により大域的に解を探索する最適化手法を提案する。
- グラフ分割問題に対し提案手法の有効性を実験により検証する。計算機実験によりグラフ分割問題に適用させたところ、提案手法は SA に比べて同一のイテレーション回数で最大 48% カット数を削減した。

1.3 本稿の構成

本稿の構成は以下の通りである。2 章でイジングモデルおよび QUBO を説明する。3 章でグラフ分割問題を定義し QUBO 行列を導出する。4 章で QUBO 行列変形を用いてエネルギー関数を変形することで大域的に解を探索する手法を提案する。QUBO 行列の変形方法として 2 つの方法を提案し、QUBO 行列変形の局所最適解の脱出に対する有効性を説明する。5 章で逐次改善法、SA および提案手法で解いた実験結果を示し、実験結果を比較検討する。6 章で本稿をまとめ、今後の課題を述べる。

2. イジングモデルと QUBO

本章ではイジングモデルおよび QUBO を説明する。

2.1 イジングモデル

イジングモデル [9] とは、統計力学のモデルのひとつで

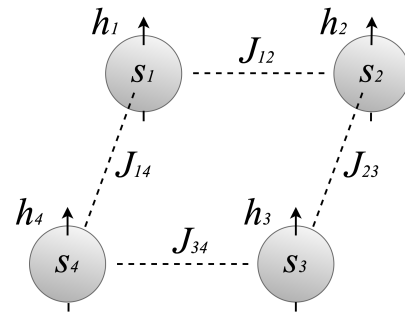


図 1 イジングモデルの模式図。

あり、頂点集合を V_1 、辺集合を E_1 とすると、無向グラフ $G_1 = (V_1, E_1)$ からなる。図 1 はイジングモデルの模式図である。各頂点にスピン s_i を割り当てる。 s_i は $\{-1, +1\}$ のどちらかの値をとる。イジングモデルのエネルギー関数は、各スピン間の相互作用によるエネルギーと各スピンの外部磁場から受けるエネルギーからなる。頂点 i のスピンを s_i 、頂点 i, j 間の相互作用係数を J_{ij} 、頂点 i の外部磁場を h_i とするとイジングモデル全体のエネルギー関数 H は式 (1) で表される。

$$H = \sum_{(ij) \in E} J_{ij} s_i s_j + \sum_{i \in V} h_i s_i \quad (1)$$

2.2 QUBO

QUBO [11] は式 (2) によって定義される最適化問題である。

$$\text{minimize/maximize } H' = x^t Q x \quad (2)$$

N を自然数とする。式 (2) の x は N 次元のベクトルであり、各成分として QUBO 変数と呼ばれるバイナリ変数 $\{0, 1\}$ を持つ。 $x = (x_1, \dots, x_N)$ とし、 x_i を x の i 番目の成分とする。 x_i は QUBO 変数と呼ばれる。式 (2) の Q は QUBO 行列と呼ばれる $N \times N$ の正方行列であり、一般的に上三角行列や対称行列が用いられる。

QUBO はイジングモデルと等価なモデルである。イジングスピン s_i と QUBO 変数 x_i の間には式 (3) に示す関係式が成り立つ。式 (3) を用いてイジングモデルと QUBO は一意に変換できる。

$$s_i = 2x_i - 1 \quad (3)$$

3. グラフ分割問題

制約条件によるエネルギー関数の障壁が大きく、多峰性を持ち局所最適解に陥りやすい組合せ最適化問題の 1 つにグラフ分割問題 [10, 15] がある。本章ではグラフ分割問題を定義し、QUBO への変換方法を説明する。

3.1 定義

グラフ分割問題は、 N 個の頂点の集合 V と辺集合 E を持つ無向グラフ $G = (V, E)$ が与えられ、 V を2つの部分集合に要素数が等しくなるように分けるとき、2つの部分集合間の辺の数(カット数)が最小になるように V を分割する問題と定義される。グラフ分割問題は NP 困難な問題であることが知られている。またグラフ分割問題は、2つの部分集合に属する頂点間をつなぐ辺の数が任意の数 k 未満となるような分割の仕方があるか否かを判別する NP 完全問題に変換できる [10]。

3.2 エネルギー関数

グラフ分割問題をイジングモデルに変換し、そのエネルギー関数を最小化して元のグラフ分割問題を解くことを考える。グラフ G の頂点 $v_i \in V$ に対してイジングモデルのスピン s_i が分割の方法を示すように変数を設定する。頂点 $v_i \in V$ が1つ目の部分集合に含まれるときは $s_i = +1$ 、頂点 $v_i \in V$ が2つ目の部分集合に含まれるときは $s_i = -1$ とする。 A, B を正のパラメータとすると、エネルギー関数は式(4)に示すように2つの項で表される。

$$H = A \left(\sum_{i=1}^N s_i \right)^2 + B \sum_{(i,j) \in E} \frac{1 - s_i s_j}{2} \quad (4)$$

式(4)の第一項は、2つの部分集合の要素数が等しいときに0となり、異なるときに正となる制約項である。式(4)の第二項は、部分集合間の辺の数に比例した値を与えるコスト項である。問題の制約条件より、式(4)の第一項は必ず0となっている必要がある。制約を満たす解を実行可能解と呼ぶ。頂点集合 V に含まれる頂点の最大次数を Δ とすると、式(5)が成立するとき実行可能解の集合と局所最適解の集合は一致する [10]。

$$\frac{A}{B} > \frac{\min(2\Delta, N)}{8} \quad (5)$$

式(4)、式(5)より、局所最適解の個数は頂点数 N とともに指数的に増大する。また、式(5)により、局所最適解から脱出するときの障壁が N に比例して大きくなる。図2は4頂点のグラフ分割問題のカットの例とエネルギー関数の概念図を示す。図2の a は局所最適解であり、スピン3をフリップ(スピンの値が+1のとき-1に、-1のとき+1に反転させること)した解 b は制約を満たさない解であり、a に比べエネルギーが増加する。a, b, c と遷移するとき、a と b のエネルギー差が障壁となる。以上より N が大きいとき、グラフ分割問題は SA にとって局所最適解を回避しづらい問題である。

3.3 QUBO 行列による表現

エネルギー関数は定数倍しても最適解は変わらないの

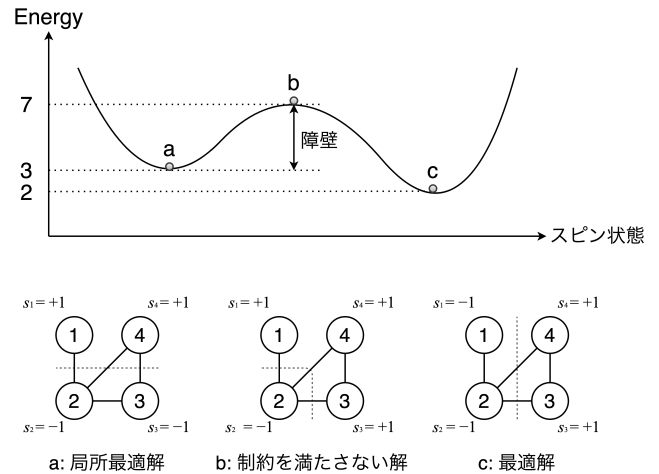


図2 4頂点のグラフ分割問題のエネルギー関数. a, b, c はそれぞれ局所最適解, 制約を満たさない解, 最適解を表す. $A = 1$, $B = 1$ を用いた。

で、式(4)に $4/B$ をかける。また、新たに A と B をまとめたパラメータ $\alpha = 4A/B$ を導入することで、式(6)に示すように新たなエネルギー関数を定義できる。

$$H' = \alpha \left(\sum_{i=1}^N s_i \right)^2 + \sum_{(i,j) \in E} (s_i - s_j)^2 \quad (6)$$

この変換に合わせて、制約の十分条件を表す式(5)は式(7)に示すように変換される。

$$\alpha > \frac{\min(2\Delta, N)}{2} \quad (7)$$

また、式(3)に示すイジングモデルと QUBO の関係式を用いて、 $s_i \in \{-1, +1\}$ で記述していたエネルギー関数を $x_i \in \{0, 1\}$ で記述する QUBO 表現に変換し、整理すると式(8)に示す通りとなる。

$$H' = \alpha \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N 4x_i x_j - \sum_{i=1}^N 4N x_i + N^2 \right) + \sum_{(i,j) \in E} 4(x_i^2 + x_j^2 - 2x_i x_j) \quad (8)$$

QUBO 表現においては $x_i = x_i^2$ が成り立つので、式(8)の1次の項を2次の項に変換する。また、式(8)から変数 x_i に依らない項を消し、式(8)に $1/4$ をかけるとエネルギー関数は式(9)のように記述できる。

$$H'' = \alpha \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j - N \sum_{i=1}^N x_i^2 \right) + \sum_{(i,j) \in E} (x_i^2 + x_j^2 - 2x_i x_j) \quad (9)$$

ここで頂点 i の次数を Δ_i とし、頂点 i, j 間に辺があるとき1、辺がないとき0となる変数を e_{ij} とする。QUBO 行列 Q を上三角行列とすると、 Q は式(10)に示す通りとなり、

最終的にエネルギー関数は Q を用いて式 (11) のように表せる。

$$q_{ij} = \begin{cases} 2\alpha - 2e_{ij} & (i < j) \\ \alpha(1 - N) + \Delta_i & (i = j) \\ 0 & (i > j) \end{cases} \quad (10)$$

$$H'' = x^t Q x \quad (11)$$

4. 提案手法

QUBO 行列変形を用いた最適化手法を提案し、提案手法の既存手法に対する局所最適解回避の有効性を示す。

4.1 提案手法のアルゴリズム

QUBO 行列に対して変形操作を行い、エネルギー関数の概形を歪ませることによって解が局所最適解から脱出し、より良い解に移動することを目指す。図 3 はエネルギー関数を歪ませることによる解の改善の様子である。図 3 の縦軸はエネルギーを表し、横軸は解空間を表す。図 3(a) のように局所最適解に陥っていたとき、図 3(b) のようにエネルギー関数を歪ませることによって、解の改善を期待できる。ヒューリスティック法として逐次改善法を用いた。以下に具体的な手順を示す。また、提案手法のフローチャートを図 4 に示す。

ステップ 1

組合せ最適化問題の QUBO 行列を求める。

ステップ 2

ステップ 1 の QUBO 行列に操作を加え、変形させた QUBO 行列を作成する。

ステップ 3

ステップ 2 の QUBO 行列を用いて逐次改善法をインナーループ数だけ試行する。

ステップ 4

ステップ 2 およびステップ 3 をアウターループ数だけ繰り返す。

インナーループ内では同一の QUBO 行列を解く。また、アウターループが進むにつれて QUBO 行列の変形を弱めていき、最終的には元の QUBO 行列を解く。この操作は SA における温度を徐々に下げていく操作と類似する。

4.2 QUBO 行列に対する操作

QUBO 行列の変形操作として、次の 2 通りを提案する。

要素加算法

図 5 に示すように QUBO 行列の各要素にある確率で定数を加算する。

行加算法

図 6 に示すように QUBO 行列の各行の要素にある確率で定数を加算する。

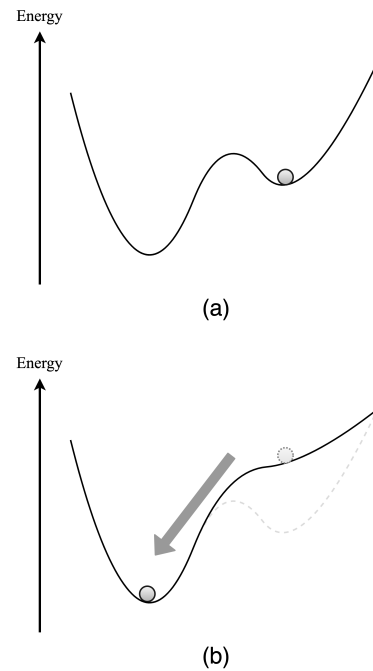


図 3 (a) 変形前. (b) 変形後.

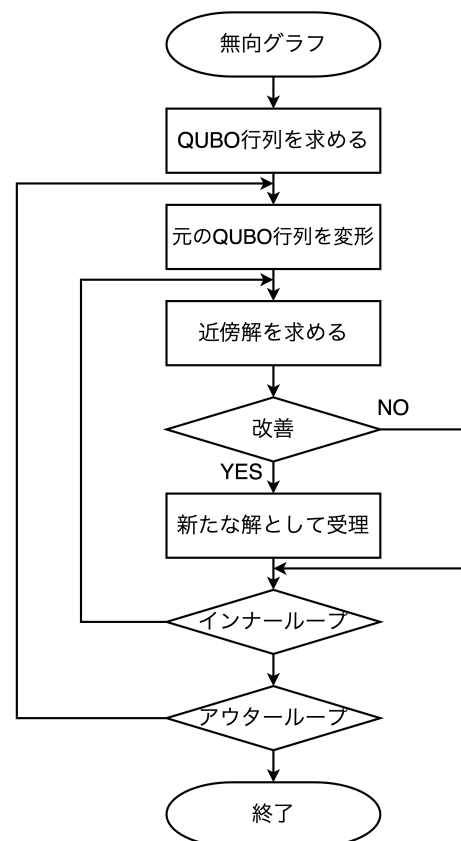


図 4 提案手法のフローチャート.

どちらの操作も QUBO 行列の要素に対してある確率で定数を加算する。この確率を加算確率と呼ぶものとする。加算確率はアウターループ数に対して線形に減少させる。

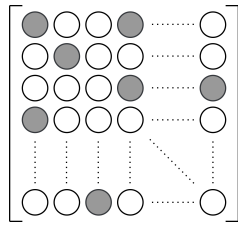


図 5 QUBO 行列の各要素に加算.

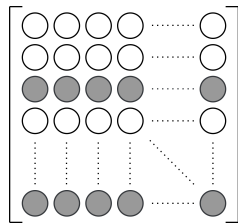


図 6 QUBO 行列の各行に加算.

4.2.1 要素加算法による局所最適解回避

提案する要素加算法が局所最適解から脱出する働きを示す。式 (11) のエネルギー関数において、ある局所最適解 x が与えられているとする。解 x の 1 番目の成分 x_1 と 2 番目の成分 x_2 について、 $x_1 = 1, x_2 = 1$ とする。局所最適解からのエネルギー障壁を ΔE とする。

QUBO 行列 $Q = \{q_{ij}\}$ の要素 q_{12} に定数 $q_{element} > \Delta E$ を加算する。これは相互作用係数 J_{12} を大きくすることに相当する。変形後のエネルギー関数は $H'' + q_{element}x_1x_2$ となり、例えば、 x_1 を 1 から 0 にフリップしたとき、エネルギーは減少する。したがって、変形後のエネルギー関数に対し逐次改善法を行うことで、局所最適解から脱出することができる。

加算する定数について、 $q_{element} > \Delta E$ は局所最適解を脱出するための十分条件であるが、実際には複数の要素に定数を加算するためより小さな値でも局所最適解脱出が可能である。

4.2.2 行加算法による局所最適解回避

提案する行加算法が局所最適解から脱出する働きを示す。式 (11) のエネルギー関数において、ある局所最適解 x が与えられているとする。解 x の 1 番目の成分 x_1 について、 $x_1 = 1$ とする。局所最適解からのエネルギー障壁を ΔE とする。

QUBO 行列の 1 行目に定数 $q_{raw} > 2\Delta E/N$ を加算する。これは磁場係数 h_1 を大きくすることに相当する。変形後のエネルギー関数は $H'' + \sum_{i=1}^N q_{raw}x_1x_i = H'' + Nq_{raw}x_1/2$ となる。ここで、簡単のため N を偶数と仮定し、実行可能解において $\sum_{i=1}^N x_i = N/2$ を用いた。例えば、 x_1 をフリップしたとき、エネルギーは減少する。したがって、変形後のエネルギー関数に対し逐次改善法を行うことで、局所最適解から脱出することができる。

加算する定数について、 $q_{raw} > 2\Delta E/N$ は局所最適解を脱出するための十分条件であるが、実際には複数の行に定数を加算するためより小さな値でも局所最適解脱出が可能である。

4.3 QUBO 行列変形の局所最適解回避の例

図 7 に示す無向グラフのグラフ分割問題を考える。式 (10) より $\alpha = 3$ とすると QUBO 行列は式 (12) に示す通りとなる。

$$Q = \begin{pmatrix} -8 & 4 & 6 & 6 \\ 0 & -6 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & -7 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & -7 \end{pmatrix} \quad (12)$$

現在の解を $x_{current}$ とするとき、近傍解は $x_{current}$ から 1 つの QUBO 変数を選び、その値を反転することにより生成する。この近傍解を生成する操作をシングルフリップと呼ぶ。

QUBO 変数が $x = (1, 0, 1, 0)$ の状態を考える。このときのエネルギーは式 (10) より、 $H'' = x^t Q x = -13$ となる。図 7 よりカット数は 3 である。QUBO 変数のシングルフリップの方法は 4 通りあり、シングルフリップする前とシングルフリップした後のエネルギーは表 1 に示す通りとなる。表 1 より、全ての場合でシングルフリップする前の状態の方がエネルギーが小さいため $x = (1, 0, 1, 0)$ は局所最適解の 1 つだと言える。

式 (12) の QUBO 行列の 1 行 3 列に 4 を加算し、式 (13) に示すように QUBO 行列が変形されたとする。

$$Q = \begin{pmatrix} -8 & 4 & \mathbf{9} & 6 \\ 0 & -6 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & -7 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & -7 \end{pmatrix} \quad (13)$$

この場合のシングルフリップ前後のエネルギーを表 2 にまとめる。表 2 よりシングルフリップし $x = (0, 0, 1, 0)$ または $x = (1, 0, 0, 0)$ とするとエネルギーが減少する。

ここでは $x = (1, 0, 0, 0)$ となった場合を考える。 $x = (1, 0, 0, 0)$ におけるシングルフリップ前後のエネルギーは表 3 に示す通りである。エネルギーが減少するのは $x = (1, 1, 0, 0)$ または $x = (1, 0, 0, 1)$ となった場合であり、 $x = (1, 1, 0, 0)$ になったとすると図 7 よりカット数は 2 でありカット数が 3 から 2 に改善されることになる。

以上のように QUBO 行列を変形させ解空間を歪ませることによって、局所最適解から脱出させより良い解を求めることができる。

5. 計算機実験

既存手法である逐次改善法および SA と提案手法を比較

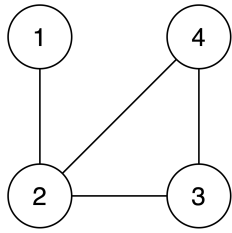


図 7 小さなグラフ分割問題.

表 1 $x = (1, 0, 1, 0)$ におけるシングルフリップ前後のエネルギー.

x_1	x_2	x_3	x_4	エネルギー
1	0	1	0	-9
0	0	1	0	-7
1	1	1	0	-7
1	0	0	0	-8
1	0	1	1	-6

表 2 QUBO 行列変形時の $x = (1, 0, 1, 0)$ におけるシングルフリップ前後のエネルギー.

x_1	x_2	x_3	x_4	エネルギー
1	0	1	0	-6
0	0	1	0	-7
1	1	1	0	-4
1	0	0	0	-8
1	0	1	1	-3

表 3 QUBO 行列変形時の $x = (1, 0, 0, 0)$ におけるシングルフリップ前後のエネルギー.

x_1	x_2	x_3	x_4	エネルギー
1	0	0	0	-8
0	0	0	0	0
1	1	0	0	-10
1	0	1	0	-6
1	0	0	1	-9

する計算機実験を行った. 本章では実験方法を説明し実験結果を考察する.

5.1 実験概要

グラフ分割問題に対し逐次改善法 [13], SA [13], および 4.2 節の提案手法 2 つを, それぞれアウターループの回数を変化させて実行し, 出力されるカット数を記録した. 無向グラフ G は 20 個作成し, 手法・アウターループ回数の組合せそれぞれに対しその 20 個の無向グラフに対するグラフ分割問題を解いた.

5.2 実験で用いた無向グラフ

実験で用いた無向グラフは以下のように作成した.

ステップ 1 全 128 頂点をリング状に接続する.

ステップ 2 ランダムに 128 辺加える.

ステップ 1 は全ての頂点を接続し連結グラフを作成するた

パラメータ	値
インナーループ	128
制約項のパラメータ α	8
初期温度	100
終端温度	0.1
初期加算確率	0.5
終端加算確率	0
各要素への加算定数	$q_{\text{element}} = 0.2$
各行への加算定数	$q_{\text{row}} = 0.1$

めの操作である. また, 同一頂点間には 2 つ以上辺を結ばないものとした. 辺の総数は 256 であり平均次数は 4 である.

5.3 計算機環境

実験に使用した計算機の OS は CentOS 7.6.1810, プロセッサは Intel Xeon Platinum 8180M 2.50GHz, メモリは 1.0TB である. 実装に用いた言語は Python 3.6.8 である.

5.4 実験パラメータ

逐次改善法, SA, 提案手法で用いた各パラメータの値を表 4 に示す. 制約項のパラメータ α は式 (7) から決定した. それ以外のパラメータについては, 予備実験において各パラメータを変更して実験を行い, 良好な値に決定した. 温度は初期温度から終端温度までをイテレーション回数に応じて指数的に減少させた. 加算確率は初期加算確率から終端加算確率までをイテレーション回数に応じて線形に減少させた. アウターループ回数は 10 回から 10^6 回までの 6 通りとする.

5.5 実験結果

各手法の各アウターループ数におけるカット数の平均を図 8 に示す. 縦軸がカット数の線形目盛, 横軸がアウターループの対数目盛になっている. 既存手法 2 つに比べ提案手法 2 つの方がより早くカット数が低下していることがわかる. 提案手法は SA に比べて同一のイテレーション回数で最大 48% カット数を削減している.

アウターループ数 10000 のときの各手法の箱ひげ図を図 9 に示す. 縦軸はカット数となっている. 下端, 上端はそれぞれカット数の最小値, 最大値を示す. 箱の下端上端はそれぞれ第 1 四分位数, 第 3 四分位数を示す. 箱の中線は中央値を示す. 既存手法である逐次探索法, SA に比べ提案手法 2 つの方がカット数が低下していることがわかる.

5.6 考察

グラフ分割問題は多数の局所最適解が存在し, 大域的な最適解またはそれに近い解に到達するのが確率的が低い. また, 式 (7) に示したとおりパラメータ α には下限が与え

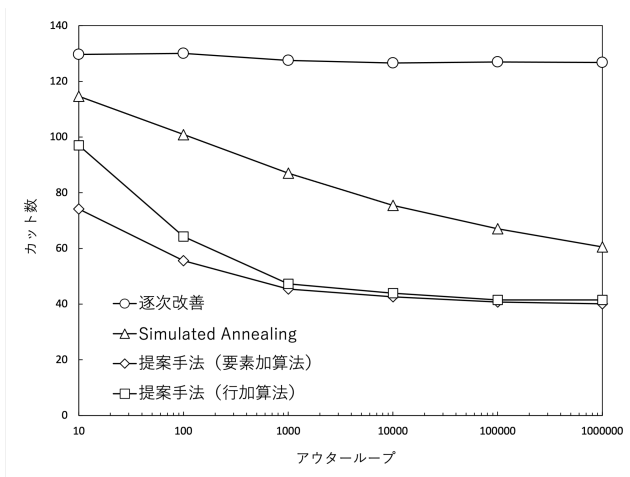


図 8 各手法のアウトターループ数に対するカット数.

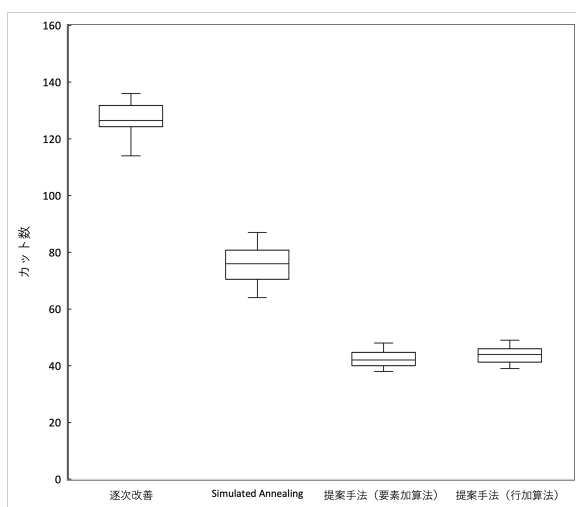


図 9 アウトターループ数 10000 における箱ひげ図.

られており局所最適解周辺の障壁が高いため、局所最適解から脱出するのが難しい。以上の理由により SA ではアウトターループ数を増やしても大域的な最適解に到達しなかったと考えられる。一方で提案手法はエネルギー関数の変形により局所最適解で安定することがないため大域的な最適解まで到達している。

今回の実験では提案手法は逐次改善法や SA よりもカット数が少ない良い解を出力する結果を示した。この結果は提案手法がグラフ分割問題に対して有効であることを示すとともに、汎用的な局所最適解の回避に有効である可能性を示唆する。また、提案手法の2つでは、アウトターループ数が小さい段階では、各要素に加算するほうが各行に加算するよりもカット数が小さく良い結果となったが、アウトターループ数が大きくなるとおおよそ同じ値に収束した。

6. おわりに

本稿ではイジングモデルや QUBO に落とし込まれた組合せ最適化問題を解くアルゴリズムとして逐次改善法や SA があり、これらのアルゴリズムではエネルギー関数の

起伏が大きく多数の局所最適解を有する問題では局所最適解に陥りやすいことを説明した。局所最適解に陥りやすい組合せ最適化問題の例としてグラフ分割問題を定義し、提案手法の局所最適解の回避に対する有効性について実験検証した。

今後の課題として、グラフ分割問題以外の組合せ最適化問題に提案手法を適用した場合に既存手法より有効であるのかを検証することが挙げられる。提案手法そのものは QUBO 行列に対する変形操作が実行可能ならば適用可能だが、組合せ最適化問題から QUBO 行列へのマッピングが異なる場合には有効性が異なる可能性がある。また近年量子アニーリング [16–19] が注目を集めており、提案手法が量子アニーリングにも活用できるのかも検証の必要がある。

謝辞 本研究の一部は、JST CREST Grant No.JPMJCR19K4 による。

参考文献

- [1] 久保幹雄: 巡回セールスマン問題への招待, オペレーションズ・リサーチ, Vol. 39, No. 1, pp. 25–31 (1994).
- [2] Boykov, Y. and Kolmogorov, V.: An experimental comparison of min-cut/max-flow algorithms for energy minimization in vision, *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, Vol. 26, No. 9, pp. 1124–1137 (2004).
- [3] Johnson, M., Amin, M., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A., Johansson, J., Bunyk, P. and et al.: Quantum annealing with manufactured spins, *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198 (online), DOI: 10.1038/nature10012 (2011).
- [4] Aramon, M., Rosenberg, G., Valiante, E., Miyazawa, T., Tamura, H. and Katzgraber, H. G.: Physics-Inspired Optimization for Quadratic Unconstrained Problems Using a Digital Annealer, *Frontiers in Physics*, Vol. 7, No. 48, pp. 1–14 (2019).
- [5] Yamaoka, M., Yoshimura, C., Hayashi, M., Okuyama, T., Aoki, H. and Mizuno, H.: 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).
- [6] Inagaki, T., Haribara, Y., Igarashi, K., Sonobe, T., Tamate, S., Honjo, T., Marandi, A., McMahon, P. L., Umeki, T., Enbutsu, K. and et al.: A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems, *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 603–606 (2016).
- [7] Yoshimura, C., Hayashi, M., Okuyama, T. and Yamaoka, M.: Implementation and evaluation of FPGA-based annealing processor for Ising model by use of resource sharing, *International Journal of Networking and Computing*, Vol. 7, No. 2, pp. 154–172 (2017).
- [8] Goto, H., Tatsumura, K. and Dixon, A. R.: Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems, *Science Advances*, Vol. 5, No. 4, pp. 1–9 (online), DOI: 10.1126/sciadv.aav2372 (2019).
- [9] Ising, E.: Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik*, Vol. 31, No. 1, pp. 253–258 (1925).
- [10] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems,

- Frontiers in Physics*, Vol. 2, No. 5, pp. 1–15 (2014).
- [11] Glover, F., Kochenberger, G. and Du, Y.: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models, *arXiv preprint arXiv:1811.11538*, pp. 1–46 (2018).
 - [12] 田中宗, 棚橋耕太郎, 本橋智光, 高柳慎一: 量子アニーリングの基礎と応用事例の現状, *低温工学*, Vol. 53, No. 5, pp. 287–294 (2018).
 - [13] 中野秀男, 中西義郎: 組合せ最適化問題に対する Simulated Annealing 法, *オペレーションズ・リサーチ*, Vol. 31, No. 1, pp. 43–48 (1986).
 - [14] 重弘裕二, 長尾明, 増田達也: Simulated Annealing 法における解空間の視覚化, *電気学会論文誌. C*, Vol. 120, No. 5, pp. 757–764 (2000).
 - [15] Ushijima-Mwesigwa, H., Negre, C. F. and Mniszewski, S. M.: Graph Partitioning using Quantum Annealing on the D-Wave System, *arXiv e-prints*, pp. arXiv-1705 (2017).
 - [16] Johnson, M. W., Amin, M. H., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A. J., Johansson, J., Bunyk, P. et al.: Quantum annealing with manufactured spins, *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198 (2011).
 - [17] Kadowaki, T. and Nishimori, H.: Quantum annealing in the transverse Ising model, *Physical Review E*, Vol. 58, No. 5, p. 5355 (1998).
 - [18] 宇都宮聖子: 量子コンピュータの新潮流: 量子アニーリングと D-Wave, *人工知能*, Vol. 29, No. 2, pp. 190–194 (2014).
 - [19] 大関真之, 西森秀稔: 量子アニーリング, *日本物理学会誌*, Vol. 66, No. 4, pp. 252–258 (2011).