

2 スピン同時フリップを並列試行可能なシミュレーテッド アニーリング手法の検討

兵藤 旭^{1,a)} 神保 聡¹ Thiem Van Chu¹ 劉 載勳¹ 本村 真人¹ 川村 一志¹

概要: 組合せ最適化問題を解く一手法として、イジングモデルを利用したイジング計算機に高い関心が寄せられている。その計算原理として知られる SA (Simulated Annealing) や DA (Digital Annealing) は、1 ステップに 1 スピンフリップを基本とするため、制約条件を含む問題を解く過程で局所最適解から脱出させるために多くのステップ数を要する点に課題がある。本稿では、本課題の解決に向け、2 スピン同時フリップを並列試行可能な SA の拡張アルゴリズムを提案する。提案手法を用いてグラフ彩色問題を解いた結果、SA や DA に比べ、最適解に到達するのに必要なステップ数を削減することに成功した。

1. はじめに

組合せ最適化問題は社会の様々な場面に存在し、その解決を目指したイジング計算機の研究が活発に進められている [1–3]。イジング計算機を使用する際には、前処理として解きたい問題をイジングモデルに変換する [4]。イジングモデルとは、 N 個のスピン $\sigma_i \in \{+1, -1\}$ を変数とし、スピン状態 $\sigma = \{\sigma_i\}^N$ によってエネルギー H を与えるモデルである。イジング計算機の役割は、最小のエネルギーを与えるスピン状態 (= 基底状態) を高速に求めることであり、その代表的な計算原理として SA (Simulated Annealing) や DA (Digital Annealing) [3] がある。これらは 1 スピンフリップを繰り返しながら基底状態を探索する。

制約条件を含む組合せ最適化問題をイジングモデルに変換する場合、そのエネルギー関数を $H = H_{\text{obj}} + \alpha H_c$ で与える。ここで、 H_{obj} と H_c はそれぞれ目的関数と制約条件に対するエネルギー関数、 α は正の定数である。 H_c には、制約条件を完全に満たしたスピン状態 (実行可能解) で $H_c = 0$ 、それ以外で $H_c > 0$ となるような関数を用いる。一般に、 H_{obj} の最小化に先立って $H_c = 0$ が達成されるよう α には大きな値を用いる。この問題をイジング計算機で解く際に、SA や DA 等に基づいて探索を進めると、ある実行可能解から別の実行可能解に遷移する過程で必ずエネルギーが高い状態を経由する必要がある、基底状態探索に多くのステップ数を要する。

以上の背景に基づき、本稿では、2 スピン同時フリップの並列試行を組み込んだ SA の拡張アルゴリズムを提案す

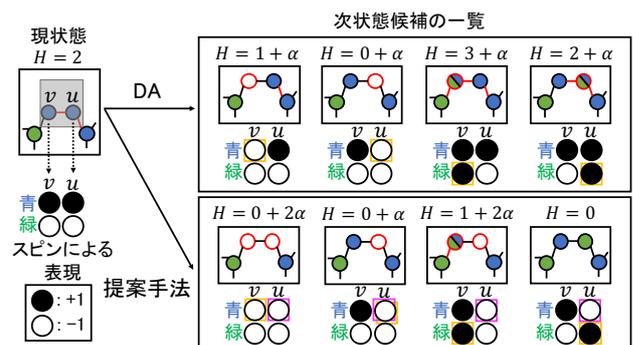


図 1 DA ならびに提案手法に基づく次スピン状態の並列試行。簡単のため、青・緑の 2 色で塗り分けるグラフ彩色問題を対象に、頂点 v, u に関与するスピンのフリップにより遷移可能な状態のみを例示している。赤枠の頂点は制約条件違反、赤色の辺は隣り合う頂点と同じ色で塗られていることを示す。 H は網掛け部みのエネルギー値を表す。DA は 1 スピン (黄枠) のフリップで遷移可能なスピン状態を、提案手法はランダムに選択した 1 スピン (ピンク枠) と他の 1 スピン (黄枠) の同時フリップで遷移可能なスピン状態を並列試行する。

る。提案手法により、ある実行可能解から別の実行可能解への遷移が発生しやすくなり、基底状態探索に要するステップ数が大幅に削減されるものと期待される。

2. 提案手法

DA は、1 スピンフリップで遷移可能なスピン状態を並列試行することで、SA よりも高速に基底状態探索を実現する手法である。図 1 (上段) では、グラフ彩色問題を例に、DA によって並列試行される 4 通りのスピン状態を図示している*1。グラフ彩色問題の制約条件は各頂点を 1 色

*1 グラフ彩色問題をイジングモデルに変換する方法は [4] を参照。

¹ 東京工業大学 (Tokyo Institute of Technology)

^{a)} hyodo.akira@artic.iir.titech.ac.jp

Algorithm 1 提案手法

入力: ランダムなスピン状態, スピン間相互作用, 外部磁場, ステップ数 t_{\max} , 疑似温度のスケジューリング $T(t)$

出力: 最適化されたスピン状態

```

1: for  $t = 1$  to  $t_{\max}$  do
2:   疑似温度を設定;  $\beta = 1/T(t)$ 
3:   ランダムに 1 スピンを選択; スピン  $i$ 
4:   for  $j = 1$  to  $N$  do
5:     スピン  $i, j$  が同時にフリップしたときのエネルギー変化を計算;  $\Delta H_{i,j}$ . ただし,  $i = j$  の場合はスピン  $i$  が単独でフリップしたときのエネルギー変化とする;  $\Delta H_{i,i} = \Delta H_i$ 
6:     フリップ確率を計算;  $P_{i,j} = 1/(1 + \exp(\Delta H_{i,j}\beta))$ 
7:     乱数を生成;  $\text{rand} = [0, 1)$ 
8:     スピン  $i, j$  のフリップを判定;  $\delta_{i,j} = P_{i,j} > \text{rand}$ 
9:   end for
10:   $\delta_{i,j} = 1$  を与える  $j$  をランダムに 1 個選び, スピン  $i, j$  の同時フリップによりスピン状態を更新
11: end for
    
```

で塗ることであり, 目的関数は隣り合う頂点をなるべく異なる色で塗ることである. すなわち, 図中の現状態は制約条件を満たしているが, 目的関数が最小でない. この現状態を出発点とした場合, DA によって遷移可能な次状態候補に実行可能解は存在せず, 特に低温時 (=エネルギーを上昇させる遷移が発生しにくい探索フェーズ) において局所解からの脱出が難しくなる.

これに対し, 提案手法では, ランダムに選択した 1 スピンを起点とする 2 スピン同時フリップにより遷移可能なスピン状態をを並列試行する. 図 1 (下段) に, 提案手法によって並列試行される 4 通りのスピン状態を示す. この 4 状態には (ランダムに選択されたスピンに関係なく) 制約条件を満たす解が必ず含まれ, 実行可能解から別の実行可能解へ直接遷移することを可能にする. 提案手法の探索手順を Algorithm 1 に詳述する.

3. 評価

提案手法 (Algorithm 1) を Python3 で実装し, 154 頂点を 8 色で塗り分けるグラフ彩色問題 5-FullIns.3 [5] を解くことで評価した. 本評価で使用したパラメータを表 1 に示す. 比較対象として SA と DA のシミュレータを用意し, 提案手法と同じ問題を同じパラメータ設定の下で解いた. 評価の指標には平均エネルギーと基底状態到達率を用いた. グラフ彩色問題では, すべての頂点間が異なる色で塗られたとき $H = 0$ となることから, 100 回の試行回数内, $H = 0$ となった解の割合を基底状態到達率として算出した.

シミュレーション結果を表 2 に示す. この結果から, ステップ数を 10^5 とした場合の SA, DA の基底状態到達率はそれぞれ 0%, 18% であるのに対し, 提案手法では 97% と大きく上回っていることを確認できる. 基底状態到達率が 95% 以上となるステップ数に着目すると, 提案手法では 10^5 , DA では 10^7 である. 以上より, 提案手法を用い

表 1 アニーリングパラメータ

項目	設定値
スピン数	1232
ステップ数	10^4 – 10^7
疑似温度の初期値	1.0
疑似温度の最終値	0.1
試行回数	100

表 2 シミュレーション結果

ステップ数		10^4	10^5	10^6	10^7
平均エネルギー	SA	40.44	14.33	6.29	3.35
	DA	3.39	1.09	0.20	0.00
	提案手法	0.68	0.03	0.01	0.04
基底状態到達率	SA	0%	0%	0%	0%
	DA	1%	19%	80%	100%
	提案手法	41%	97%	99%	96%

ることで従来の SA や DA よりも少ないステップ数で基底状態に到達可能であることを確認した.

4. おわりに

本稿では, 2 スピン同時フリップを並列試行可能な SA の拡張アルゴリズムを提案し, グラフ彩色問題を用いて評価した. シミュレーション結果から, 提案手法が従来の SA や DA よりも高速に最適解に到達可能であることを確認した. 今後は, 提案手法の特性を理解して幅広く活用することを目指し, 他の組合せ最適化問題での評価を進めるとともに, アルゴリズムの実行過程で 2 スピンの選択が本来の意図通りに発生しているのかを観測したいと考えている.

謝辞 本研究の一部は JST CREST JPMJCR18K3 の支援を受けて実施したものである.

参考文献

- [1] K. Yamamoto, K. Ando, N. Mertig, T. Takemoto, M. Yamaoka, H. Teramoto, A. Sakai, S. Takamaeda-Yamazaki, and M. Motomura, "STATIC: A 512-spin 0.25M-weight full-digital annealing processor with a near-memory all-spin-updates-at-once architecture for combinatorial optimization with complete spin-spin interactions," in *2020 IEEE International Solid-State Circuits Conference (ISSCC)*, 2020, pp. 138–140.
- [2] M. Yamaoka, C. Yoshimura, M. Hayashi, T. Okuyama, H. Aoki, and 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.
- [3] M. Aramon, G. Rosenberg, E. Valiante, T. Miyazawa, H. Tamura, and H. G. Katzgraber, "Physics-inspired optimization for quadratic unconstrained problems using a digital annealer," *Frontiers in Physics*, vol. 7, pp. 48:1–14, 2019.
- [4] A. Lucas, "Ising formulations of many NP problems," *Frontiers in Physics*, vol. 2, pp. 1–15, 2014.
- [5] S. Gualandi and M. Chiarandini, "Graph Coloring Benchmarks," <https://sites.google.com/site/graphcoloring/vertex-coloring>.