

量子アニーリングによる疎行列の直接解法向け フィルイン削減オーダリング*

小見山 朋子[†] 鈴木 智博[‡]
山梨大学 工学部コンピュータ理工学科

1 はじめに

近年、エネルギーが最も低い状態（基底状態）を探索することにより最適解を得る量子アニーリングは、実用的な量子コンピュータとして開発や応用実験が進められている。しかし、適用できる問題や手法、精度は未だ明確になっておらず、特に数理工分野での適用例は多くない。本研究では、量子アニーリングによる疎行列のオーダリング手法を提案する。

2 疎行列のオーダリング

疎行列の線形方程式に直接解法適用すると、零要素が非零要素となるフィルインが発生し、計算コストとメモリの使用量が増加する。その対処法として、フィルインができるだけ少なくなるように行列の行や列を並び替えるオーダリングが利用されている。対称疎行列は、図1のように、行/列番号を頂点、非零要素を辺で表すことでグラフとして表現できる。その場合、頂点の削除順をオーダリング、頂点削除により追加される辺をフィルインとして計算することが可能であり、様々なオーダリング手法で利用されてきた。しかし、フィルインが最小となるオーダリングを求める問題は、古典コンピュータでは現実的な時間で計算しにくく、経験則的なオーダリング手法が現在用いられている。

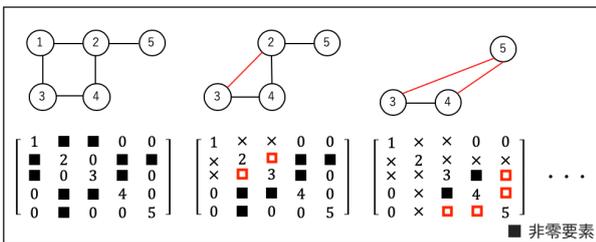


図1: 行列計算におけるグラフの対応

3 提案手法

”Quantum Minimum Degree”と”Quantum Minimum Fill-in”の2つのオーダリング手法を提案する。

*Fill-in reduction ordering for sparse direct solver using quantum annealing

[†]Tomoko Komiyama, University of Yamanashi

[‡]Tomohiro Suzuki, University of Yamanashi

3.1 Quantum Minimum Degree (QMD)

本手法は、最小次数頂点を選択するオーダリング手法である。 ”Minimum Degree(MD)”を量子アニーリングを用いて再現する手法である。

条件設定と定式化: 本手法における条件をそれぞれ次のように設定し、条件を満たしたときに最小エネルギーとなる関数を量子ビット $x \in \{0, 1\}$, 頂点数 N , 頂点 i の次数 d_i を用いて定義する。

(1) 最小次数の頂点を選択する [目的条件]

$$H_{cost} = \sum_{i=0}^{N-1} d_i \quad (1)$$

(2) 頂点を1つだけ選択する [制約条件]

$$H_{sub} = (1 - \sum_{i=0}^{N-1} x_i)^2 \quad (2)$$

エネルギー関数の定義: 各条件に重み A, B をつけて、エネルギー関数 H を定義する。

$$H = AH_{cost} + BH_{sub} \quad (3)$$

3.2 Quantum Minimum Fill-in (QMF)

本手法は、図2のように、各頂点の削除順と存在しない辺に量子ビットを設定し、辺の追加が最小となる頂点の削除順を求めることで、最小フィルイン数となるオーダリングを求める手法である。

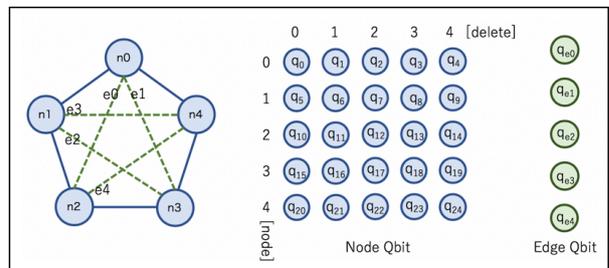


図2: QMFの量子ビット設定例 (5 × 5 行列)

条件設定と定式化: 本手法における条件をそれぞれ次のように設定し、条件を満たしたときに最小エネルギーとなる関数を量子ビット $x \in \{0, 1\}$, 頂点数

N , 辺の量子ビット集合 E , 辺 $edge$ の両端の頂点番号 $\{i, ii\}$ を用いて定義する.

(1) 追加される辺の総数を最小にする [目的条件]

$$H_{cost} = \sum_{edge \in E} x_{edge} \quad (4)$$

(2) 全ての頂点を1度ずつ削除する (同時に削除できるノードは1つのみ)[制約条件]

$$H_{sub1} = \sum_{node=0}^{N-1} (1 - \sum_{delete=0}^{N-1} x_{node,delete})^2 + \sum_{delete=0}^{N-1} (1 - \sum_{node=0}^{N-1} x_{node,delete})^2 \quad (5)$$

(3) 頂点の削除により該当する辺が追加される [制約条件]

$$H_{sub2} = \sum_{edge \in E} \sum_{node \notin \{i, ii\}} \sum_{delete=0}^{N-1} \{-4x_{edge} + (x_{node,delete} - x_{edge})^2 + (x_i - x_{edge})^2 + (x_{ii} - x_{edge})^2 + (-\sum_{j=0}^{delete} x_{i,j} - x_{edge})^2 + (-\sum_{j=0}^{delete} x_{ii,j} - x_{edge})^2\} \quad (6)$$

エネルギー関数の定義: 各条件に重み A, B, C をつけて, エネルギー関数 H を定義する.

$$H = AH_{cost} + BH_{sub1} + CH_{sub2} \quad (7)$$

4 評価実験

提案手法の動作実験を行い, 精度の調査を行う. 本実験には, CMOS 回路により量子アニーリングの動作を再現した, CMOS アニーリングマシン (HITACHI)[1] の Web API v2 を用いて行う. 同マシンにおける量子ビット間の接続はキンググラフとなっているため, 最大次数8よりも大きな次数の頂点を持つ場合は頂点分割が必要となる. 実験において, 同マシン実行時に設定可能なパラメータは全てデフォルトの値とする.

4.1 実験条件

QMD: ランダムに生成 (1/3 の確率で非零要素) される 100 個の 10×10 対称行列に対して QMD オーダリングを行い, 古典 MD オーダリングが再現できているかを確認する. また, 式 (3) において, $A = 1.00, B = 1.00$ に設定する.

QMF: ランダムに生成 (1/3 の確率で非零要素) される 10000 個の 5×5 対称行列に対して, オーダリ

ングなし, 提案手法によるオーダリング, 従来手法によるオーダリングをそれぞれ行い, 前進消去によるフィルイン数を計測する. また, 式 (7) において, $A = 1.00, B = 0.10, C = 1.00$ に設定する.

4.2 結果と考察

QMD: QMD オーダリングにより, 44%の確率で古典 MD オーダリングが再現できていることがわかった. また, 再現できていないものを分析したところ, チェンブレイクなどによりエネルギー最小の解が得られていないことが原因であることがわかった. 以上のことから, QMD による MD の再現は, 量子アニーリングで最適解が得られれば可能であると考えられる.

QMF: 評価結果を図3に示す. 提案手法により従来手法と比べて, 4%の割合で少ない, 30%の割合で同数のフィルイン数になるオーダリングが行えていることがわかる. ここから, フィルイン数最小となるオーダリングが可能であると考えられる. しかし, 本手法では35%の割合でオーダリングなし, 66%の割合で従来手法よりも多いフィルイン数となる. 原因として, 実験に用いた行列が小さすぎてフィルイン数が少ない行列であること, 量子アニーリングでは必ず最適解が得られる保証がないことが考えられる.

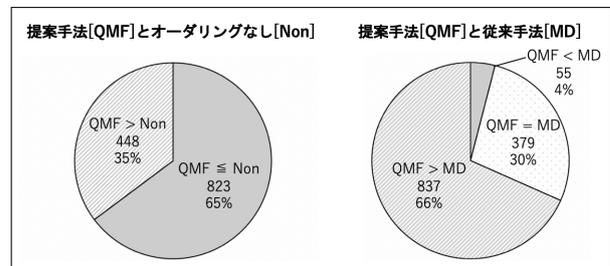


図3: フィルイン数の比較

5 おわりに

量子アニーリングによる疎行列のオーダリング手法の提案とその精度を示した. QMD で MD と同じ動作を再現できることを確認でき, QMF でかなり低い確率ではあるものの従来手法よりも少ないフィルインのオーダリングを行うことができた. しかし, 精度が高いとは言えない結果である. 今後は, 今回実験では使用しなかったイジングマシンを用いた精度調査と, 精度向上のための改良を行なっていく.

参考文献

[1] Annealing Cloud Web (<https://annealing-cloud.com/ja/index.html>)