

イジングマシンによる制約付きグラフ彩色問題の 彩色数最小化手法

川上 蒼馬¹ 武笠 陽介² 鮑 思雅² 巴 徳瑪³ 新井 淳也³ 八木 哲志³ 寺本 純司³ 戸川 望²

概要: イジングマシンは、イジングモデルあるいは QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) の基底状態を探索することで、効率的に組合せ最適化問題の準最適解を求めることができる。グラフ彩色問題は、組合せ最適化問題の一つで、辺で接続された任意の 2 頂点と同じ色にならないように、グラフのすべての頂点に色を割り当てる問題である。グラフ彩色問題をイジングモデルあるいは QUBO にマッピングする手法が提案されているが、彩色数の最小化は考慮されていない。また実問題に応用するための付加制約を含めた手法も知られていない。本稿では、彩色数の最小化および付加制約を考慮したグラフ彩色問題を QUBO にマッピングする手法を提案する。まずスピン数の増加を抑えた上で、彩色数を最小化する目的関数を導入する。さらに、付加制約として指定した頂点を指定した色で塗る制約および特定の色の使用回数を制限する制約を導入する。このとき、理論的に QUBO が基底状態をとると、制約を満足した上で目的関数が最小化される。イジングマシン実機を用いた実験の結果、付加制約を考慮しないとき、既存手法と比較して彩色数が平均で 75.1%削減された。また、付加制約を考慮した場合、すべての制約を満たす解を得ることを確認した。

1. はじめに

組合せ最適化問題は、離散多変数関数を最小化または最大化する変数の値を探索する問題である。組合せ最適化問題は、変数の個数が増えるにしたがって、組合せの数が指数関数的に増加する。NP 困難な組合せ最適化問題を多項式時間で解くアルゴリズムは発見されておらず、ノイマン型コンピュータでは最適解の探索が難しいため、実用上はヒューリスティックな手法によって現実的な計算時間で準最適解を求めることが望ましい [1]。

イジングマシン [2], [3], [4], [5], [6] は、イジングモデル [7] あるいはこれと等価な Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) モデルの基底状態を探索することで、組合せ最適化問題を解法するものである。組合せ最適化問題をイジングモデルや QUBO にマッピングすることで、イジングマシンは効率的に組合せ最適化問題を解くことができる。

組合せ最適化問題の一つに、グラフ彩色問題がある。グラフ彩色とは、ある制約条件のもとでグラフの要素に色を割り当てることであり、例として頂点彩色問題や辺彩色問題、面彩色問題がある。中でも頂点彩色問題とは、辺で接

続された任意の 2 頂点と同じ色にならないように、グラフのすべての頂点に色を割り当てることである。頂点彩色における最小彩色数を求める問題は NP 困難である [8]。グラフ彩色問題に対して、特定の頂点を指定した色で塗る制約や色の使用回数を制限する制約などの付加的な制約を課すことによって (制約付きグラフ彩色問題と呼ぶ)、さまざまな現実問題に応用することができる。例えば、スケジューリングや周波数の割り当てに応用できる [9]。

グラフ彩色問題はこれまで [10], [11] など、さまざまな発見的手法が提案されており、さらにイジングマシンを用いてグラフ彩色問題を解法する手法としても [12] が知られている。[12] では、グラフ彩色問題をイジングモデルあるいは QUBO にマッピングする手法が提案されているが、実現可能な頂点彩色をイジングモデルあるいは QUBO にマッピングするのみで、色数の最小化はなされていない。加えて、指定した頂点を指定した色で塗る制約や特定の色の使用回数を制限する制約など、彩色問題の付加制約をイジングモデルあるいは QUBO にマッピングする手法は知られていない。

本稿では、制約付きグラフ彩色問題をイジングマシンによって効率良く解法する手法を提案する。頂点彩色を実問題に応用するための付加制約として、指定した頂点を指定した色で塗る制約と、特定の色の使用回数を制限する制約

¹ 早稲田大学基幹理工学部情報通信学科

² 早稲田大学大学院基幹理工学部研究科情報理工・情報通信専攻

³ 日本電信電話株式会社 NTT サービスイノベーション総合研究所

を導入する。2つの付加制約を考慮し、なるべく少ない彩色数で頂点彩色する問題として、制約付きグラフ彩色問題を定義し、制約付きグラフ彩色問題を QUBO にマッピングする手法を提案する。また、QUBO の値が最小ならば、制約付きグラフ彩色問題の最適解が得られることを理論的に証明する。

本稿の実験では、イジングマシンを用いて制約付きグラフ彩色問題を解き、提案手法を用いることで制約付きグラフ彩色問題の解が得られることを示す。また、付加制約を考慮しない頂点彩色を対象として、既存手法との比較を行い、提案手法では彩色数が削減されることを示す。

本稿の貢献は以下の3点である。

- (1) 制約付きグラフ彩色問題を定義し、制約付きグラフ彩色問題を QUBO モデルにマッピングする手法を提案した。
- (2) 提案した QUBO が最小エネルギーをとるとき、制約付きグラフ彩色問題の最適解が得られることを証明した。
- (3) 実イジングマシンを用いた評価により、従来手法と比較して彩色数が 75.1% 減少し、また付加制約を考慮した場合すべての制約を満たす解を得ることを確認した。

本稿の構成を以下に示す。2章で、制約付きグラフ彩色問題を定義する。3章で、イジングマシンによる制約付きグラフ彩色問題の解法を提案する。4章で、イジングマシンを用いた実験の結果を説明する。5章で、本稿をまとめる。

2. 制約付きグラフ彩色問題

V を頂点の集合、 E を辺の集合とし、グラフ $G = (V, E)$ を考える。頂点彩色とは、以下に示す2つの制約を満たすように、 G のすべての頂点に色を割り当てることである。

- (1) 1つの頂点に割り当てる色は1つである。
- (2) 隣接する頂点の色は異なる色である。

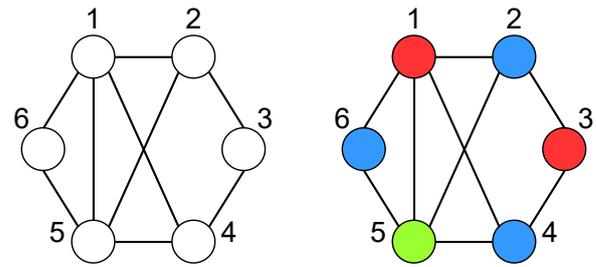
制約 (1) を重複彩色禁止制約、制約 (2) を隣接頂点異色制約と呼ぶ。また、本稿では新たに以下に示す2つの付加制約を導入する。

- (3) 特定の頂点は指定した色で彩色する。
- (4) 特定の色は指定した回数以下しか使用しない。

制約 (3) を彩色指定制約、制約 (4) を色数制限制約と呼ぶ。このとき、制約付きグラフ彩色問題を以下のように定義する。

定義 1. 制約付きグラフ彩色問題とは、グラフ $G = (V, E)$ と、特定の頂点を特定の色で彩色する場合、頂点と色の組の集合、さらに特定の色について使用可能な回数制限が与えられたときに、重複彩色禁止制約、隣接頂点異色制約、彩色指定制約、色数制限制約の4つの制約を満足した上で、最小の彩色数で彩色する問題である。

制約付きグラフ彩色問題は、ラウンドロビンスケジューリングや航空機スケジューリング、タスク割り当てなどの



(a) グラフ $G = (V, E)$. (b) 制約付きグラフ彩色問題の解.

図 1: 制約付きグラフ彩色問題の例.

スケジューリング問題に応用できる [13]. また、制約付きグラフ彩色問題は、周波数割り当てにも応用できる [14]. 例えばラジオ局の周波数割り当ては、ラジオ局を頂点とし、同じ周波数を割り当てられないラジオ局を辺で接続したグラフを対象とした制約付きグラフ彩色問題に置き換えられる。

例 1. 図 1(a) のようにグラフ $G = (V, E)$ が与えられたとする。彩色指定制約として、頂点 1 を赤色で塗る制約、色数制限制約として、緑色の使用回数を 1 回以下とする制約が与えられたとする。このとき、制約付きグラフ彩色問題を解法すると図 1(b) のようになる。辺で接続されたすべての頂点が異なる 1 つの色で彩色され (重複彩色禁止制約、隣接頂点異色制約)、さらに頂点 1 が赤色で彩色され (彩色指定制約)、緑色の使用回数は 1 回以下である (色数制限制約)。

3. 制約付きグラフ彩色問題の提案手法

本章では、制約付きグラフ彩色問題をイジングマシンによって効率良く解法する手法を提案する。また、QUBO の値が最小ならば、制約付きグラフ彩色問題の最適解が得られることを理論的に証明する。

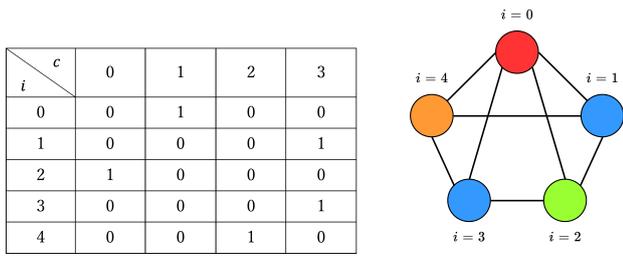
3.1 イジングモデルと QUBO

イジングモデルは磁性体の性質を表す模型である。エネルギーが最小の状態を基底状態と呼ぶ。イジングモデルのエネルギーは、式 (1) のように表される。

$$H(\sigma) = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \quad (1)$$

σ はイジング変数 $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ を表す。 σ_i はイジングスピンで、+1 あるいは -1 のいずれかの値をとる。 N はスピンの数を表し、 J_{ij} 、 h_i はそれぞれ相互作用、局所磁場を表す。エネルギー $H(\sigma)$ を最小にする σ を求めることで基底状態が求まる。

QUBO は、式 (2) によって表される。



(a) バイナリ変数 $q_{i,c}$ の値の例. (b) グラフの例.

図 2: バイナリ変数 $q_{i,c}$ で表されるグラフ彩色問題の解の例

$$H(\mathbf{q}) = \sum_{i < j} J_{ij} q_i q_j + \sum_{i=1}^N h_i q_i \quad (2)$$

\mathbf{q} はバイナリ変数 $\mathbf{q} = \{q_1, q_2, \dots, q_N\}$ を表す. q_i は, 0 あるいは 1 のいずれかの値をとる. 式 (3) に示す変数変換を行い, $J_{i,j}$ ならびに h_i の値を修正することで, QUBO とイジングモデルは相互に変換できるため, QUBO とイジングモデルは等価である.

$$q_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (3)$$

式 (1) あるいは式 (2) は, エネルギー関数やハミルトニアンと呼ばれる.

3.2 QUBO マッピング

制約付きグラフ彩色問題を QUBO により定式化するために, 縦方向を頂点 $i \in V$ とし, 横方向を色 c とした $N \times C$ の表を作り, 各値をバイナリ変数 $q_{i,c}$ で表す. N はグラフ G の頂点数を表し, C は色数を表す. バイナリ変数 $q_{i,c}$ を式 (4) のように定義する.

$$q_{i,c} = \begin{cases} 1 & (\text{頂点 } i \text{ を色 } c \text{ で塗る}) \\ 0 & (\text{頂点 } i \text{ を色 } c \text{ で塗らない}) \end{cases} \quad (4)$$

バイナリ変数 $q_{i,c}$ を用いて表される制約付きグラフ彩色問題の解の例を図 2 に示す. 図 2(a) のように各変数の値が決定したとき, 図 2(b) のように, 頂点 0, 頂点 1, 頂点 2, 頂点 3, 頂点 4 にそれぞれ色 1, 色 3, 色 0, 色 3, 色 2 を割り当てる.

制約付きグラフ彩色問題をイジングマシンによって解くために, イジングモデルや QUBO で表現する必要がある. 以下に, 制約付きグラフ彩色問題を QUBO で表す方法を提案する.

3.2.1 重複彩色禁止制約

重複彩色禁止制約は, 1 つの頂点に割り当てる色は 1 つであるという制約で, 式 (5) のように定式化できる.

$$\sum_{c=0}^{C-1} q_{i,c} = 1 \quad (i = 0, 1, \dots, N-1) \quad (5)$$

式 (5) が成り立つとき最小値 0 をとる制約項として, H_1

を以下の式 (6) で定義する.

$$H_1 = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\sum_{c=0}^{C-1} q_{i,c} - 1 \right)^2 \quad (6)$$

3.2.2 隣接頂点異色制約

隣接頂点異色制約は, 隣接する頂点の色は異なる色であるという制約で, 式 (7) のように定式化できる.

$$\sum_{(i,j) \in E} \sum_{c=0}^{C-1} q_{i,c} q_{j,c} = 0 \quad (7)$$

式 (7) が成り立つとき最小値 0 をとる制約項として, H_2 を以下の式 (8) で定義する.

$$H_2 = \sum_{(i,j) \in E} \sum_{c=0}^{C-1} q_{i,c} q_{j,c} \quad (8)$$

3.2.3 彩色指定制約

彩色指定制約を定式化するために, 彩色が指定された頂点と色の組を表す集合を A と定義する. いずれの頂点にもあらかじめ色を割り当てないとき, $A = \emptyset$ とする. 頂点 i に色 c を割り当てるとき, (i, c) を A の要素とする. このとき, 彩色指定制約は, 式 (9) のように定式化できる.

$$\forall (i, c) \in A, q_{i,c} = 1 \quad (9)$$

式 (9) が成り立つとき最小値 0 をとる制約項として, H_3 を以下の式 (10) で定義する.

$$H_3 = \sum_{(i,c) \in A} (1 - q_{i,c}) \quad (10)$$

3.2.4 色数制限制約

色数制限制約を定式化するために, 色数制限制約の対象となる色の集合を B と定義する. いずれの色にも使用可能回数を指定しないとき, $B = \emptyset$ とする. 色 c の使用可能回数を l_c とするとき, c を B の要素とする. 色数制限制約は, 式 (11) のように定式化できる.

$$\forall c \in B, \sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} \leq l_c \quad (11)$$

ここで QUBO は, 式 (11) のような不等式制約をそのまま表現することができない. そのため式 (11) を等式制約に変換する. まず補助バイナリ変数 $y_{c,n} \in \{0, 1\}$ を導入する. c は B の要素, n は $0 \leq n \leq l_c - 1$ を満たす整数である. 式 (11) が成り立つとき, 式 (12) を満たすような適当な変数 $y_{c,n}$ が存在する.

$$\forall c \in B, \sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} - \sum_{n=0}^{l_c-1} y_{c,n} = 0 \quad (12)$$

式 (12) が成り立つとき最小値 0 をとる制約項として, H_4 を以下の式 (13) で定義する.

$$H_4 = \sum_{c \in B} \left(\sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} - \sum_{n=0}^{l_c-1} y_{c,n} \right)^2 \quad (13)$$

3.2.5 目的関数

目的関数 H_{obj} を提案する. いま, m は C 個の色のうち, 彩色に使用しない色の個数とする. このとき, 目的関数 H_{obj} は以下のように記述できる.

$$H_{\text{obj}} = -m \quad (14)$$

H_{obj} が最小となるとき, 彩色に使用しない色の個数が最大となるため, 彩色数は最小となる. m はバイナリ変数 $q_{i,c}$ を用いて次のように表される.

$$m = \sum_{c=0}^{C-1} \prod_{i=0}^{N-1} (1 - q_{i,c}) \quad (15)$$

例えば, バイナリ変数 $q_{i,c}$ が図 3(a) のように与えられたとする. ここで, $(1 - q_{i,c})$ の値をとり, 縦方向に積をとると, カラムごとに図 3(b) のような値を得ることになる. これらの値を加えると, 彩色に使用しない色の個数が求められる.

ところが式 (15) は, 展開して整理すると $q_{i,c}$ の N 次式となる. 式 (2) に表されるように QUBO は二次形式となるため, 式 (15) は, そのままでは QUBO とならない. そこで, 以下の手順により, 式 (15) を二次形式に変換することを提案する.

一般に, k 個のバイナリ変数 b_i ($1 \leq i \leq k$) の積は, 係数が負のとき, 式 (16) のように変形できる [15], [16].

$$-b_1 b_2 \dots b_k = \min_{x \in \{0,1\}} \left(\left(k - 1 - \sum_{i=1}^k b_i \right) x \right) \quad (16)$$

ここで x は補助バイナリ変数である. 式 (16) の左辺の値は, x が 0 あるいは 1 の値のいずれかをとるとき, 右辺の値を小さくする方と一致する.

そこで, C 個の補助バイナリ変数 x_c ($1 \leq c \leq C$) を用意し, 以下のように式 (15) を変形する.

$$\begin{aligned} -m &= \sum_{c=0}^{C-1} \left(- \prod_{i=0}^{N-1} (1 - q_{i,c}) \right) \\ &= \sum_{c=0}^{C-1} \min_{x_c} \left(\left(N - 1 - \sum_{i=0}^{N-1} (1 - q_{i,c}) \right) x_c \right) \\ &= \sum_{c=0}^{C-1} \min_{x_c} \left((N - 1) x_c - \sum_{i=0}^{N-1} x_c (1 - q_{i,c}) \right) \\ &= \sum_{c=0}^{C-1} \min_{x_c} \left(x_c \left(\sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} - 1 \right) \right) \end{aligned} \quad (17)$$

式 (14) を最小化することは, 補助バイナリ変数を含めて, 式 (17) の右辺を最小化することと等価である. 式 (17) より, 式 (14) に示した目的関数 H_{obj} は, バイナリ変数 $q_{i,c}$ および補助バイナリ変数 x_c を用いて, 式 (18) のような x_c と $q_{i,c}$ の二次形式に変換できる.

$$H_{\text{obj}} = \sum_{c=0}^{C-1} x_c \left(\sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} - 1 \right) \quad (18)$$

$i \backslash c$	0	1	2
0	1	0	0
1	1	0	0
2	0	1	0
3	1	0	0

$i \backslash c$	0	1	2
0	0	1	1
1	0	1	1
2	1	0	1
3	0	1	1
各列の積	0	0	1

(a) バイナリ変数 $q_{i,c}$ の値の例. (b) 図 3(a) における $(1 - q_{i,c})$ の値と各カラムの積.

図 3: 使用しない色の個数の定式化の例.

3.2.6 エネルギー関数

エネルギー関数 H を式 (19) のように定義する. $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ はハイパーパラメータであり, 正の定数である.

$$H = H_{\text{obj}} + \alpha H_1 + \beta H_2 + \gamma H_3 + \delta H_4 \quad (19)$$

イジングマシンによって, H が最小となるような NC 個の変数 $q_{i,c}$, C 個の変数 x_c , $\sum l_c$ 個の変数 $y_{c,n}$ の組を探索することで, 制約付きグラフ彩色問題の解が得られる. このとき, 必要なバイナリ変数数は, $(N + 1)C + \sum l_c$ 個である.

3.3 理論的最適性

本節では, 式 (19) が特定の条件を満足するとき, 制約付きグラフ彩色問題の最適解を与えることを示す.

命題 1. $H_1 = 0$ ならば制約付きグラフ彩色問題の解は重複彩色禁止制約を満たす.

証明. 式 (6) より, $H_1 = 0$ のとき, $0 \leq i \leq N - 1$ を満たす任意の整数 i について, 式 (20) が成り立つ.

$$\sum_{c=0}^{C-1} q_{i,c} - 1 = 0 \quad (20)$$

式 (20) より, 任意の i について, $q_{i,0}, q_{i,1}, \dots, q_{i,C-1}$ の C 個のバイナリ変数のうち, 値が 1 となるのはただ 1 つである. 式 (4) より, 全ての頂点に割り当てられる色はただ 1 つであり, 重複彩色禁止制約を満たす. \square

命題 2. $H_1 = 0$ のとき, $H_2 = 0$ ならば制約付きグラフ彩色問題の解は隣接頂点異色制約を満たす.

証明. 式 (8) より, $H_2 = 0$ のとき, $0 \leq c \leq C - 1$ を満たす任意の整数 c について, 式 (21) が成り立つ.

$$\forall (i, j) \in E, q_{i,c} = 0 \vee q_{j,c} = 0 \quad (21)$$

式 (21) より, 辺で接続された任意の 2 頂点 i, j は, 同じ色で彩色されない. 命題 1 より, $H_1 = 0$ ならば任意の頂点に割り当てられる色は 1 つなので, 辺で接続された任意の 2 頂点 i, j は異なる色で彩色され, 隣接頂点異色制約を満たす. \square

命題 3. $H_3 = 0$ ならば制約付きグラフ彩色問題の解は彩

色指定制約を満たす。

証明. 式 (10) より, $H_3 = 0$ のとき, 式 (22) が成り立つ。

$$\forall (i, c) \in A, q_{i,c} = 1 \quad (22)$$

式 (22) より, 集合 A の任意の要素 (i, c) について, 頂点 i に色 c が割り当てられているので, 彩色指定制約を満たす。□

命題 4. $H_4 = 0$ ならば制約付きグラフ彩色問題の解は色数制限制約を満たす。

証明. 式 (13) より, $H_4 = 0$ のとき, 式 (23) が成り立つ。

$$\forall c \in B, \sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} = \sum_{n=0}^{l_c-1} y_{c,n} \quad (23)$$

式 (23) の右辺は, l_c 個のバイナリ変数の和なので, 式 (24) が成り立つ。

$$\forall c \in B, 0 \leq \sum_{n=0}^{l_c-1} y_{c,n} \leq l_c \quad (24)$$

式 (23), 式 (24) より, 式 (25) が成り立つ。

$$\forall c \in B, 0 \leq \sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} \leq l_c \quad (25)$$

式 (25) より, 集合 B に含まれる任意の色 c について, 使用回数が l_c 回以下なので, 色数制限制約を満たす。□

命題 5. H_{obj} が最小ならば, 彩色数は最小である。

証明. f_c を次のように定義する。

$$f_c = x_c \left(\sum_{i=0}^{N-1} q_{i,c} - 1 \right) \quad (26)$$

式 (18), 式 (26) より, 目的関数 H_{obj} は次のように表される。

$$H_{\text{obj}} = \sum_{c=0}^{C-1} f_c \quad (27)$$

式 (27) より, H_{obj} が最小のとき, $0 \leq c \leq C-1$ を満たす任意の整数 c について, f_c が最小となる。また, $\min_{x_c \in \{0,1\}} f_c = -1$ を満たす整数 c の個数が最大となる。

$\sum_i q_{i,c} = 0$ のとき, $\sum_i q_{i,c} - 1 < 0$ なので, f_c は $x_c = 1$ のとき最小となり, 最小値は $f_c = -1$ である。

一方で, $\sum_i q_{i,c} \geq 1$ のとき, $\sum_i q_{i,c} - 1 \geq 0$ なので, 式 (26) は $x_c = 0$ のとき最小となり, 最小値は $f_c = 0$ である。

逆に, $\min_{x_c \in \{0,1\}} f_c = -1$ ならば, $\sum_i q_{i,c} = 0$ なので, $0 \leq i \leq N$ を満たす任意の整数 i について, $q_{i,c} = 0$ が成り立ち, 色 c は彩色に使用されていない。 $\min_{x_c \in \{0,1\}} f_c = 0$ ならば, $\sum_i q_{i,c} \geq 1$ なので, $q_{i,c} = 1$ なる $0 \leq i \leq N$ を満たす整数 i が存在し, 色 c は彩色に使用されている。

$\min_{x_c \in \{0,1\}} f_c = -1$ を満たす整数 c の個数が最大であるとき, 彩色に使用されていない色の個数が最大なので, 彩色数は最小となる。□

命題 1~命題 5 のもと, 定理 1 が成立する。

定理 1. $\alpha > C, \beta > C, \gamma > C, \delta > C$ のとき, H が最小かつ 0 以下ならば制約条件を満たし彩色数が最小である, すなわち, 制約付きグラフ彩色問題の最適解を与える。

証明. グラフの頂点数を N , 色数を C とする。式 (14) より, H_{obj} が取りうる値の範囲は

$$-C \leq H_{\text{obj}} \leq 0 \quad (28)$$

である。 $H_1 \geq 1$ または $H_2 \geq 1$ または $H_3 \geq 1$ または $H_4 \geq 1$ のとき, $\alpha > C, \beta > C, \gamma > C, \delta > C$ より,

$$\alpha H_1 + \beta H_2 + \gamma H_3 + \delta H_4 > C \quad (29)$$

が成り立つ。式 (19), 式 (28), 式 (29) より,

$$H > 0 \quad (30)$$

が成り立つ。

$H_1 \geq 1$ または $H_2 \geq 1$ または $H_3 \geq 1$ または $H_4 \geq 1$ のとき, 式 (29) が成り立つので, 対偶より, $H \leq 0$ ならば $H_1 = H_2 = H_3 = H_4 = 0$ である。命題 1, 命題 2, 命題 3, 命題 4, 命題 5 より, H が最小かつ 0 以下ならば, 4 つの制約条件をすべて満たし彩色数が最小である。□

4. 評価実験

本稿では, イジングマシンとして Amplify Annealing Engine [17] を用いて提案手法を評価した。本章では, ハイパーパラメータの調整結果, 既存手法との比較結果, 付加制約を考慮した彩色問題におけるイジングマシンの解を評価する。

4.1 評価方法

本実験では, 評価指標として平均彩色数 χ_{ave} と成功確率 p_{suc} を用いる。

平均彩色数は, 制約条件を満たす解における彩色数の平均である。イジングマシンを r 回実行し, r_s 回成功した, すなわち制約条件を満足したとき, 平均彩色数は式 (31) で求められる。ただし, χ_i は, 制約を満たす r_s 個の解のうち i 番目の解の彩色数である。

$$\chi_{\text{ave}} = \frac{1}{r_s} \sum_{i=1}^{r_s} \chi_i \quad (31)$$

成功確率 p_{suc} は, イジングマシンによって得たグラフ彩色問題の解が, 制約条件を満たす確率である。イジングマシンを r 回実行し, 解が制約条件を満たした回数が r_s 回のとき, 成功確率は式 (32) で求められる。

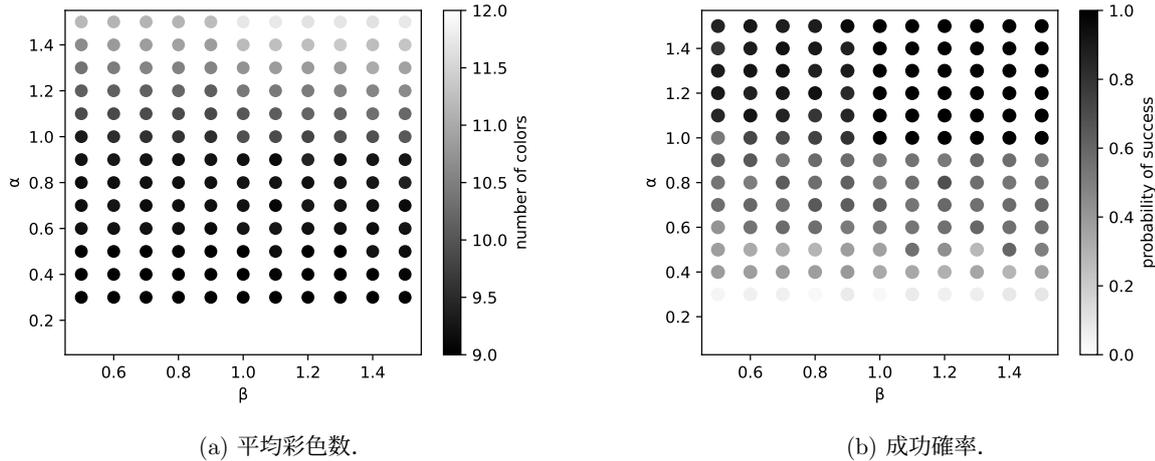


図 4: ハイパーパラメータの調整結果.

$$p_{\text{suc}} = \frac{r_s}{r} \quad (32)$$

4.2 ハイパーパラメータ調整

式 (19) に示したエネルギー関数 H のハイパーパラメータ α, β と、彩色数および成功確率の関係を調べるための実験を行った。

4.2.1 実験概要

任意の 2 頂点間に辺が存在する確率を $p = 0.5$ とし、頂点数を $N = 50$ 、色数を $C = 50$ とし、グラフを 100 個作成する。 $\delta = \epsilon = 0$ とし付加制約は考慮しない。 α, β の値をそれぞれ、 $\alpha = 0.1, 0.2, \dots, 1.5$ 、 $\beta = 0.5, 0.6, \dots, 1.5$ とし、1つのグラフにつき 165 通りの解を求め、平均彩色数と成功確率を計測した。

4.2.2 実験結果

実験結果を図 4 に示す。図 4(a) より、 α の値が小さくなるほど、平均彩色数は小さくなるのがわかる。ただし、 $\alpha \leq 0.2$ では、成功確率が $p_{\text{suc}} = 0$ であり、平均彩色数は定義不可能であった。図 4(b) より、 $\alpha \geq 1$ かつ $\beta \geq 1$ のとき、成功確率は 1 であった。 $0.1 \leq \alpha \leq 0.9$ では、 α の値が小さくなるほど、成功確率は低くなった。

成功確率が $p_{\text{suc}} = 1$ の範囲では、 $\alpha = \beta = 1$ のとき平均彩色数が最小となった。成功確率が $p_{\text{suc}} > 0$ の範囲では、 $\alpha = 0.4$ 、 $\beta = 0.9$ のとき平均彩色数が最小となった。

3.3 節で証明した定理 1 では、ハイパーパラメータの値の範囲が $\alpha > C, \beta > C$ であるが、実験では $\alpha \geq 1, \beta \geq 1$ と、より小さな値で成功確率が $p_{\text{suc}} = 1$ となった。これは、 $\alpha \geq 1, \beta \geq 1$ ならば H_{obj} の係数が制約項の係数を超えず、色数の最小化が制約よりも優先されないからであると考えられる。

4.3 既存手法との比較

本節では、提案手法を既存手法と比較する。既存手法と

して、文献 [12] の QUBO 定式化を用いた。文献 [12] の QUBO 定式化は、3.2.5 項で議論した色数の最小化は考慮されていないことに注意する。

4.3.1 実験概要

任意の 2 頂点間に辺が存在する確率を $p = 0.5$ とし、頂点数を $N = 20, 40, \dots, 200$ 、色数を $C = N$ とし、それぞれグラフを 50 個作成する。 $\delta = \epsilon = 0$ とし付加制約は考慮しない。 $\alpha = \beta = 1$ としたときの既存手法、提案手法、および $\alpha = 0.4$ 、 $\beta = 0.9$ としたときの提案手法の 3 通りで解を求め、それぞれ平均彩色数と成功確率を測定し、比較する。

4.3.2 実験結果

実験結果を図 5 に示す。図 5(a) より、 $\alpha = \beta = 1$ としたとき、提案手法を用いることで、既存手法と比較して平均で 68.2% 彩色数が削減された。また、 $\alpha = 0.4$ 、 $\beta = 0.9$ とすると、既存手法と比較して平均で 75.1% 彩色数が削減された。図 5(b) より、既存手法および、 $\alpha = \beta = 1$ での提案手法の成功確率はつねに 1 であった。また、 $\alpha = 0.4$ 、 $\beta = 0.9$ での提案手法の成功確率はつねに 1 未満であり、グラフの頂点数が大きくなるにしたがって、成功確率が高くなる傾向にあった。

4.4 付加制約の検証

2 章に示した 2 つの付加制約を考慮してグラフ彩色問題を解く実験を行った。

4.4.1 実験概要

集合 A と集合 B の要素数をいずれも n とする。 N 個の頂点から異なる n 個の頂点を任意に選択し、 C 個の色から異なる n 個の色を任意に選択する。選択した n 個の頂点と色の組 (i, c) を A の要素とする。また、色を任意に n 個選択し、色と使用回数の組 (c, l_c) を n 個作成して B の要素とする。 l_c は、 $1 \leq l_c \leq 3$ を満たす整数からランダムに決

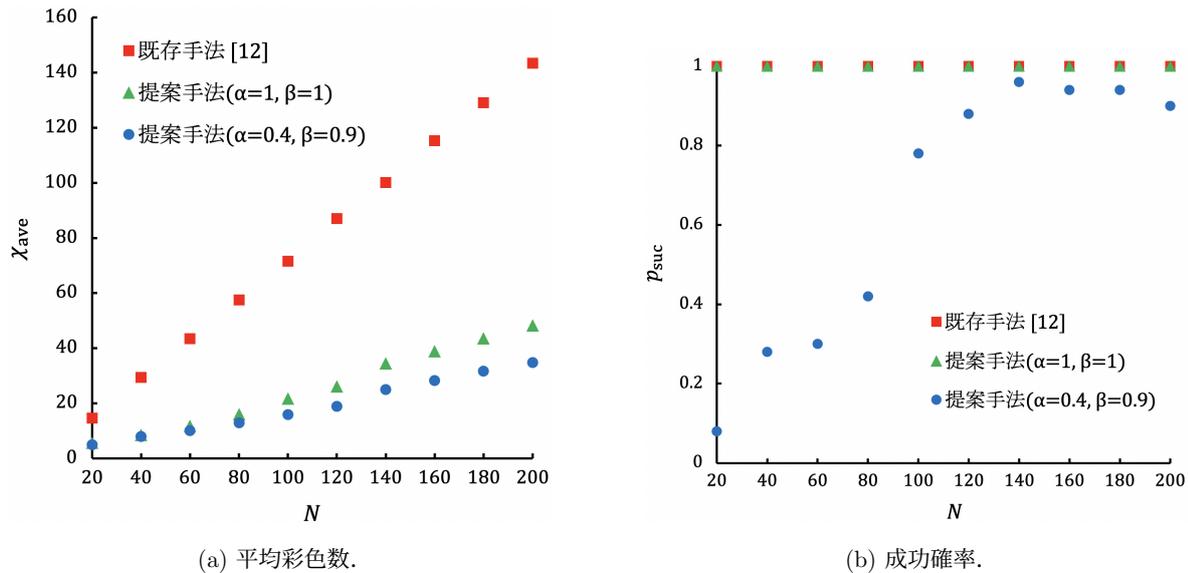


図 5: 既存手法 [12] と提案手法の比較実験の結果.

定する. n の値を $n = 5, 10, 15, \dots, 30$ として, 集合 A, B をそれぞれ 50 通り作成する. $N = C = 100, p = 0.5$ として, グラフを 6 個作成し, 1 つのグラフにつき 50 通りの解を求める.

$\gamma = 1.2, \delta = 1$ とし, $\alpha = \beta = 1$ としたとき, $\alpha = 0.4, \beta = 0.9$ としたときでそれぞれ平均彩色数と成功確率を測定する.

4.4.2 実験結果

実験結果を図 6 に示す. 図 6(a) より, n の値が大きくなるにしたがって, 平均彩色数は増加することがわかる. $\alpha = 0.4, \beta = 0.9$ としたときの方が, $\alpha = \beta = 1$ としたときよりもつねに平均彩色数が少なかった. 図 6(b) より, n の値が大きくなるにしたがって, 成功確率は減少する傾向にあることがわかる. また, $5 \leq n \leq 25$ では, $\alpha = \beta = 1$ としたときの方が成功確率が高かったが, $30 \leq n \leq 40$ では, $\alpha = 0.4, \beta = 0.9$ としたときの方が成功確率が高かった.

5. おわりに

本稿では, 彩色数の最小化および実問題に応用可能な付加制約を考慮した制約付きグラフ彩色問題を QUBO にマッピングする手法を提案した. 加えて, 提案した QUBO が基底状態をとるとき, 制約を満足した上で彩色数が最小化されることを理論的に証明した. 実イジングマシンを用いた実験の結果, 付加制約を考慮しないとき, 提案手法では既存手法と比較して彩色数が削減された. また, 付加制約を考慮したとき, 提案手法によってすべての制約を満たす解が得られた.

今後の課題として, 実験結果に則したハイパーパラメータの条件下で最適性の評価が挙げられる. また, 付加制約を考慮した問題の解の精度を上げるために, ハイパーパラメータ γ, δ の調整が必要である.

参考文献

- [1] Kwok, J. and Pudenz, K.: Graph Coloring with Quantum Annealing, *Frontiers in Physics*, Vol. 2, No. 5, pp. 1–15 (2020).
- [2] 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).
- [3] 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 (2015).
- [4] T. Inagaki, Y. Haribara, K. I. T. S. S. T. and et al.: A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems, *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 603–606 (2016).
- [5] Tsukamoto, S., Takatsu, M., Matsubara, S. and Tamura, H.: An accelerator architecture for combinatorial optimization problems, *Fujitsu Sci. Tech. J.*, Vol. 53, No. 5, pp. 8–13 (2017).
- [6] Goto, H., Tatsumura, K. and Dixon, A. R.: Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems, *Science advances*, Vol. 5, No. 4, p. eaav2372 (2019).
- [7] E. Ising: Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik*, Vol. 31, No. 1, pp. 253–258 (1925).
- [8] Sánchez-Arroyo, A.: Determining the total colouring number is NP-hard, *Discrete Mathematics*, Vol. 78, No. 3, pp. 315–319 (1989).
- [9] Ahmed, S.: Applications of Graph Coloring in Modern Computer Science, *IJCIT*, Vol. 3, No. 2 (2012).
- [10] Welsh, D. J. and Powell, M. B.: An upper bound for the chromatic number of a graph and its application to timetabling problems, *The Computer Journal*, Vol. 10, No. 1, pp. 85–86 (1967).
- [11] Hertz, A. and de Werra, D.: Using tabu search techniques for graph coloring, *Computing*, Vol. 39, No. 4, pp. 345–351 (1987).
- [12] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems,

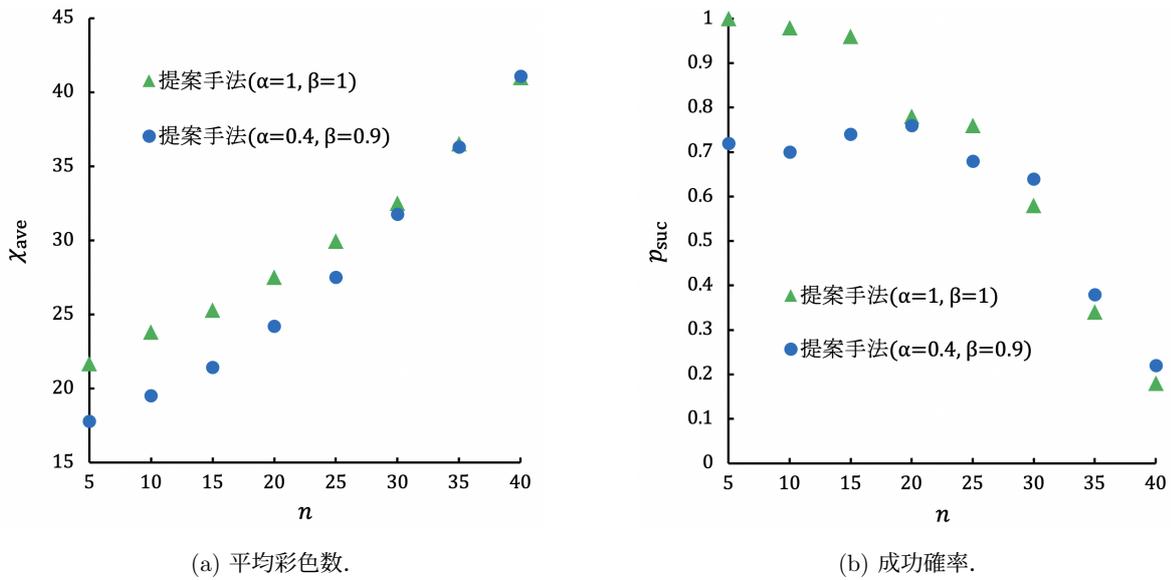


図 6: 付加制約に関する実験結果.

Frontiers in Physics, Vol. 2, No. 5, pp. 1–15 (2014).

- [13] Marx, D.: Graph colouring problems and their applications in scheduling, *Periodica Polytechnica Electrical Engineering (Archives)*, Vol. 48, No. 1-2, pp. 11–16 (2004).
- [14] Maan, V. and Purohit, G.: A distributed approach for frequency allocation using graph coloring in mobile networks, *International Journal of Computer Applications*, Vol. 58, No. 6 (2012).
- [15] Kolmogorov, V. and Zabini, R.: What energy functions can be minimized via graph cuts?, *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, Vol. 26, No. 2, pp. 147–159 (2004).
- [16] Freedman, D. and Drineas, P.: What energy functions can be minimized via graph cuts?, *IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR' 05)*, Vol. 2, pp. 939–946 (2005).
- [17] Fixstars Corporation: Fixstars Amplify AE (2020). <https://amplify.fixstars.com/en/engine>.