

イジング計算機による 誘導部分グラフ同型問題の解法

吉村 夏一^{1,a)} 多和田 雅師^{1,b)} 田中 宗^{2,3} 新井 淳也⁴ 八木 哲志⁴ 内山 寛之⁴ 戸川 望^{1,c)}

概要：近年、組合せ最適化問題をイジングモデルにマッピングすることで準最適解を高速に得ることができアーキテクチャとして、イジング計算機が注目されている。ネットワークや木、系列などの構造を持つ多くの現実問題は、その構造を頂点集合と辺集合からなるグラフで表すことができる。特に誘導部分グラフ同型問題は、大きなグラフ構造の中に特定の構造を持つグラフがあるか否かを判定する問題であり、巨大な集積回路から不正回路を探索する際や化学物質中における特定の化学結合ネットワークを探索する際などに出現する。本稿では、誘導部分グラフ同型問題をイジング計算機によって解く手法を提案する。提案手法ではイジングモデルのエネルギー関数として、2つのグラフに対し一方のグラフが他方のグラフの誘導部分グラフとなるイジングモデルのエネルギーが最小となるよう設計する。この設計により、提案したエネルギー関数を最小化することで、誘導部分グラフ同型問題をイジング計算機を用いて解くことを可能にする。提案手法ではイジングモデルで使用するスピン数は2つのグラフの頂点数の積に抑えられる。誘導部分グラフ同型問題を実際にイジングモデル上で求解した結果を報告する。

キーワード：誘導部分グラフ同型問題, イジング計算機, イジングモデル

1. はじめに

1.1 イジング計算機

近年、組合せ最適化問題の準最適解や実行可能解を高速に求め得る新しいアーキテクチャとして、イジングモデル [6] を用いた様々なイジング計算機が注目され研究されている [1, 4, 13, 14]。組合せ最適化問題とは、与えられた制約を満たした上で評価関数を最大または最小とする決定変数の組合せを探索する問題である。IoT (Internet of Things) の普及に伴い社会で用いられるシステムや制御は複雑になっているため、制御に必要なパラメータ数などの決定変数が増加している。そのため膨大な組合せの解の候補から高速に準最適解を得ることが重要となる。イジング計算機は組合せ最適化問題に対し、自然現象を模倣したイジングモデルにマッピングすることで、効率的に組合せ最適化問題の準最適解を求め得るとして期待され、様々な組合せ最適化問題についての検討がなされている [9, 11, 12]。

1.2 誘導部分グラフ同型問題

組合せ最適化問題の1つに誘導部分グラフ同型問題がある。誘導部分グラフ同型問題は2つのグラフが与えられたとき、一方のグラフが他方の誘導部分グラフになっているか否かを判定する問題であり、特定のグラフ構造を持つデータや集積回路を探索するときに出現する組合せ最適化問題である。一般に誘導部分グラフ同型問題は最大クリーク問題を含む問題であり、NP完全問題であることが知られている [3, 7]。

グラフ同型問題と、部分グラフ同型問題、および誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルに変換するマッピング手法は [2] で提案されている。[2] は、対象とする2つのグラフの頂点数を n と m ($n \leq m$) としたとき、 $(nm + m)$ 個のスピンを用いて、部分グラフ同型問題および誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングする。

1.3 本稿の提案

本稿では対象とする2つのグラフの頂点数を n と m ($n \leq m$) としたとき、 nm 個のスピンを用いて、誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングする手法を提案する。2つのグラフに対し、一方のグラフが他方のグラフの誘導部分グラフとなるイジングモデルのエネルギー関数を設計する。

¹ 早稲田大学基幹理工学部情報通信学科

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

³ 科学技術振興機構さきがけ

⁴ NTT ソフトウェアイノベーションセンタ

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

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

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

提案手法ではイジングモデルで使用するスピン数は2つのグラフの頂点数の積に抑えられる。誘導部分グラフ同型問題を実際にイジングモデル上で求解した結果を報告する。

1.4 本稿の貢献

本稿の貢献は以下の3つである。

- (1) 2つのグラフに対し、一方のグラフが他方のグラフの誘導部分グラフとなるときにエネルギーが最小となるイジングモデルのエネルギー関数を提案した。
- (2) 対象とする2つのグラフの頂点数を n と m ($n \leq m$) としたとき、[2] では $nm + m$ 個のスピンを用いるのに対し、提案手法では nm 個のスピンを用いて誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングした。
- (3) 提案手法によりマッピングした誘導部分グラフ同型問題を実際にイジング計算シミュレータを用いてイジングモデル上で解き、元の問題の解として解釈することで、誘導部分グラフ同型問題の解を取得した。

1.5 本稿の構成

本稿の構成を以下に示す。2章で、誘導部分グラフ同型問題を定式化し、例題を用いて誘導部分グラフ同型問題を説明する。3章で、誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングする。4章で、誘導部分グラフ同型問題を実際にイジングモデル上で解いた実験の結果を示す。5章で、本稿をまとめ、今後の課題を示す。

2. 誘導部分グラフ同型問題

誘導部分グラフ同型問題とは、頂点数が異なる2つのグラフが与えられたとき、一方のグラフが他方の誘導部分グラフになっているか否かを判定する問題であり以下のように定式化される。

頂点集合 V と辺集合 E からなる無向グラフ $G = (V, E)$ を考える。2つの頂点 $u, v \in V$ が辺を持つとき、 $(u, v) \in E$ で表す。グラフ $G = (V, E)$ の頂点の接続を表した行列として、隣接行列 A を以下のように定義する。

$$A = \begin{pmatrix} s_{1,1} & s_{1,2} & s_{1,3} & \cdots & s_{1,n} \\ s_{2,1} & s_{2,2} & s_{2,3} & \cdots & s_{2,n} \\ s_{3,1} & s_{3,2} & s_{3,3} & \cdots & s_{3,n} \\ \vdots & & & \ddots & \\ s_{n,1} & s_{n,2} & s_{n,3} & \cdots & s_{n,n} \end{pmatrix}$$

ただし

$$s_{i,j} = \begin{cases} 1 & (\text{頂点 } i \text{ と } j \text{ が接続している}) \\ 0 & (\text{頂点 } i \text{ と } j \text{ が接続していない}) \end{cases}$$

であり、 $n = |V|$ とする。

いま、2つのグラフ $G_1 = (V_1, E_1)$ と $G_2 = (V_2, E_2)$ ($|V_2| = m > |V_1| = n \geq 2$) を考える。また隣

接行列を A_1 と A_2 とする。与えられた2つのグラフ G_1 と G_2 の頂点を写像する行列として、置換行列 P を以下のよう

$$P = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & \cdots & x_{1,m} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & \cdots & x_{2,m} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & \cdots & x_{3,m} \\ \vdots & & & \ddots & \\ x_{n,1} & x_{n,2} & x_{n,3} & \cdots & x_{n,m} \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$x_{i,v} = \begin{cases} 1 & (v \in V_2 \text{ を } i \in V_1 \text{ に写像する}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

置換行列 P はグラフ G_1 とグラフ G_2 の頂点の対応を示している。以上のもと誘導部分グラフ同型問題を定義する。

定義 1. 2つのグラフ $G_1 = (V_1, E_1)$, $G_2 = (V_2, E_2)$ ($|V_2| = m > |V_1| = n \geq 2$) とし、隣接行列を A_1 , A_2 とする。誘導部分グラフ同型問題とは、 $PA_2P^T = A_1$ となるような置換行列 P が存在するかどうかを求める問題である。

例 1. 図1に示すように頂点数が4のグラフ $G_1 = (V_1, E_1)$ と頂点数が9のグラフ $G_2 = (V_2, E_2)$ の2つのグラフを考える。2つのグラフの隣接行列はそれぞれ以下のようになる。

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

与えられた2つのグラフ G_1 と G_2 の頂点を写像する行列として、置換行列 P を図1に示す通り与えると、 $PA_2P^T = A_1$ が成立する。つまり、 G_2 は誘導部分グラフとして G_1 を持つ。実際、図1の通り、グラフ G_2 は誘導部分グラフとしてグラフ G_1 と同型のグラフを内部に持つ。図1ではグラフ G_2 において、グラフ G_1 と誘導部分グラフ同型である頂点を青く色付けしてある。

3. 誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルマッピング

本章では、イジングモデルを紹介し、2章で定式化した誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングす

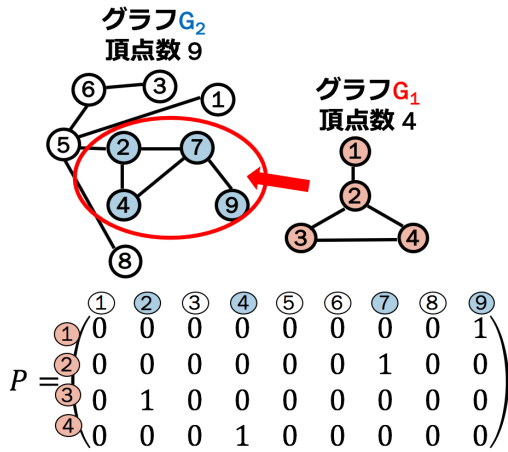


図 1: 頂点数 4 と頂点数 9 のグラフの問題例。

る。誘導部分グラフ同型問題におけるイジングモデルのエネルギー関数として、4 つの項を導入する。

3.1 イジングモデルと QUBO

イジングモデルとは、磁性体の振る舞いを表す統計力学上のモデルである。磁性体のスピンの働く局所磁界とスピン間に働く相互作用によって、磁性体全体の振る舞いを検討するためのモデルである。図 2 にイジングモデルの基本構成例を示す。イジングモデルは無向グラフ $G_I = (V_I, E_I)$ 上に定義される。 V_I, E_I はそれぞれスピンの配置される頂点集合及び頂点間の辺集合である。イジングモデルは、磁性体の性質を表す上下の向きを持つスピン σ_i と、2 つのスピン間で及ぼしあう相互作用の力を表す相互作用係数 J_{ij} 、及び外部から与えられた磁場の力を表す外部磁場係数 h_j で表される。スピン σ_i は ± 1 の 2 値のいずれかを取り、 J_{ij} 及び h_i は実数である。このとき、このイジングモデルが持つエネルギー \mathcal{H} は式 (4) で表される。

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j) \in E_I} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in V_I} h_i \sigma_i - \text{const.} \quad (4)$$

イジングモデルはエネルギー \mathcal{H} が低いほど安定な状態であり、最低エネルギー状態を基底状態と呼ぶ。

イジングモデルにおいてスピン $\sigma_i (= \pm 1)$ の代わりに、0 または 1 を取るバイナリ変数 n_i を導入することを考える。0 か 1 の 2 値のバイナリ変数を用いて 2 次式まででエネルギー関数を表せる場合、これを QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) と呼ぶ。バイナリ変数 $n_i = 0, 1$ とスピン $\sigma_i = -1, 1$ は以下の式で互いに変換することができる。

$$n_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (5)$$

また、QUBO のエネルギー関数 \mathcal{H} は一般に

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j) \in E_I} v_{ij} n_i n_j - \sum_{i \in V_I} w_i n_i - \text{const} \quad (6)$$

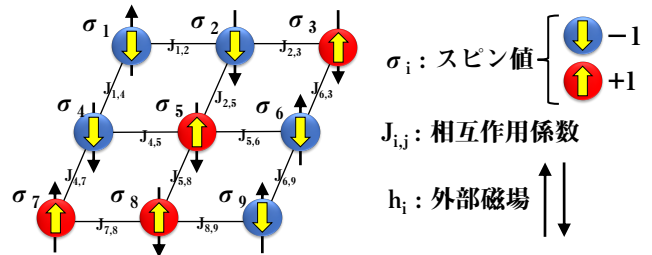


図 2: イジングモデルの基本構成例。

と書ける。ここで、 v_{ij} は 2 つのバイナリ変数 n_i, n_j の間の相互作用係数、 w_i はバイナリ変数 n_i に作用する局所的な強制力である。ここで、 const は定数を表す。本論文では、イジングモデルと等価な QUBO による定式化を行う。

3.2 誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルへのマッピング

置換行列 P の各要素 $x_{i,v}$ ($1 \leq i \leq n, 1 \leq v \leq m$) は 0 か 1 の 2 値つまり、バイナリ変数で表現される。置換行列 P の各要素 $x_{i,v}$ とイジングモデルの各スピンを 1 対 1 で対応付けする。イジングモデルのスピンに 1 対 1 対応させる際は QUBO 表現を用いる。以降、2 つのグラフ $G_1 = (V_1, E_1)$ とグラフ $G_2 = (V_2, E_2)$ ($|V_2| = m > |V_1| = n$) に対して、これらの隣接行列を A_1 と A_2 とする。 G_1 が G_2 の誘導部分グラフとなるときの置換行列を P とする。このような置換行列 P が存在するときに最小となる QUBO 表現のエネルギー関数 \mathcal{H} を提案する。提案するエネルギー関数 \mathcal{H} は、 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B, \mathcal{H}_C, \mathcal{H}_D$ の 4 項から構成される。3.2.1 節から 3.2.5 節で議論するように提案手法ではイジングモデルで使用するスピン数は置換行列 P の要素数、つまりグラフ G_1 とグラフ G_2 の頂点数の積で表され、 nm 個である。

3.2.1 \mathcal{H}_A : 誘導部分グラフ頂点割当重複禁止制約

誘導部分グラフ頂点割当重複禁止制約とは、グラフ G_1 の頂点がグラフ G_2 のどの頂点に対応するかを決める制約である。誘導部分グラフ同型問題では、グラフ G_1 の頂点数 n がグラフ G_2 の頂点数 m よりも小さいため、グラフ G_1 の各頂点はグラフ G_2 の任意の頂点に一意に対応する必要がある。したがって、置換行列 P において、同じ行内にただ一つだけ 1 が存在し、それ以外の要素は 0 の値を取る。

まず、置換行列 P の i 行目にただ一つだけ 1 が存在する制約を式で表すと以下のようなになる。

$$\sum_{v=1}^m x_{i,v} = 1 \quad (1 \leq i \leq n) \quad (7)$$

例 1 では図 1 にある通り、置換行列 P を行方向に見ると 1 の数はただ 1 つになっている。

この制約条件をイジングモデルにマッピングするために、以下の項を導入する。ここで、列方向で総和を考えているので、与える頂点数は m である。

$$\left(1 - \sum_{v=1}^m x_{i,v}\right)^2 \quad (1 \leq i \leq n) \quad (8)$$

この項は式 (7) を満たすとき最小値 0 を取る。置換行列 P のすべての行について式 (7) を満足するには、すべての行について式 (8) の値の総和を考え、これを最小化すれば良い。つまりイジングモデルのエネルギー \mathcal{H}_A として、以下の式を提案する。

$$\mathcal{H}_A = \sum_{i=1}^n \left(1 - \sum_{v=1}^m x_{i,v}\right)^2 \quad (9)$$

3.2.2 \mathcal{H}_B : グラフ頂点割当制約

グラフ頂点割当制約とは、グラフ G_2 の頂点がグラフ G_1 のどの頂点に対応するかを決める制約である。グラフ G_2 の頂点数 m がグラフ G_1 の頂点数 n よりも大きいため、グラフ G_2 の全ての頂点がグラフ G_1 の頂点に割り当てられるとは限らない。つまり、前節で検討した誘導部分グラフ頂点割当重複禁止制約のように置換行列における全ての列で 1 が必ず 1 つ存在するとは限らない。よって、置換行列の同じ列内にただ一つだけ 1 が存在するか、全ての要素が 0 の値を取る。

まず、置換行列の v 列目にただ一つだけ 1 が存在するか、全ての要素が 0 の値を取る制約は以下で表される。

$$\sum_{i=1}^n x_{i,v} \in \{0, 1\} \quad (1 \leq v \leq m) \quad (10)$$

例 1 では図 1 にある通り、置換行列 P を列方向に見ると、2 列目はただ 1 つだけ 1 が存在するが、3 列目は全ての要素が 0 になっている。

同じ列内にただ 1 つだけ 1 が存在するか、全ての要素が 0 の場合に値が最小になるように以下の項を導入する。ここで、行方向で総和を考えているので、与える頂点数は n である。

$$\left(\frac{1}{2} - \sum_{i=1}^n x_{i,v}\right)^2 \quad (1 \leq v \leq m) \quad (11)$$

この項は式 (10) を満たすとき最小値 $1/4$ を取る。置換行列 P のすべての列について式 (10) を満足するには、すべての列について式 (11) の値の総和を考え、これを最小化すれば良い。つまりイジングモデルのエネルギー \mathcal{H}_B として、以下の式を提案する。

$$\mathcal{H}_B = \sum_{v=1}^m \left(\frac{1}{2} - \sum_{i=1}^n x_{i,v}\right)^2 \quad (12)$$

3.2.3 \mathcal{H}_C : 接続増加禁止制約

接続増加禁止制約とは、置換行列を用いてグラフ G_1 の各頂点をグラフ G_2 の各頂点に置換したあとに、グラフ G_1 で接続していない頂点に対応するグラフ G_2 の頂点で接続

することを禁止する制約である。

この制約をイジングモデルにマッピングするために、制約を違反するときにペナルティとなる項を導入する。グラフ G_1 中の 2 つの頂点 i, j において、 i, j 間に辺が存在しないものとする。つまり $(i, j) \notin E_1$ とする。またグラフ G_2 において、頂点 i, j に対応する頂点を u, v とし、 u, v 間に辺が存在するものとする。つまり $(u, v) \in E_2$ とする。 G_1 が G_2 の誘導部分グラフであるとき、このような対応付けを禁止する必要がある。

制約を違反するときに値が大きくなる項として、置換行列 P の要素 $x_{i,v}$ を用いてこの制約をイジングモデルのエネルギー \mathcal{H}_C として表すと以下ようになる。

$$\mathcal{H}_C = \sum_{(i,j) \notin E_1} \sum_{(u,v) \in E_2} x_{i,u} x_{j,v} \quad (13)$$

3.2.4 \mathcal{H}_D : 接続減少禁止制約

接続減少禁止制約とは、置換行列を用いてグラフ G_1 の各頂点をグラフ G_2 の各頂点に置換したあとに、グラフ G_1 で接続する頂点に対応するグラフ G_2 の頂点で接続していないことを禁止する制約である。

接続減少禁止制約は接続増加禁止制約と同様に制約式を計算できる。この制約をイジングモデルのエネルギー \mathcal{H}_D として表すと以下ようになる。

$$\mathcal{H}_D = \sum_{(i,j) \in E_1} \sum_{(u,v) \notin E_2} x_{i,u} x_{j,v} \quad (14)$$

3.2.5 最終的なエネルギー関数

最終的に得られるエネルギー関数は、各エネルギー関数の式 (9), (12), (13), (14) の重み付き和の以下で表される。

$$\mathcal{H} = \alpha \mathcal{H}_A + \beta \mathcal{H}_B + \gamma \mathcal{H}_C + \delta \mathcal{H}_D \quad (15)$$

ただし、 $\alpha, \beta, \gamma, \delta (> 0)$ はハイパラメータであり、各項の部分項数を考慮し設定する。また、式 (15) において、エネルギー \mathcal{H} の下限は $\beta m/4$ になる。ここで、誘導部分グラフ同型問題の同型か否かの判定は、基底状態のエネルギーが下限値 $\beta m/4$ となるか否かという解釈となる。

まず小定理 1 および小定理 2 を示す。

小定理 1. 誘導部分グラフ同型ならば、 $\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たす。

証明. 3.2.1 節から 3.2.4 節の議論にある通り、式 (9), (12), (13), (14) は、与えられた誘導部分グラフ同型問題に対し置換行列 P が存在するときに最小値をとる。ここで、式 (9), (12), (13), (14) の最小値はそれぞれ以下ようになる。

$$\mathcal{H}_A = 0 \quad (16)$$

$$\mathcal{H}_B = \frac{m}{4} \quad (17)$$

$$\mathcal{H}_C = 0 \quad (18)$$

$$\mathcal{H}_D = 0 \quad (19)$$

最終的に得られるエネルギー関数は、式 (15) の各項の重み付き和で表される。各項 \mathcal{H}_A , \mathcal{H}_B , \mathcal{H}_C , \mathcal{H}_D がそれぞれ最小値となり、その値は以下のように計算することができる。

$$\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_B = \frac{\beta m}{4} \quad (20)$$

□

小定理 2. $\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たすならば、誘導部分グラフ同型である。

証明. 小定理 2 の対偶として、誘導部分グラフ同型でないならば $\mathcal{H} = \beta m/4$ を満たさないことを証明する。

誘導部分グラフ同型問題において同型でないと仮定する。このとき、どのような置換行列 P に対しても誘導部分グラフ頂点割当重複禁止制約、グラフ頂点割当制約、接続増加禁止制約、接続減少禁止制約のいずれかを満たさない。そのような置換行列 P を表すスピンに対して制約式 (9), (12), (13), (14) のいずれかは最小値を取らない。つまり、 $\mathcal{H}_A > 0$ か、 $\mathcal{H}_B > m/4$ か、 $\mathcal{H}_C > 0$ か、 $\mathcal{H}_D > 0$ を少なくとも 1 つ以上満たすため $\mathcal{H} > \beta m/4$ となる。 □

小定理 1 と小定理 2 から以下の定理が導かれる。

定理 1. 誘導部分グラフ同型問題を式 (15) によりイジングモデルにマッピングしたとき、基底状態のエネルギー \mathcal{H} が $\beta m/4$ になれば、そのときに限り同型と判定できる。

証明. 小定理 1 と小定理 2 より定理 1 が成立する。 □

4. 評価実験

3 章で提案した誘導部分グラフ同型問題のイジングモデルマッピングに対し、イジング計算シミュレータにより解を取得した。4.1 節で本稿で実験した環境を示す。4.2 節で実験結果、考察を述べる。

4.1 実験環境

4.1.1 入力グラフとハイパパラメータ

本実験では、一方が他方の誘導部分グラフとなるように、ランダムに頂点間の辺を作成し 2 つのグラフを生成した。頂点数が 5 個から 100 個のグラフを対象とする。

実験をするにあたり、3.2.5 節で定義した、誘導部分グラフ同型問題の最終的なエネルギー関数のハイパパラメータを設定する必要がある。本実験のハイパパラメータの設定値を表 1 に示す。ハイパパラメータの設定値として、式 (9) で表されるエネルギー \mathcal{H}_A と式 (12) で表されるエネルギー \mathcal{H}_B の部分項数はそれぞれ $\mathcal{O}(nm^2)$ と $\mathcal{O}(n^2m)$ である。対して、式 (13) で表されるエネルギー \mathcal{H}_C と式 (14) で表されるエネルギー \mathcal{H}_D の部分項数は、たかだか $\mathcal{O}(nm)$ であるため、 \mathcal{H}_A と \mathcal{H}_B に対してハイパパラメータを大きく設定している。

表 1: ハイパパラメータ

パラメータ	値
α	1
β	1
γ	3
δ	3

表 2: SA 設定値

SA 設定項目	値
初期解	ランダム
開始温度	100000
最終温度	0.01
Inner Loop	2000
Outer Loop	100000

4.1.2 イジング計算シミュレーション

本実験では、Simulated Annealing (SA) [8] によるイジング計算シミュレーションにより、イジングモデルの基底状態あるいは準基底状態を得た。SA によるイジング計算シミュレーションは以下の手順に従った。

- (1) 初期解 (スピンの初期状態) をランダムに設定する。
- (2) ランダムに 1 つのスピンの状態を交換し、Metropolis 法 [5, 10] を実行する。エネルギー関数が小さくなる場合は受理、エネルギー関数が大きくなる場合は確率 $p = \exp(-\Delta E/T_k)$ で受理する。ここで、 T_k は k ステップ目の温度、 ΔE は新しい解候補のエネルギーから現在の解のエネルギーを引いた差を表す。
- (3) Inner loop の回数だけ (2) を試行したら温度を下げる。現在のステップ数を k 、冷却率を r とすると、 $T_{k+1} = rT_k$ となる。ここで、冷却率は Outer loop の回数だけ更新されたとき、最終温度になるように設定する。
- (4) Outer loop の回数だけ (2) - (3) を繰り返す。

SA を実行するにあたり必要な各種設定項目と設定値を表 2 に示す。本実験では 1 回の SA 試行により、1 個の解を取得する。各誘導部分グラフ同型問題に対し、100 回の試行を行い、何回基底状態を得たかを計測した。

実行環境は OS が macOS High Sierra 10.13.6、CPU が 2.9GHz Intel Core i5、メモリが 8GB、SA の実行に使用した言語は C++ である。

4.2 実験結果

本節では、マッピングされた誘導部分グラフ同型問題をイジングモデル上における SA によって求解した結果を示す。実験結果を表 3 に示す。表 3 では頂点数を変化させたとき、

- イジングモデルが基底状態となった回数 $N_{H_{\min}}$

表 3: 誘導部分グラフ同型問題の実験結果

頂点数 (n, m)	スピンの数 ($n \times m$)	$N_{H_{\min}}$	$N_{H_{\min}+1}$	N_{others}
(5,10)	5×10	100	0	0
(5,50)	5×50	100	0	0
(10,25)	10×25	17	66	17
(10,50)	10×50	56	43	1
(10,100)	10×100	90	10	0

$N_{H_{\min}}$: イジングモデルが基底状態となった回数

$N_{H_{\min}+1}$: 基底状態のエネルギーを H_{\min} としたとき、エネルギーの値が $H_{\min} + 1$ となった回数

N_{others} : その他の状態となった回数

- 基底状態のエネルギーを H_{\min} としたとき、イジングモデルのエネルギーの値が $H_{\min} + 1$ となった回数 $N_{H_{\min}+1}$
- その他の状態になった回数 N_{others}

を示している。表 3 からわかるように、イジングモデルの基底状態に到達しない場合でも、イジングモデル上において基底状態の近傍のスピンの組合せが得られている。ただし、グラフ同型問題のイジングモデルでは、制約に重みをつけているため、イジングモデルのエネルギーの値が $H_{\min} + 1$ となった状態は元の問題の制約を全て満たした解でない。イジングモデル上において基底状態の近傍であるスピンの組合せが、本来のグラフ同型問題の解に物理的に近いかわか否かは定量的に判断できないことになる。

実験の結果より、提案手法により誘導部分グラフ同型問題をイジングモデルにマッピングし、イジングモデル上において解を取得できたことがわかる。今回検討したグラフにおいては、頂点数 10 のグラフと頂点数 100 のグラフに対する誘導部分グラフ同型問題を解いた。これはスピン数としては 1000 個のスピンの相当する。この規模の問題に対して基底状態のスピンの組合せを有限の確率で得ることが可能であるという結果を得たことから、さらに大きなグラフ間の誘導部分グラフ同型問題についても、有限の確率で基底状態のスピンの組合せを得ることが可能であると期待できる。

5. おわりに

本稿では誘導部分グラフ同型問題をイジングマッピングする手法を提案し、実際にイジング計算シミュレータを用い誘導部分グラフ同型問題の解を取得した。今回取り扱ったグラフについては、頂点数 10 のグラフと頂点数 100 のグラフに対する誘導部分グラフ同型問題、すなわち、スピン数で言えば 1000 個の問題に対して有限の確率で基底状態を得ることが可能なことを確認した。

イジング計算では、常にイジングモデルの基底状態が得られるとは限らない。今後の課題として、誘導部分グラフ同型問題において、イジングモデル上において基底状態の近傍のスピンの組合せが得られたとき、その物理的な意味

を考察することが挙げられる。

参考文献

- [1] P. I. Bunyk, E. M. Hoskinson, M. W. Johnson, E. Tolka-cheva, F. Altomare, A. J. Berkley, R. Harris, J. P. Hilton, T. Lanting, A. J. Przybysz, J. Whittaker, "Architectural considerations in the design of a superconducting quantum annealing processor," *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, vol. 24, pp. 1–10, 2014.
- [2] C. S. Calude, M. J. Dinneen, R. Hua, "QUBO formulations for the graph isomorphism problem and related problems," *Theoretical Computer Science*, vol. 701, pp. 54–69, 2017.
- [3] S. Fortin, "The graph isomorphism problem," Department of Computing Science, University of Alberta, Tech. Rep., 1996.
- [4] Y. Haribara, Y. Yamamoto, K. Kawarabayashi, S. Utsunomiya, "A coherent Ising machine with quantum measurement and feedback control," *arXiv preprint quant-ph/1501.07030*, 2015.
- [5] W. K. Hastings, "Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications," 1970.
- [6] E. Ising, "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus," *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, no. 1, pp. 253–258, Feb. 1925.
- [7] D. S. Johnson, "The NP-completeness column: an ongoing guide," *Journal of algorithms*, vol. 6, no. 3, pp. 434–451, 1985.
- [8] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, "Optimization by simulated annealing," *Science*, vol. 220, no. 4598, pp. 671–680, 1983.
- [9] A. Lucas, "Ising formulations of many NP problems," *Frontiers in Physics*, vol. 2, p. 5, 2014.
- [10] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, "Equation of state calculations by fast computing machines," *The journal of chemical physics*, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092, 1953.
- [11] S. Tanaka, R. Tamura, B. K. Chakrabarti, *Quantum spin glasses, annealing and computation*. Cambridge University Press, 2017.
- [12] K. Terada, D. Oku, S. Kanamaru, S. Tanaka, M. Hayashi, M. Yamaoka, M. Yanagisawa, N. Togawa, "An Ising model mapping to solve rectangle packing problem," in *Proc. VLSI Design, Automation and Test (VLSI-DAT)*, 2018, pp. 1–4.
- [13] S. Tsukamoto, M. Takatsu, S. Matsubara, H. Tamura, "An accelerator architecture for combinatorial optimization problems," *FUJITSU Science and Technology Journal*, vol. 53, pp. 8–13, 2017.
- [14] M. Yamaoka, C. Yoshimura, M. Hayashi, T. Okuyama, H. Aoki, H. Mizuno, "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.