

MAS ツールを用いた TSP における量子アニーリングの挙動解析

加納勇治[†] 田中輝雄[†] 藤井昭宏[†]

工学院大学[†]

1 はじめに

近年、量子コンピュータとして量子アニーリング (Quantum Annealing : QA) 方式が注目を浴びている。QA方式は、1998年に東京工業大学の西森秀稔教授らが提案した手法[1][2][3]である。

本研究では、QAを ising model という統計力学上のモデルとして組み合わせ最適化問題に適用できることに着目した。反復過程においては量子トンネル効果などの特徴がある。この反復過程の様子をマルチエージェント・シミュレーション (Multi-Agent Simulation : MAS) のソフトウェアである Artisoc[4]を利用して視覚化することを目的とした。巡回セールスマン問題 (Travel Salesman Problem : TSP) を QA による解く python のコード[5]を参考にし、Artisoc において収束過程や量子力学特有の現象である量子トンネル効果を表現した。

本研究では、TSP の古典的な解法としてよく知られている 2-opt 法を実装し、それらの挙動について考察を行った。

2 巡回セールスマン問題 (TSP)

TSPとは、各都市を1度ずつ訪問し最終的に初期位置に戻ってくるという巡回路を生成する問題である。図1にイメージを示す。この問題は都市数が増加するにつれて指数関数的に探索範囲が増加するため、厳密解を探索するのは困難とされている。

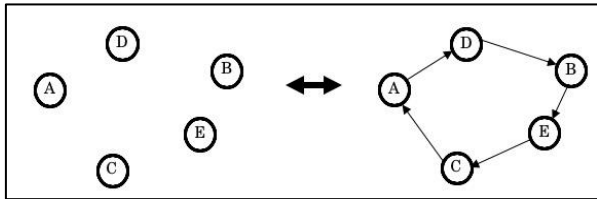


図1 TSPの巡回路生成

3 Multi-Agent Simulation (MAS)

MASとは、複数のエージェントに同時進行的に各々のルールのもと、お互いに干渉・相互作用をもたらしながら実行させるシミュレーションである。特に、高速道路の自然渋滞や、セルオートマトン、囚人のジレンマなどが応用例に挙げられる。本研究では、ising model が磁石などの磁性体の性質を持ち、上向きまたは下向きの2つの状態をとり、隣接するスピンは相互作用または外部か

Analysis of Quantum Annealing program in TSP using MAS tools

Yuji Kano[†], Teruo Tanaka[†] and Akihiro Fujii[†]

[†]Kogakuin University

ら与えられた磁場の力によって状態が更新されていくモデルであるため MAS のソフトウェアである Artisoc を利用した。

4 量子アニーリング (QA)

4.1 量子トンネル効果

量子トンネル効果は量子アニーリング最大の特徴であるエネルギーの壁を越える現象である (図4) [6]。ここで量子とは、とても小さな物質やエネルギーのことであり、原子や分子サイズ以下の極めて小さな世界に存在するものである。この極めて小さな世界はニュートン力学や電磁気学は通用せず、量子力学に則っている。

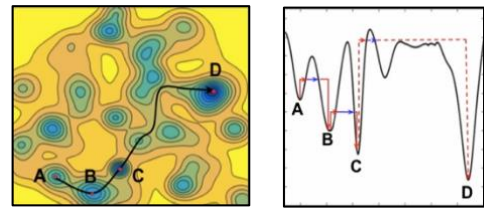


図2 量子トンネル効果

4.2 量子アニーリング法

本来の量子コンピュータであれば問題を投げかけると答えが返ってくる。量子コンピュータでは状態の重ね合わせを量子ビットにより実現させているが、古典的コンピュータを用いて量子アニーリングを実装するには、鈴木トロッタ分解を導入して計算する必要がある。

まず、最小化したい問題 (式3) がある。ここに量子効果として横磁場の項を付した (式4) で量子コンピュータにおける量子アニーリングと同様の挙動を示すことができる。

次に対角化可能部分のみ (式5) とそれ以外 (式6) でまとめて式7とし、分配関数である式8を求める。このままでは素直に解くことができないので鈴木トロッタ分解を用いた式9を利用する。ここで m のことをトロッタ数といい $m \rightarrow \infty$ で量子コンピュータと誤差なく表現できるが古典コンピュータ上で無限の変数は実装できないため適当な大きい数で実装する。これを、量子モンテカルロ法を用いてシミュレートを行なっていく。

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} d_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \quad (3)$$

$$\mathcal{H} = \sum_{a,i,j=1}^n d_{i,j} \hat{\sigma}_{i,a}^z \hat{\sigma}_{j,a+1}^z - \Gamma \sum_{i,a=1}^n \hat{\sigma}_{i,a}^x \quad (4)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i,j=1}^N d_{i,j} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \quad (5)$$

$$\mathcal{H}_1 = -\Gamma \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \quad (6)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (7)$$

$$Z \equiv \text{tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\sigma} \langle \sigma | e^{-\beta \mathcal{H}} | \sigma \rangle \quad (8)$$

$$Z = \sum_{\sigma} \langle \sigma | \left(e^{-\frac{\beta \mathcal{H}_0}{m} - \frac{\beta \mathcal{H}_1}{m}} \right)^m | \sigma \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{\beta^2}{m}\right) \quad (9)$$

5 実験

初期解を与える都市の座標を乱数で生成し1ステップ毎に横磁場による量子効果を弱めて最終的な出力結果が最適解となる。

今回の実験では都市数 38 モンテカルロステップ 13320 とし、モンテカルロステップ実行後、横磁場の減衰率を 99%としたものを一連の行程とし、QA と 2-opt 法について 350 回実行し収束過程を比較した。また比較が容易である為、2-opt 法においてはモンテカルロステップ 13320 を 1 反復とした。

図 3 に QA 法と 2-opt 法におけるタイムステップ毎の総距離の推移を示す。図 4 に最終的に最短経路として得られた移動経路に沿って都市を結んだものを示す。それぞれ青線が 2-opt 法を表し、赤線が QA を表す。

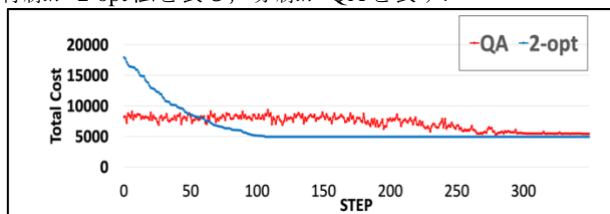


図 3 QA 法と 2-opt 法の収束過程

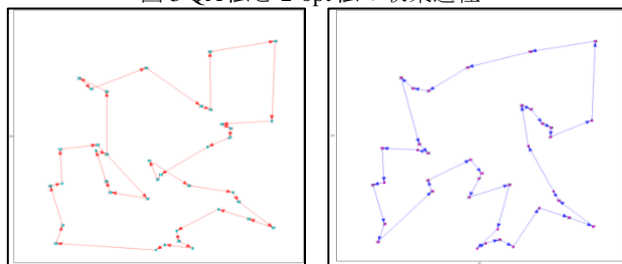


図 4 出力結果 (左 : QA 法, 右 : 2-opt 法)

図 3 より 350 回実行後の巡回路の総移動コストはそれぞれ QA は 5437.92、2-opt 法は 4930.397 となり、図 4 よりそれぞれで異なる巡回路が生成された。また、2-opt 法では 112 ステップ以降、総移動コストは変化せず厳密解が得られた。QA では初期段階では総移動コストに大きな変化が見られるが、300 ステップ以降大きな変化は見られず、総移動コスト近似解に収束している。

図 5 に量子効果毎の巡回路変更回数を示す。図 6 に量子効果が出現する前後のエネルギー推移を示した。

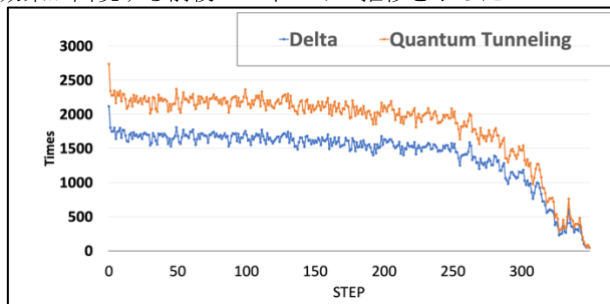


図 5 QA の 1 反復における巡回路変更回数



図 6 量子トンネル効果が現れた前後のエネルギー

図 5 は総移動コストの巡回路変更回数をグラフにしたものである。青線は単純にコストが減少した時の推移で、赤線は確率的に引き起こされる量子トンネル効果による巡回路の変更が採用された推移である。図 3 と同様に 300 ステップ以降、移動経路の変更が減少した。図 6 では確率的に引き起こされる量子トンネル効果が発生した場合を視覚化した。

6 おわりに

本研究では、Artisoc というソフトウェアを用いて、QA の収束過程および量子トンネル効果の視覚化を行なった。TSP の解法アルゴリズムである 2-opt 法と QA 法の収束過程の視覚化も行なった。QA においては近似解を得るアルゴリズムであるため、初期の反復では量子トンネル効果が頻発し、反復が進むにつれて減少することがわかった。つまり、量子効果が少なくなるにつれて最適解に近づいていることが今回のテスト問題では確認された。今後の課題として両手法の 1 反復におけるコストを考慮した上での考察、また、都市数の増加に伴う計算コストの考察が必要である。

参考文献

- [1] Tadashi Kadowaki and Hidetoshi Nishimori, Quantum Annealing in the transverse Ising model, PHYSICAL REVIEW E, VOLUME 58, NUMBER 5 (1998)
- [2] 西森秀稔, Quantum Computer : 6. Quantum Annealing and D-Wave Machines, 情報処理, 55, 7, pp.716-722 (2014)
- [3] 西森秀俊・大関真之 (2017) 「量子コンピュータが人工知能を加速する」日経 BP 社
- [4] 「MAS コミュニティ」, <<http://mas.kke.co.jp/>> 2019 年 1 月 9 日アクセス。
- [5] 「量子アニーリングで組合せ最適化」, <<https://qiita.com/TomohikoAbe/items/8d52096ad0f578aa2224>>2019 年 1 月 10 日アクセス。
- [6] Vasil S. Denchev, Sergio Boixo, Sergei V. Isakov, Nan Ding, Ryan Babbush, Vadim Smelyanskiy, John Martinis, and Hartmut Neven, What is the Computational Value of Finite-Range Tunneling?, Phys. Rev. X 6, 031015 (2016)