

SA ベースのイジングマシンにより巡回セールスマン問題を高速解法するための多種軽量係数試行法

竹原 康太^{1,a)} 於久 太祐² 松田 佳希³ 田中 宗^{4,5} 戸川 望¹

概要：イジングマシンは組合せ最適化問題を高速に解法し準最適解を得るためのハードウェアとして注目されている。組合せ最適化問題の中でも、多地点を最短経路で巡回する経路を探索する巡回セールスマン問題は NP 困難な問題であり、トラックの配送経路の最適化などに社会的に重要な最適化問題の基礎として知られている。本稿ではシミュレーテッドアニーリング (SA) ベースのイジングマシンにて巡回セールスマン問題を高速に解法する手法を提案する。SA ベースのイジングマシンで巡回セールスマン問題を解法するには、ハミルトニアンに現れる制約重みをいかに設定するかが鍵となる。制約重みが小さいほど解空間がなめらかになり局所解を抜け出しやすくなることが期待される。しかし、制約重みが小さすぎると制約を満たす解を得られなくなる。我々は、巡回セールスマン問題では、多地点を巡回する最短経路を構成する辺について、従来手法は問題中の辺の長さの最大値に制約重みを設定するのに対し、我々は隣り合う辺の和の最大値より少し大きい値に制約重みを設定することで最適解を得る確率の向上を確認した。また制約重みを、最短経路における隣り合う辺の長さの和の最大値よりも小さい場合に設定した場合には、制約を満たす解が得られないことを理論的考察および、実験にて確認した。しかし、どの辺が最短経路に含まれるかを予め知ることは一般に困難である。そこで提案手法はまず、問題中の辺の長さの最大値から最小値の範囲で制約重みを m 種類選び、 m 種類の重みでアニーリングして得た m 個の結果のうち最良のものを採用することにする。提案手法により、予めどの辺が最短経路に含まれるかを知ることなく、適当な制約重みでアニーリングした結果を得ることができ、高速に精度の良い解を得ることが期待できる。提案手法を用いた場合と用いない場合を比較した結果、ランダムに生成した 32 地点の巡回セールスマン問題において、提案手法を用いた場合は従来手法と同程度の解を最も高速な場合で、1/1000 程度の総イテレーション数で得ることができた。

キーワード：イジングマシン、巡回セールスマン問題、組合せ最適化問題、QUBO、イジングモデル

1. はじめに

組合せ最適化問題は多数の変数に対して制約条件を満たした上で最適変数の組合せを求める問題である。また、NP 困難な組合せ最適化問題 [1] は変数の数が増加すると厳密解を求めるのに必要な計算時間が指数的に増加すると考えられており、ノイマン型コンピュータを用いて多項式時間で NP 困難な組合せ最適化問題の厳密解を求めることは難しい。NP 困難な組合せ最適化問題を解く場合、実用上は準最適解を求めることが多い。

近年、組合せ最適化問題を処理するマシンとして非ノ

イマン型の計算技術の一つであるイジングマシンが精力的に研究されている [2–6]。イジングマシンはイジングモデル [7] や Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) モデルのエネルギーが低い (安定) 状態を得るように動作するマシンである。イジングモデルは、スピンと呼ばれるミクロな要素が多数集まったときに、各スピンの働く強制力、及び 2 つのスピン間に働く相互作用によって、どのようなマクロな現象が現れるか、を表現する統計力学モデルである。スピンは +1 または -1 を取る二値変数で表現され、スピン変数の 1 次の項と 2 次の項から成る多項式で表されたモデルである。QUBO は 0 または 1 を取るバイナリ変数が複数個あり、かつ、2 次の項により定義されたエネルギー関数のモデルである。イジングモデルと QUBO は相互に変換可能である。イジングマシンを用いて組合せ最適化問題を解く場合、問題をイジングモデルまたは QUBO で表現し、イジングマシンに入力する。

¹ 早稲田大学基幹理工学部情報理工学科

² 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

³ 株式会社フィックスターズ

⁴ 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

⁵ 科学技術振興機構さきがけ

^{a)} kota.takehara@togawa.cs.waseda.ac.jp

典型的な組合せ最適化問題をイジングモデルや QUBO に変換する手法 [8–10] は提案されている。イジングマシンを用いて実問題を解く際、等式制約や不等式制約をペナルティ関数の形で導入する必要があり、その係数値（制約重み）の選び方によって計算精度が変わる。そのため、制約条件がある組合せ最適化問題について、精度の良い解を高速に得るための工夫を行う必要がある。本論文では組合せ最適化問題の一つである巡回セールスマン問題 (TSP) を例題として、制約条件のある組合せ最適化問題におけるイジングマシンによる高効率解法を提案する。

TSP は、複数の地点と各地点間の移動距離が与えられたとき、各地点を一度だけ通るという制約条件を満たした上で総移動距離が最小となる巡回ルートを見つける NP 困難な問題である [1]。TSP はトラックの配送経路の最適化など社会的に重要な組合せ最適化問題の基礎として知られている。

本論文は TSP における制約重みと解精度の関係を調査し、シミュレーテッドアニーリング (SA) [11] ベースのイジングマシンにより TSP を高速解法するための多種軽量係数試行法を提案する。

本論文の貢献点は以下の 2 点である。

- QUBO で表現された TSP の制約重みと解精度の関係について示す。
- SA ベースのイジングマシンで TSP を高速解法するための多種軽量係数試行法を提案し、ランダムに生成した TSP において多種軽量係数試行法を使用することで、既存の制約重み [8] を用いたアニーリング結果と比較して総イテレーション数を、最も高速な場合で、1/1000 程度に削減することに成功した実験結果を示す。

2. イジングモデルと QUBO

イジングマシンで組合せ最適化問題を解く場合、問題をイジングモデルや QUBO で表現し、エネルギーの低い状態へ遷移させる動作を用いて準最適解を導く。イジングモデルと QUBO は相互に変換可能であるため、組合せ最適化問題をどちらかのモデルで定式化できればイジングマシンを用いて解を得られる。本章ではイジングモデルと QUBO について紹介する。

2.1 イジングモデル

イジングモデルは、スピンと呼ばれるミクロな要素が多数集まったときに、各スピンに働く強制力、及び 2 つのスピン間に働く相互作用によって、どのようなマクロな現象が現れるか、を表現する統計力学モデルである。図 1 にイジングモデルの例を示す。イジングモデルは無向グラフ $G = (V, E)$ 上に定義される。 V は頂点集合を表し、 E は頂点間の辺集合を表す。頂点 $i \in V$ にスピン σ_i がある。ス

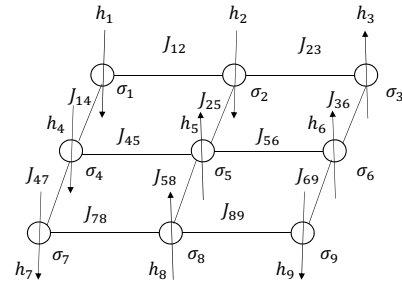


図 1: イジングモデルの例。

ピン σ_i は ± 1 のいずれかの値を取る変数である。スピン σ_i に働く局所的な磁場を h_i 、2 つのスピン σ_i と σ_j に働く相互作用の強さを J_{ij} とする。このイジングモデルのエネルギー H_{Ising} は、次の式で与えられる。

$$H_{\text{Ising}} = - \sum_{i \in V} h_i \sigma_i - \sum_{(i,j) \in E} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

ここで $J_{ij} = 0$ のとき、 σ_i と σ_j の間に相互作用が無いことを表す。

物理学によれば、エネルギーが低いほど安定な状態であることが知られている。また、最もエネルギーが低い状態を基底状態と呼ぶ。式 (1) の第一項で、外部磁場係数 h_i の値が大きいほど $\sigma_i = 1$ になりやすいことを表す。また、式 (1) の第二項で、相互作用係数 J_{ij} の値が大きいほど 2 つのスピン σ_i と σ_j は同じ向きになりやすい。

2.2 QUBO

QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) は、0 または 1 を取るバイナリ変数 x_i について、式 (2) で表されるエネルギー H_{QUBO} を最小化する問題である。

$$H_{\text{QUBO}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Q_{ij} x_i x_j \quad (2)$$

ここで、2.1 で紹介したイジングモデルと QUBO の対応を考える。式 (1) で定義されるイジングモデルにおける頂点数 $|V|$ が N のとき、以下の変換を用いることにより、イジングモデルと QUBO は互に変換可能である。

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

ただしこの変換を用いた際に、 H_{Ising} と H_{QUBO} は定数差が生じるが、この定数はスピン変数ないしはバイナリ変数に依存しないため、組合せ最適化問題の解法としては同等の問題を取り扱っていることに相当する。

3. QUBO による巡回セールスマン問題の表現 [8]

TSP は、訪れるべき地点の集合 V ($|V| = n$) と完全グラ

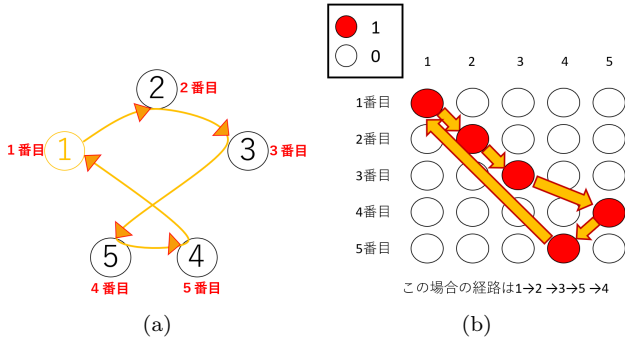


図 2: (a)5 地点の TSP の例. (b)(a) をバイナリ変数 $x_{t,i}$ を用いて表現した場合.

フを構成する重み付き無向辺の集合 E が与えられたとき、全ての地点を 1 度ずつのみ通って初期地点に帰還するという制約の下で総距離が最小となる巡回ルートを見つける問題である。

文献 [8] では、TSP を QUBO で表現する一つの方法について紹介されている。この表現方法では、 t 番目に地点 i を通過するか否かを表現するバイナリ変数 $x_{t,i}$ を導入する。 t 番目に地点 i を通過することを $x_{t,i} = 1$ として表現し、 t 番目に地点 i を通過しないことを $x_{t,i} = 0$ として表現する。図 2 に 5 地点の TSP とバイナリ変数 $x_{t,i}$ での表現例を示す。図 2 では巡回ルートは $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 5 \rightarrow 4$ である。図 2(a) は 5 都市の TSP の例である。図 2(b) 中の赤丸は巡回ルートに含まれることを表す。

以下で、文献 [8] で導入されている TSP の QUBO 表現を見ていく。

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (4)$$

$$H_0 = \sum_{t=1}^n \sum_{a=1}^n \sum_{b=1}^n d_{a,b} x_{t,a} x_{t+1,b} \quad (5)$$

$$H_1 = \alpha \sum_{t=1}^n \left(\sum_{a=1}^n x_{t,a} - 1 \right)^2 \quad (6)$$

$$H_2 = \alpha \sum_{a=1}^n \left(\sum_{t=1}^n x_{t,a} - 1 \right)^2 \quad (7)$$

ただしここで、任意の a について、 $x_{n+1,a} = x_{1,a}$ とする。これは最後の場所から最初の場所に戻る巡回を表す。 $d_{a,b}$ は地点 a から b ($a, b \in V$) への距離を表す。いま、無向辺を考えているので、任意の $a, b \in V$ について、 $d_{a,b} = d_{b,a}$ である。式 (6)、式 (7) で α は制約重みを表す正の定数とする。地点数 $|V|$ の TSP を解く場合、 $|V|^2$ のスピン数が必要である。

H の各項について説明する。

(1) H_0 : 総距離

式 (5) は巡回ルートの総距離を表す。巡回ルートの総距離が短いほど H が小さくなる。

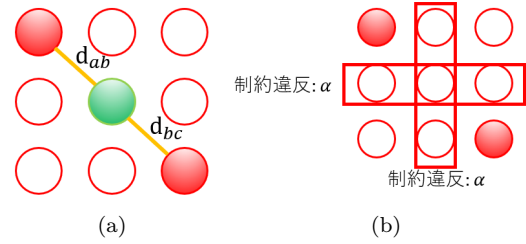


図 3: TSP の最適解から 3 都市分を切り出してきた場合. (a) 制約を満たす状態, (b) 制約を満たさない場合.

(2) H_1 : 制約項 1

式 (6) は任意の時刻に一つの地点にしか存在しない制約を表す。時刻 t で選択される地点が 1 つのときに最小値 $H_1 = 0$ になる。 α を大きくするほど制約が強くなる。

(3) H_2 : 制約項 2

式 (7) は任意の地点に一つの時刻でしか存在しない制約を表す。地点 a が選択される時刻が 1 つのときに最小値 $H_2 = 0$ になる。 α を大きくするほど制約が強くなる。

$H_1 = 0$ かつ $H_2 = 0$ を満たす場合にのみ、TSP の解として成立する。したがって、 $H_1 = 0$ かつ $H_2 = 0$ を満たした上で H_0 を最小化することで、TSP の最適解を得ることができる。また、文献 [8] では、制約重み α は問題中の辺の長さの最大値よりも大きい値にすると述べられている。

4. 巡回セールスマン問題における制約重みと解精度の関係

4.1 巡回セールスマン問題における制約重みと解精度の関係に関する考察

SA ベースのイジングマシンで巡回セールスマン問題を解法する場合、式 (6)、式 (7) 中の制約重み α が小さいほど解空間がなだらかになり局所解を抜け出しやすくなることが期待される。しかし、制約重みが小さすぎると制約を満たす解を得られなくなる。先行研究 [8] では、式 (6)、式 (7) 中の制約重み α を問題中の最長距離より大きい値に設定することで TSP の最適解と QUBO の基底状態が一致すると述べている。ここで、 α をさらに小さくすることで効率的な基底状態の探索が期待できるケースが存在する。

TSP の最適解を出発点とし、制約重み α が状態遷移に及ぼす影響を考える。TSP の最適解の一部の 3 地点を抽出する (図 3)。切り出してきた 3 地点を a, b, c とする。図 3(a) は TSP の QUBO 表現で式 (6)、式 (7) の制約を満たしている。図 3(b) では TSP の QUBO 表現で式 (6)、式 (7) の制約を違反してペナルティー 2α が課されている。図 3(a) 中の緑のスピンに注目したときのエネルギーを考える。 $2\alpha > d_{a,b} + d_{b,c}$ のとき、制約を違反するペナルティー

ここで、TSP の最適解中のある地点から伸びる 2 辺の長さの和の最大値を η とおくと、TSP の最適解と QUBO の基底状態が一致するためには $2\alpha > \eta$ である必要がある。また、制約重み α が小さいほど解空間がなだらかになり局所解を抜け出しやすくなることが期待されるため、 α が $\frac{\eta}{2} + \epsilon$ 付近のとき、解空間がなだらかになり最適解に到達しやすくなり、制約を満たす解が平均的に良くなることが期待される。ただし ϵ は問題を構成する任意の辺の長さより十分小さい値とする。

デジタルアニーラ [5] を用いて実験する. デジタルアニーラは任意の 2 スピン間に相互作用係数を設定できるイジングマシンである. スピン数は 1024 であり, 相互作用係数を 16bit, 外部磁場係数を 27bit の符号付整数を表現できる. デジタルアニーラのパラメータを以下に示す. 温度更新間隔が $interval$ のとき, $interval$ 回のイテレーション毎に温度に減衰率 T_{decay} を乗じて温度を降下する.

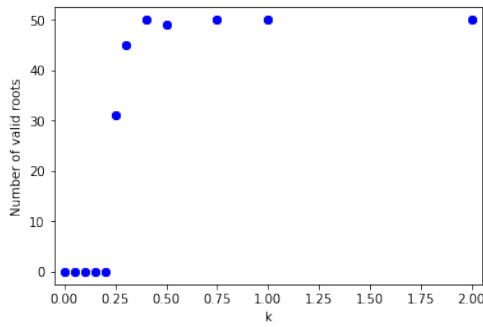
-

- 減衰率： $T_{\text{decay}} = \left(\frac{T_{\text{end}}}{T_{\text{start}}} \right)^{\left(\frac{\text{interval}}{\text{iteration}} \right)}$

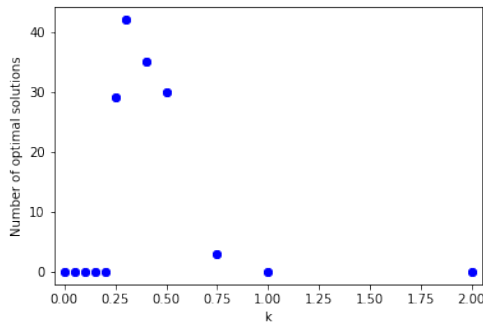
図 5(a) で $k \geq \frac{\eta}{2d_{\max}} = 0.25$ のとき, k が 0.25 に近づくほど制約を満たす解を得る確率は減少する. $k < 0.25$ のとき制約を満たす解を確認できなかった. 図 5(b) より最適解を最も得やすい α は $\frac{\eta}{2}$ に必ずしも一致しないことがわかる. 今回の実験では, 既存の制約重み [8] に一致する $k \geq 1$ のときは最適解を得られなかった. 図 5(c) より, $k \geq 0.25$ で k が 0.25 に近づくほど制約を満たす解の距離の平均値が小さくなることが分かる. $k < 0.25$ のとき制約を満たす解を確認できなかった.

そこで、制約重み α を複数種類試行し、経路の距離が最小のものを採用する戦略をとる。複数の制約重みを試すことで、最短経路を構成する辺を知ることで適当な制約重みでアニーリングした結果を得ることができ、高速に精度の良い解を得ることが期待できる。 $d_{\min}$ と $d_{\max}$ をそれぞれ、問題中の辺の長さの最小値、最大値とする。先と同様、 η を TSP の最適解中のある地点から伸びる 2 辺の長さの最大値とする。このとき、 $d_{\min} \leq \frac{\eta}{2} \leq d_{\max}$ が成り立つため、 α は $d_{\min} + \epsilon \leq \alpha \leq d_{\max} + \epsilon$ の範囲を試行すればよい。

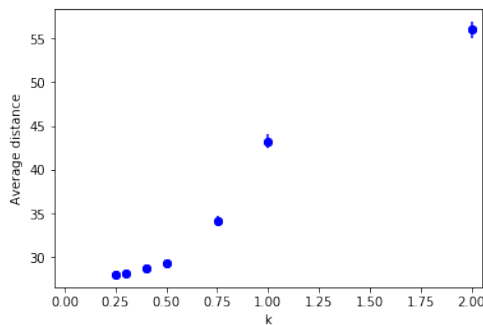
- (1) 問題を構成する辺の長さの最小値 $d_{\min}$ を求める.
- (2) 問題を構成する辺の長さを $d'_{a,b} = d_{a,b} - d_{\min} ((a,b) \in E)$ と補正する.



(a)



(b)



(c)

図 5: 図 4 の TSP をデジタルアニーラで、50 回ずつアニーリングした場合の結果. (a) 制約を満たす解の個数の k 依存性. (b) 最適解の個数の k 依存性, (c) 制約を満たす解の距離の平均値の k 依存性.

- (3) 補正後の辺の長さの最大値 $d'_{\max}$ を求める.
 - (4) $0 + \epsilon$ 以上 $d'_{\max} + \epsilon$ の m 種類の異なる α に対して独立にアニーリングする.
 - (5) 4. で得た m 個の答えのうち最良のものを答えとする.
- 手順 1-3 は辺の数に対して線形時間で実行可能である. 手順 4 の各アニーリングは独立であるため並列に実行可能である. 本論文では $m = 10, \epsilon = 0.0001$ とした. また, $\alpha_i = \frac{i}{m-1} d'_{\max} + \epsilon (0 \leq i < m, i \in \mathbb{Z})$ とし, 各 α_i でのイテレーション数は一定とした.

多種軽量係数試行法は $d_{\max}$ と $\frac{\eta}{2}$ の差 $D = d_{\max} - \frac{\eta}{2}$ に着目した手法であるため, D が大きいほど提案手法による距離の平均値の改善が見込まれ, 逆に D が小さいほど提案手法による距離の平均値の改善が見込めない.

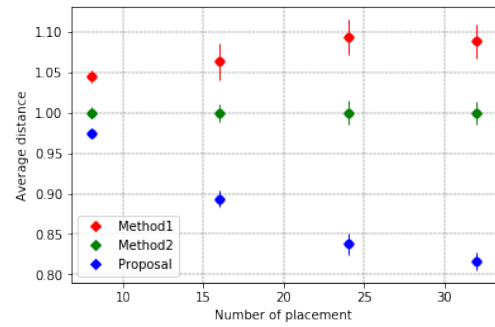


図 6: 地点数と距離の平均値の関係.

6. 評価実験

本章では 5 章で提案した多種軽量係数試行法を検証する実験の結果を示す. SA ベースのイジングマシンとしてデジタルアニーラを使用した [5].

6.1 実験方法

TSP の問題は各地点の座標 (x, y) をそれぞれ $[0, 1]$ の実数として一様乱数で発生させ, 任意の地点間にユークリッド距離を重みとする無向辺を用意する. 多種軽量係数試行法と, 既存の制約重み [8] を比較する. 表 1 に各手法のパラメータを示す. ただし表中の Method1 は既存の制約重み [8] で一度だけイテレーション数 N でアニーリングする方法を表し, Method2 は既存の制約重み [8] でイテレーション数 N/m で m 回アニーリングし, 最良の結果を採用する方法を表し, Proposal は多種軽量係数試行法を表し, m 個の異なる制約重みについて, それぞれ N/m 回のイテレーションでアニーリングした結果から最良のものを採用する方法を表す. 本実験では多種軽量係数試行法の分割数 m を 10, 微小な値 ϵ を 0.0001 と固定する.

実験で使用するデジタルアニーラのパラメータは 4 章と同様である.

6.2 地点数と距離の平均値の関係についての実験

総イテレーション数 N を 10^7 と固定し, 地点数 $|V|$ を 8, 16, 24, 32 と変化させたときの地点数と距離の平均値の関係について調査する. 各地点数で 10 個の TSP の問題を生成する. 各問題に各手法を 20 回試行したときの距離の平均値を比較する. ただし, 各手法の距離の平均値は Method2 による距離の平均値を 1 として正規化する. 本実験ではすべての手法で常に制約を満たす解を得ることができた.

図 6 に地点数と距離の平均値の関係を示す. 地点数が多いほど多種軽量係数試行法による距離の平均値の改善が確認できる. これは, 問題を構成する辺の長さの最大値 $d_{\max}$ と, 最適解中のある地点から伸びる 2 辺の長さの和の最大値 η の差が地点数の増大とともに大きくなるからであると考えられる.

表 1: 各手法のパラメータ.

手法	イテレーション数	アニーリング回数	総イテレーション数	制約重み α
Method1	N	1	N	$d_{\max} + \epsilon$ [8]
Method2	$\frac{N}{m}$	m	N	$d_{\max} + \epsilon$ [8]
Proposal	$\frac{N}{m}$	m	N	$d_{\min} + \epsilon \leq \alpha \leq d_{\max} + \epsilon$

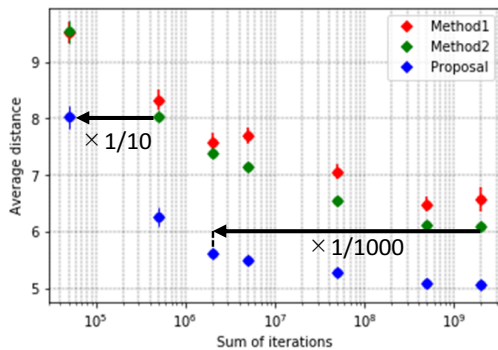


図 7: 総イテレーション数と距離の平均値の関係.

6.3 総イテレーション数と距離の平均値の関係についての実験

32 地点の TSP をランダムに生成したひとつの問題について、各手法により得た距離の平均値を調査する。 $N \leq 5 \times 10^7$ のときは各手法を 20 回試行し、 $N > 5 \times 10^7$ のときは各手法を 4 回試行した。

図 7 に総イテレーション数と距離の平均値の関係を示す。本実験ではすべての手法で常に制約を満たす解を得ることができた。Method1 と Method2 が 2×10^9 の総イテレーション数をかけて得た距離の平均値よりも低い距離の平均値を多種軽量係数試行法は 2×10^6 の総イテレーション数で達成した。また、最適解に近い解を得ようとするほど多種軽量係数試行法による総イテレーション数の削減量が增大する傾向が確認できる。

7. おわりに

本論文では、TSP における制約重みと解精度の関係についての調査結果を示した。続いて、TSP を SA ベースのイジングマシンで高速解法するための手法として多種軽量係数試行法を提案した。ランダムに生成した TSP において多種軽量係数試行法を使用することで、最も高速な場合で、総イテレーション数を 1/1000 程度に削減することに成功した。

今後の課題として、多種軽量係数試行法による係数のより適切な設定方法の検証がある。更に、今回用いた実イジングマシンとは異なる機構で動作する、量子効果を用いたイジングマシンにおいても、多種軽量係数試行法が有効であるかどうかを確認する。

謝辞 この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 委託業務の結果、得られたものである。

参考文献

- [1] Karp, R.: Reducibility among combinatorial problems, *Complexity of Computer Computations* (Miller, R. and Thatcher, J., eds.), Boston, MA: Springer, pp. 85–103 (1972).
- [2] Johnson, M., Amin, M., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A., Johansson, J., Bunyk, P., Chapple, E., Enderud, C., Hilton, J., Karimi, K., Ladizinsky, E., Ladizinsky, N., Oh, T., Perminov, I., Rich, C., Thom, M., Tolkacheva, E., Truncik, C., Uchaikin, S., Wang, J., Wilson, B. and Rose, G.: 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 (2016).
- [4] Utsunomiya, S., Takata, K. and Yamamoto, Y.: Mapping of Ising models onto injection-locked laser systems, *Opt. Express*, Vol. 19, No. 19, pp. 18091–18108 (2011).
- [5] Tsukamoto, S., Takatsu, M., Matsuba, S. and Tamura, H.: An accelerator architecture for combinatorial optimization problems, *Fujitsu Scientific & Technical Journal*, Vol. 53, No. 5, pp. 8–13 (2017).
- [6] Inagaki, T., Haribara, Y., Igarashi, K., Sonobe, T., Tamate, S., Honjo, T., Marandi, A., McMahon, P. L., Umeki, T., Enbutsu, K., Tadanaga, O., Takenouchi, H., Aihara, K., Kawarabayashi, K., Inoue, K., Utsunomiya, S. and Takesue, H.: A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems, *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 603–606 (2016).
- [7] Ising, E.: Beitrag zur theorie des ferromagnetismus, *Zeitschrift für Physik*, Vol. 31, No. 1, pp. 253–258 (1925).
- [8] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems, *Frontiers in Physics*, Vol. 2, p. 5 (2014).
- [9] Terada, K., Oku, D., Kanamaru, S., Tanaka, S., Hayashi, M., Yamaoka, M., Yanagisawa, M. and Togawa, N.: An Ising model mapping to solve rectangle packing problem, *Proc. VLSI Design, Automation and Test 2018 (VLSI-DAT 2018)*, pp. 1–4 (2018).
- [10] Tanaka, S., Tamura, R. and Chakrabarti, B. K.: *Quantum spin glasses, annealing and computation*, Cambridge University Press (2017).
- [11] Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. and Vecchi, M. P.: Optimization by simulated annealing, *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671–680 (1983).