

中間解の保持を用いた量子アニーリングの精度向上手法

下舞 創平^{1,a)} 木村 晋二¹

概要: 量子モンテカルロ法に基づく量子アニーリングでは、相互関係のあるスピンをランダムに選んでトグルさせるかどうかを決め、スピンの遷移によってエネルギーの最小解を求める。しかし、エネルギーの収束に時間がかかったり、全域的な最適解に収束しないことがある。そこで、各トロッタのエネルギーを保持・更新しておくことで、計算途中でエネルギー最小のスピンの状態を求め、その解よりも良い解が出るまで中間最小解を保持することで、同じ計算時間で解の精度を向上させる手法を提案する。

キーワード: 疑似量子アニーリング, 量子モンテカルロ, イジングモデル, QUBO

A Method for Improving the Accuracy of Quantum Annealing by Keeping Temporally Optimum Solution

SHIMOMAI SOHEI^{1,a)} KIMURA SHINJI¹

Abstract: Quantum annealing is a new algorithm to solve combinatorial optimization problems where the original problem is converted to the energy minimization of Ising model or the equivalent QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization). Speeding up quantum annealing is important to obtain the solutions of combinatorial optimization problems in short time. In this manuscript, an acceleration method of simulated quantum annealing (SQA) based on the quantum Monte Carlo method is discussed and a new method is introduced to improve the quality of the solution under the same amount of computation time. The method keeps a temporally minimum solution during the computation and renews the temporally minimum solution when a better solution can be found. Its effectiveness is shown by applying maxcut problems and traveling salesman problems.

Keywords: Simulated Quantum Annealing, Quantum Monte Carlo, Ising Model, QUBO

1. はじめに

近年、組み合わせ最適化問題を高速に解決する手法として量子モデルに基づいて解く量子アニーリング (Quantum Annealing) が注目をあびている。この解法は、量子力学的に相関関係を持つ二次元配列量子スピンの集合において、スピン全体のエネルギーが最も低い状態に変化する現象を利用するものである [1]。物理的な量子アニーリングではすべてのスピンを独立に状態を決めていることから量子ビットを並列的に扱うことで、高速に解を導出すること

ができるといわれている [2]。量子アニーリングマシンは、チップ上で量子ビットを作り出すことで物理的に実現できる。しかし、超伝導チップを絶対零度近傍まで冷却する必要があるため、大規模であり、高価である [3]。そこで、量子アニーリングを、従来の CPU や GPU, FPGA を用いて模擬する疑似量子アニーリング (SQA, Simulated Quantum Annealing) の開発が盛んに行われている [4], [5]。従来の機器を用いることで、安価で手軽であり、種々の問題に柔軟に適用できるとされている [6],[7]。

量子アニーリングを模擬する手法の 1 つとして、量子モンテカルロ法が知られている。量子モンテカルロ法では、相互関係のあるスピンをランダムに変化させて全体のエネルギーを順次変化させてゆく。これにより、全域的な最適

¹ 早稲田大学
Waseda University, 3-4-1, Okubo, Shinjuku, Tokyo, 169-8555
JAPAN

^{a)} sohei.shimomai@islab.cs.waseda.ac.jp

解に状態遷移するとされている。しかし、局所的な最適解への落ち込みを防ぐためにエネルギーが大きくなる場合でも遷移を受諾するため、全域的な最適解に帰着しないことがある。また、処理時間が制限されている場合、最適解へ帰着する前にアニーリングを終了せざるを得ない場合がある。このように、アニーリングでは必ずしも全域的な最適解に帰着しない [8]。

そこで、アニーリング中のエネルギー値が最小の中間解を保持しておき、その解を導出解に用いる手法を提案する。この最小中間解は、アニーリング中に定期的に更新される。アニーリング中に本提案手法により、それまでに得られた最小の解が残るので、既存のアニーリングによる状態遷移終了後のスピン状態を導出する従来手法に比べて、解の精度が向上するのではないかと考えた。まず、提案手法について述べた後、組合せ最適化問題である最大カット問題と巡回セールスマン問題での検証結果と考察を示す。

以下、2章ではイジングモデルと組合せ最適化問題について説明する。3章では、疑似量子アニーリングについて述べる。4章では今回提案する中間解の保持手法を示す。5章では本提案手法の評価として、組合せ最適化問題を解いた際の結果を示し考察する。6章はあとがきとする。

2. イジングモデルと組合せ最適化問題

疑似量子アニーリングをエミュレーションする上で必要となるイジングモデルについて説明した後、組合せ最適化問題である最大カット問題と巡回セールスマン問題について説明する。

2.1 イジングモデル

イジングモデルとは、統計力学上での磁性体のスピンの振る舞いを説明するモデルである [10]。イジングモデルは、上向きと下向きの二つの状態をとるスピンの集合から構成される。スピン全体は外部からの磁場の影響を受け、それぞれのスピン間は相互作用をもつ。簡単のため、1次元のイジングモデルを考える。頂点 i に配置されたスピンを s_i とする。このとき、スピンは、上向きするとき+1、下向きするとき-1の値をとる。さらに、 s_i, s_j 間の相互作用係数を J_{ij} 、スピン s_i にかかる磁場による自己エネルギーを h_i と定義する [11]。ここで、スピン数を n とするとイジングモデルのコスト関数 H は、

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - \sum_{i=1}^n h_i s_i \quad (1)$$

と定義される。実際の磁性体では、エネルギー関数 H を最小化するようにスピンの向きが変化する。図1に2次元イジングモデルの例を示す。スピンを左上から順に s_1, s_2, \dots と表していく。たとえば、 s_1 と s_5 間の相互作用係数は $J_{1,5}$ となる。

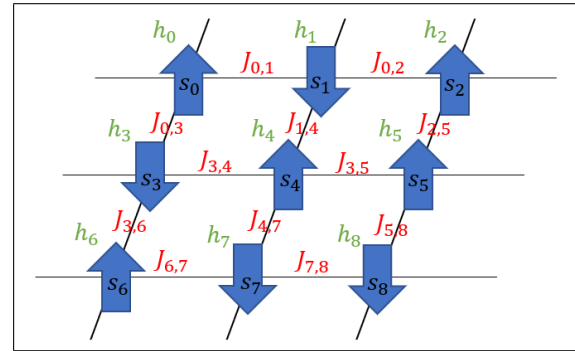


図1 次元のイジングモデル。

また、イジングモデルに等価なモデルとして QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) がある。QUBO の変数は 1 と 0 の二値を取り、変数の二次式で最適化したいコスト関数を表す。このとき、イジングモデルのスピン変数 s_i と QUBO のスピン変数 x_i とは以下のように変換できる。

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

組み合わせ最適化問題をイジングモデルで表すか QUBO で表すかは、問題による。デジタル回路では、QUBO を用いると、スピン変数が 1 の場合のみを加算すればよいので演算回数を削減できる可能性がある。

2.2 組合せ最適化問題

組合せ最適化問題は、多変数関数の最大値や最小値とそのときの各変数の値の組合せを求める問題である。しかし、組合せ最適化問題の取りうる組合せは問題が大きくなるにつれて指数関数的に増大する。高速な解決方法としてアニーリングマシンを用いたものがある。本章では、最大カット問題と巡回セールスマン問題の2つを例に、アニーリングマシンの適用時に必要な QUBO での定式化について述べる。

2.2.1 最大カット問題

最大カット問題は、ノード集合 V とエッジ集合 E からなるグラフ $G = (V, E)$ において、 V を 2 つの頂点集合に分割したときのカットされるエッジの重みの総和を最大化する問題である。

アニーリングマシンを用いてノード数 N の最大カット問題を解くとき、要素数 N の spin 配列を用いる。QUBO モデルにおいて、ノード集合を頂点集合 A, B に分割するとき、各ノードに対応する以下の 2 値変数を導入する。

$$x_i = \begin{cases} 1 & (x_i \in A) \\ 0 & (x_i \in B) \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 x_i, x_j 間において同じ頂点集合に属する場合のエネルギー値は 0、異なる頂点集合に属する場合、 x_i, x_j 間の枝の重み $d_{i,j}$ を加えたものを最大化するようにエネルギーを定式化すると、

$$H = - \sum_{(i,j) \in E} d_{i,j}(x_i + x_j - 2x_i x_j) \quad (4)$$

となる。エネルギーが最小の場合に異なる頂点集合間の枝の重みの総和が最大となることに注意する。最大カット問題は、次節で述べるペナルティ項を含まないことが特徴である。

2.2.2 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題は、 N 個の都市が存在し、各都市間の距離が与えられているとき、全ての都市を1度だけ訪問する経路の中で総距離が最短となる経路を求める問題である。

アニーリングマシンを用いて N 都市の巡回セールスマン問題を解くとき、 N 行 N 列の N^2 個の QUBO 配列を用いる。行は「何番目に都市を訪問するか」を、列は「どの都市を訪問するか」を表す。したがって、配列 i 行 j 列目の要素 $x_{i,j}$ は、「 i 番目に都市 j を訪問するかどうか」を表すこととなる。QUBO モデルにおいて、 i 番目に都市 j を訪問するとき、配列 i 行 j 列目の要素を+1 とする。また、訪問しないときには、配列の各要素を 0 とする。

巡回セールスマン問題におけるエネルギー関数 H の基は都市を訪問した場合の総距離である。前述した配列の t 行 a 列目の要素を $x_{t,a}$ 、都市 a と b 間の距離を $d_{a,b}$ とすると、エネルギー関数 H は以下のように表される。

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

しかし、この L だけでは全ての変数が 0 で $L=0$ となる状態に収束する。言い換えると、どの都市にも訪問しない状態である。これを防ぐために、以下の 2 つの制約条件を追加する。

- (1) 同時刻に一つの都市のみを訪問する。
- (2) すべての都市を一度ずつ訪問する。

これは、配列において

- (1) 同じ行に 1 は 1 つしかない。
- (2) 同じ列に 1 は 1 つしかない。

と言い換えることができる。したがって、制約条件 (1) は

$$\sum_t \left(\sum_a x_{t,a} - 1 \right)^2 \quad (6)$$

と表せ、制約条件 (2) は

$$\sum_a \left(\sum_t x_{t,a} - 1 \right)^2 \quad (7)$$

と表せる。この制約条件を破るものがある場合、ペナルティとしてエネルギー関数 H が増加するようにする。

したがって、エネルギー関数 H は、

$$H = \sum_{t,a,b} d_{a,b} x_{t,a} x_{t+1,b} + A \sum_t \left(\sum_a x_{t,a} - 1 \right)^2 + A \sum_a \left(\sum_t x_{t,a} - 1 \right)^2 \quad (8)$$

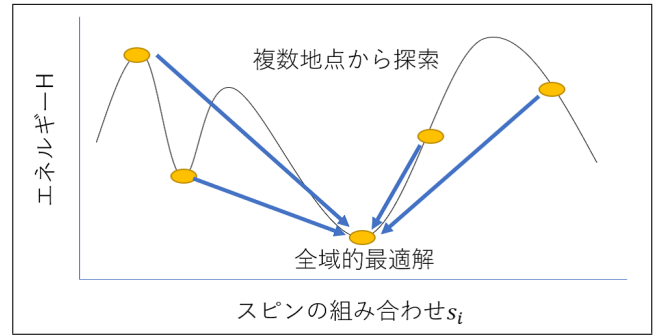


図 2 量子アニーリングの遷移図。

と書き換えられる。このときの A は、正の定数であり、 A により制約条件の強さを決定する。

3. 疑似量子アニーリングによる求解

量子モンテカルロ法を用いた疑似量子アニーリングとそのアルゴリズムについて述べる。

3.1 疑似量子アニーリング

疑似量子アニーリングでは、暫定的なスピンの初期状態から系全体がエネルギーコストが小さくなる方向に解の探索を行う。実際には量子モンテカルロ法を用いてランダムにスピンを選択しトグルさせた場合のエネルギー差分を計算して、トグルさせるかどうかを決定する。ここでは、乱数生成にメルセンヌ・ツイスタ法を用いた。疑似量子アニーリングではシミュレーテッドアニーリングにおける熱揺らぎに加えて、量子揺らぎを用いて最適解を探索する。これらの揺らぎにより、局所最適解への落ち込みを防ぐ。さらに、トロッタと呼ばれる複数のスピン集合を扱う。トロッタとは、量子特有の複数の状態の重ね合わせを表すものである。隣接するトロッタ間では、横磁場に対応する相互作用係数に基づいた相互作用が発生する [11]。量子アニーリングでは、式 (1) にトロッタ間の横磁場の項を加える。量子アニーリングでのイジングモデルのエネルギー関数 H は以下のように表される。

$$H = -\frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n J_{ij} s_{i,k} s_{j,k} - \sum_{i=1}^n h_i s_{i,k} \right) - \frac{1}{2\beta} \text{logcoth} \left(\frac{\beta\Gamma}{m} \right) \sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n s_{i,k} s_{i,k+1} \quad (9)$$

m はトロッタ数を表している。トロッタ数が m であるとき、異なる m 個の状態から探索を行う。 k はトロッタのインデックスを表し、 β は温度、 Γ は横磁場の強さを表す。最初の項は各トロッタのエネルギーの総和を m で和って平均値をとったものである。また、第二項が横磁場に対応し、隣り合うスピン間が同じである場合にエネルギーが小さくなる。

Algorithm 1 提案手法の疑似プログラム.

```

Define: num_T=number.trotter, num_S=number_spin,
          num_O=number_outer_loop, num_I=number_inner_loop
Variable: s[num_T][num_S], TRO_E[num_T],
            min_E, bests[num_S]
1: for  $k = 0, n < \text{NUM.T}$  do
2:   calculate TRO_E[k]
3: end for
4: for  $m = 0, m < \text{NUM.O}$  do
5:   for  $n = 0, n < \text{NUM.I}$  do
6:     calculate  $\Delta H$ 
7:     if  $\Delta H < 0$  then
8:       toggle spin
9:       TRO_E[k] +=  $\Delta H$ 
10:      if TRO_E[k] < min_E then
11:        update min_E, bests
12:      end if
13:    else if probability  $\exp(-\beta\Delta H)$  is TRUE then
14:      toggle spin
15:      TRO_E[k] +=  $\Delta H$ 
16:    end if
17:  end for
18: end for
19: output min_E, bests

```

表 1 初期パラメータ.

パラメータ	問題	値
β		4.1
Γ		1.0
Γ 変化率		0.99
トロツタ数		32
アウターループ	max cut	1200
	TSP	1000
インナーループ	max cut	1000000
	TSP	100000
ペナルティ係数	max cut	なし
	TSP	都市間最大距離の 2 倍

し、乱数の生成にはメルセンヌ・ツイスタ法を用いた。評価に際して用いたパラメータを表 1 に示す。アウターループ、インナーループに関しては基底状態への遷移が終わるような十分な大きさに設定した。

5.2 処理時間と改善率

提案手法を用いた疑似量子アニーリングの有無による処理時間と解の精度を評価した。処理時間に関しては、3.2 節の 2. ~8. 間の経過時間とした。解の精度に関しては、アニーリング自体がヒューリスティックなアルゴリズムゆえ、疑似乱数の seed 値や横磁場や温度等のパラメータ設定により導出解のエネルギーが大きく変化する。したがって、アニーリングにおいて精度を定義することはかなり難

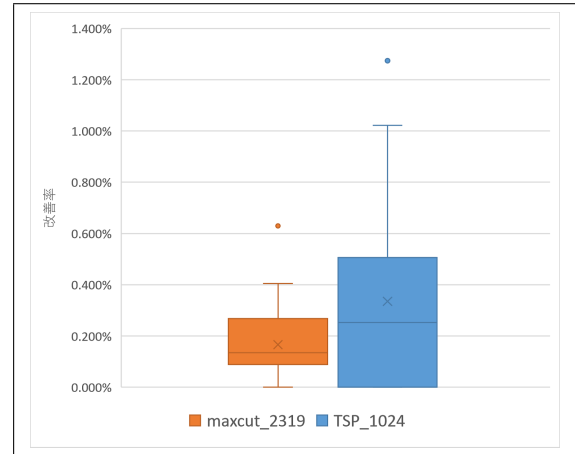


図 4 改善率の箱ひげ図.

しい。本実験では、提案手法の実装による有用性を検証するため、横磁場や温度等のパラメータを固定し、疑似乱数の seed 値を 0~50 の整数値で変化させてアニーリングを行った。各 seed 値での提案手法あり、なしのエネルギーを測定した。ここで、改善率 R を提案手法ありのエネルギー値 H_a 、提案手法なしのエネルギー値 H_b を用いて

$$R = \frac{H_a - H_b}{H_b} \quad (10)$$

のように定義し、全体での改善率の平均値・改善率の最大値を算出した。中間解の平均更新回数、平均処理時間、算出した改善率の平均値、改善率の最大値表 2 に示す。

巡回セールスマン問題においては、処理時間を増加させることなく、解精度の向上が見られた。最大カット問題においては、0.4 秒 (0.57%) 程度の処理時間の増加が見られた。これは、中間解の更新回数が多くなり、中間解の書き換えに時間がかかったからだと考える。中間解の更新回数が多くなった原因として、各問題を表現するエネルギー関数が関係してくる。2.2.1, 2.2.2 節で述べたが、巡回セールスマン問題においては、制約条件を付与したことによるペナルティ項が含まれるが、最大カット問題ではペナルティ項はない。これにより、巡回セールスマン問題最適解付近の障壁が高くなり、局所最適解からの脱出が難しくなるため、更新回数が減ったのだと考える。反対に、最大カット問題では、障壁が低く、局所最適解の脱出が容易となり、更新回数が増えたのだと考える。

また、平均改善率・最大改善率はともに巡回セールスマン問題のほうが最大カット問題に比べて良い結果となった。これも巡回セールスマン問題のペナルティ項に起因しており、スピン状態のわずかな変化で大きなエネルギー値の変化が発生するからだと考える。

また、各 seed 値での解の改善率を縦軸にとり、箱ひげ図で表したものを図 4 に示す。箱の下端上端はそれぞれ第 1 四分位数、第 3 四分位数を示す。箱の中線は中央値を示し、×印は平均値を示す。各箱ひげ図の上部にある点は、統計

表 2 処理時間と改善率の結果.

問題	中間解更新回数 [回]	平均処理時間 (なし)[s]	平均処理時間 (あり)[s]	平均改善率 [%]	最大改善率 [%]
maxcut_2319	763	76.02	76.45	0.17	0.63
TSP_1024	81	38.33	38.25	0.33	1.27

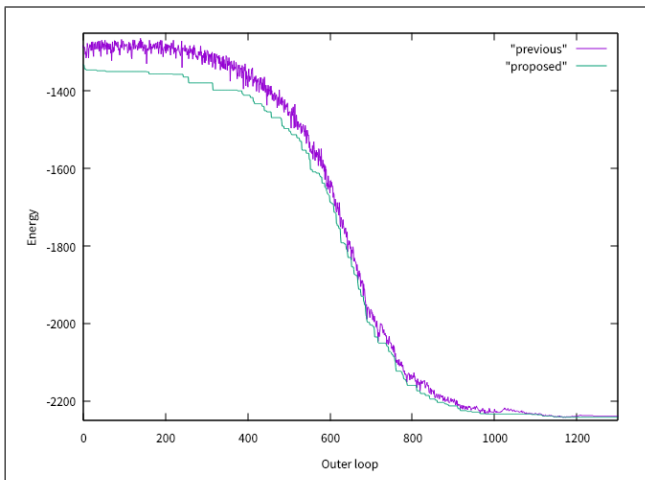


図 5 最大カット問題の最小エネルギー遷移.

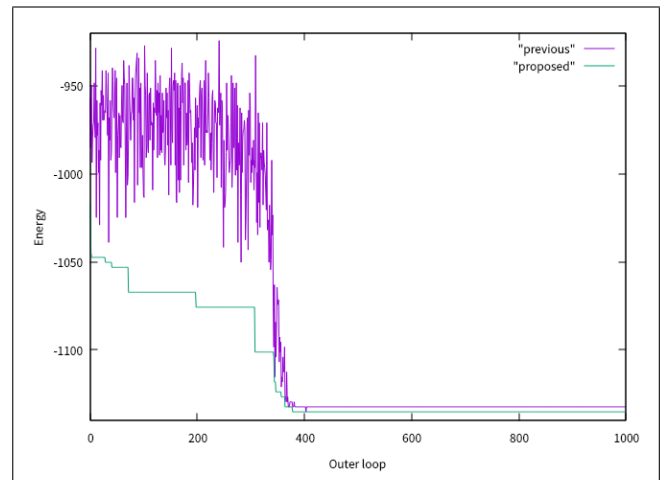


図 6 巡回セールスマン問題の最小エネルギー遷移.

ソフトの都合上外れ値としてプロットしてる. 巡回セールスマン問題はエネルギー関数にペナルティ項を持つため, 最適解付近の障壁が高いので 1 度障壁を越えると改善率が高くなる. しかし, 障壁を越えることができないと, 改善率が低いままアニーリングが終了してしまう. 最大カット問題はエネルギー関数にペナルティ項を含まないので最適解付近の障壁が低い. したがって, 高い確率で障壁を越えることができる. これらの要因により, 巡回セールスマン問題は下方方向に分散が大きく, 最大カット問題は中心部分に分散が小さくなる結果になったと考えられる.

5.3 エネルギーの遷移経過

提案手法あり・なしでのアウターループ毎でのエネルギーの最小値をプロットしたものを図 5, 6 に示す. 図 6 から, 基底状態への遷移が十分に終了した問題に対しても解の改善が見られた. また, 最大カット問題においては, アウターループ 1000 回付近で発生している, エネルギーの一時的な上昇が起こっている. このような場合に, 本提案手法は最良解を保持することで, アニーリングを中断した場合でも, それまでの最良解を導出できる面で有用だと考える.

6. おわりに

本稿では, 量子アニーリングにおいて中間解の保持を用いた解の精度向上手法を提案し, 最大カット問題と巡回セールスマン問題で適用を行った. 結果として, 両問題において処理時間の増加を抑えた解の改善を確認した. ペナルティ項を持つ巡回セールスマン問題は最大カット問題に

比べて平均改善率が高かったが, 改善率の分散は大きい結果となった. 反対に, 最大カット問題は巡回セールスマン問題に比べて平均改善率自体は低かったが, 改善率の分散が小さい結果となった.

次に, 本提案手法のあり・なしの実装でアウターループ毎での最小エネルギー値を比べると, 基底状態への遷移が十分に終了した問題に対しても解の改善が見られた. また, アニーリング終盤のエネルギーの一時的な上昇が起こった場合にも, 本提案手法は最良解を保持することで, アニーリングを中断した場合でも, 問題なく最良解を導出できる面で有用だといえる.

今後は, 他の組合せ最適化問題への適用を行い, 本手法の有用性を調べていく.

謝辞 早稲田大学・情報システム研究室の柳澤政生教授, 史又華教授, 吉増敏彦教授はじめメンバーの皆様には日頃からのご討議を心から感謝します. 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] 山岡 雅直, 吉村 地尋, 林 真, 奥山 拓哉, 青木 秀貴, 水野 弘之, “AI の基礎研究 イジング計算機”, Hitachi Vol.98, pp.272-273, Apr. 2016.
- [2] 大関 真之, “量子アニーリングによる組合せ最適化”, オペレーションズリサーチ, Vol. 63, Issue 6, pp.326-344, Jun. 2018.
- [3] 西森 秀稔, 大関 真之, “量子アニーリングの基礎”, 共立出版, pp. 1-26, May. 2018.
- [4] Takuya Okuyama, Masato Hayashi, and Masanao Yamamoto, “An Ising computer based on simulated quantum annealing by path integral Monte Carlo method,” Proc.

- of IEEE International Conference on Rebooting Computing, pp. 1-6, Nov. 2017.
- [5] H. M. Waidyasooriya, Y. Araki, and M. Hariyama, “Accelerator architecture for simulated quantum annealing based on resource-utilization-aware scheduling and its implementation using opencl,” in International Symposium on Intelligent Signal Processing and Communication Systems (ISPAC), 2018, pp. 336-340.
- [6] 塚本 三六, 高津 求, 松原 聡, 田村 泰孝, “組み合わせ最適化問題向けハードウェアの高速化アーキテクチャー”, Fujitsu Vol.68, pp.8-14, Jun. 2017.
- [7] Hasitha Muthumala Waidyasooriya, Yusuke Araki, and Masanori Hariyama, “Accelerator Architecture for Simulated Quantum Annealing Based on Resource Utilization Aware Scheduling and its Implementation Using OpenCL,” Proc. of 2018 International Workshop on Smart Info-Media Systems in Asia (SISA 2018), pp. 335-340, Dec. 2018.
- [8] Pierre Berge, Baptiste Cavarec, Arpad Rimmel, and Joanna Tomasik, “Restricting the search space to boost Quantum Annealing performance,” Proc. of IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp.1-8, Nov. 2016.
- [9] Hasitha Muthumala Waidyasooriya, and Masanori Hariyama, “Highly-Parallel FPGA Accelerator for Simulated Quantum Annealing,” Proc. of IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing, DOI: 10.1109/TETC. 2019.2957177, pp. 1-11, Nov. 2019.
- [10] 田中 宗, 棚橋 耕太郎, 本橋 智光, 高柳 慎一, “量子アニーリングの基礎と応用事例の現状” 低温工学 Vol. 53 No. 5, pp. 287-294, Jun. 2018.
- [11] 金丸 翔, 於久 太祐, 多和田 雅師, 田中 宗, 林 真人, 山岡 雅直, 柳澤 政生, 戸川 望, “イジング計算機によるスロット配置問題の解法,” 信学技法 VLD2018-34, Vol. 118, No. 83, pp.161-166, June 2018.