5J-07

QUBO問題における制約重み分割による解の高精度化に関する一検討

小野田誠 †1　小松一彦 †2　熊谷政仁 †3　佐藤雅之 †3　小林広明 †3

東北大学工学部機械知能航空工学科 †1　東北大学サイバーサイエンスセンター †2
東北大学情報科学研究科 †3

1 はじめに

近年，さまざまな組合せ最適化問題を 2 値変数で構成される 2 次形式の制約無し最適化問題である QUBO(Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 問題に変換し，イジングマシンによってに高速に解くことが注目されている．一方で制約関数を含む QUBO 問題では，目的関数のみからなる QUBO 問題と比較して解の探索精度が低下してしまうことが知られている．

そこで本研究では制約を含む QUBO 問題において制約重みを目的関数に応じて分割する手法を提案する．提案手法をワンホット制約をもつ巡回セールスマン問題に適用して，その性能評価を行う．

2 制約を含む QUBO 問題

QUBO 問題は，0 または 1 をとるバイナリ変数 x によって表されるハミルトニアン H を最小化する問題である．イジングマシンでは，組合せ最適化問題を QUBO 問題に変換することで解く．制約を含む問題では，ラグランジュの未定乗数法を用いて，制約重みを乗じ制約関数として組み込むことで，QUBO 問題に変換する．

例えば，代表的な制約付き問題である巡回セールスマン問題 (TSP) は，複数の都市を移動する際の移動距離を最小にする経路を求める問題である. 式 (1) で示す QUBO 表現 [1] では，都市 i を時間 t に通るかをバイナリ変数 $x_{i,t}$ で表し移動距離を最小化する．

$$H = \sum_{t=1}^{N}\sum_{i,j=1}^{N} d_{i,j}x_{i,t}x_{j,t+1} + \lambda_t\sum_{t=1}^{N}(1-\sum_{i=1}^{N}x_{i,t})^2 + \lambda_i\sum_{i=1}^{N}(1-\sum_{t=1}^{N}x_{i,t})^2. \quad (1)$$

N は都市数を表す．式 (1) の第 1 項が TSP の移動距離を表す目的関数であり，第 2, 3 項がラグランジュの未定乗数法により組み込む制約関数で，(1) の λ を制約重みと呼ぶ．第 2 項では各時刻で訪れる都市は一ヶ所だけである時間制約を，第 3 項では各都市を一度だけ訪問する都市制約を表しており，制約を満たす場合にはそれぞれの項は 0 になる．このような複数のバイナリ変数がある際にそのうち 1 つだけが 1 であるという制約をワンホット制約と呼ぶ.

制約付き問題において制約を満たす解を生成するためには，制約に違反した時にハミルトニアンが増加する定式化が必要である．したがって，制約重みは比較的大きな値に設定することで，制約に違反するような探索を行わせないようにする必要がある．TSP では制約重みは都市間距離の最大値以上の値であれば制約違反を防ぐことが知られている [1].

制約付き QUBO 問題では，目的関数のみからなる QUBO 問題と比較し，探索精度が悪化することが知られている．大きな値に設定した制約重みによって，目的関数と制約関数の変動が大きくなり，探索が難しくなるためである．目的関数と制約関数の和である QUBO 問題を最適化するには，局所的にも，大域的にも最適化を行わなければならず，制約を含む QUBO 問題は解くのが困難な最適化問題になってしまう．そのため制約重みは出来るだけ小さい値に設定するのが望ましいとされる．TSP においては，制約重みを適切に減らすことで解の品質が向上することが示されている [2].

3 提案手法

本研究では，ワンホット制約をもつ QUBO 問題に対する提案手法を説明する．

3.1 制約重みの分割

ワンホット制約について提案手法では，制約重みを全体で同じ値にするのではなく，項ごとに分割する．具体的には，式 (2) に示すようにワンホット制約にかか

A Study on Constraint Weight Partitioning of QUBO probrems for Highly Accurate Solutions
Makoto Onoda†1, Kazuhiko Komatsu†2, Masahito Kumagai†3, Masayuki Sato†3, Hiroaki Kobayashi†3
Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Tohoku University†1
Cyberscience Center, Tohoku University†2
Graduate School of Information Sciences, Tohoku University†3

る制約重み λ を，λ_a に分割する．これによって，λ_a は a に応じて，異なる値を設定することが可能になる．

$$H = \lambda \sum_a (1 - \sum_b x_{a,b})^2, \; H = \sum_a \lambda_a (1 - \sum_b x_{a,b})^2 \qquad (2)$$

制約重みを分割することで，制約を満たし，かつ分割せずに与える場合より小さい制約重みを設定することも可能である．これによって，解の探索精度の向上が期待できる．

3.2 TSP における制約重みの分割

本節では制約重み分割を TSP に適用した場合について説明する．式 (1) の第 2, 3 項より，時間制約と都市制約のどちらとも制約重みを分割し与えることが可能である．分割して与える制約重みの値について検討すると，都市制約については，分割する各項は都市に対応するため都市ごとに設定することが可能である．すなわち都市制約の制約重み $\lambda_i = max(d_{i=i_0,j})$ として都市 i ごとに制約重みを分割し設定する．一方で，時間制約 λ_t については分割は可能であるが，分割する各項は時刻に対応しており，時刻 t と $d_{i,j}$ が独立であるため異なる値を設定することはできず，従来通り $\lambda_t = max(d_{i,j})$ を設定する．

4 評価結果・考察

4.1 実験環境

提案手法を評価するために，イジングマシンとして NEC Vector Annealer を用いた．実験に用いる TSP のデータセットは，TSPLIB における burma14, bays29, eil51, eil76 の四つのデータである．実験において，全てのデータセットおよび手法で初期の逆温度は 10 に，終期の逆温度は 150 にし，探索の分割数を 500 にした．burma14, bays29 では探索回数を 1000 回に，eil51, eil76 では 10000 回にした．全ての実験は 100 回の試行を行った．評価に用いる指標は都市間移動距離の合計であり，低いほど解の品質が良いことを示す．

4.2 評価結果．考察

図 1 に評価結果を示す．横軸が用いたデータセットで，縦軸が移動距離であり解の品質を示す．移動距離は，TSPLIB で与えられた各データセットの最適解により正規化した．同図からわかるように全てのデータセットにおいて提案手法は，従来手法よりも低い移動距離を算出できており，解の品質が向上している．また全てのケースにおいて制約違反を起こさなかった．従って，提案手法では制約違反を防いだ上で，解の探索精度を向上することに成功しているといえる．これにより，都市制約を分割して設定したことで，制約違反を防ぎつつ従来手法よりも小さな制約重みを設定できていることがわかる．都市制約重みの値を見てみると，従来手法では burma14, bays29, eil51 , eil76 のそれぞれで 1261, 509, 86, 85 であり，提案手法の都市制約の平均値では 945, 384, 62, 64 である．いずれのケースにおいても低い制約重みを設定できており，これによって高い解の品質を得られたと考えられる．

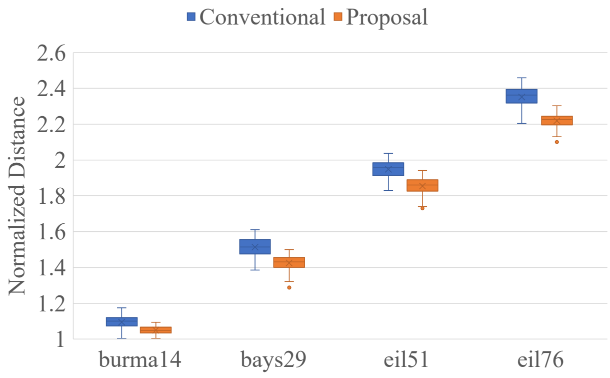

図 1: 提案手法と従来手法の比較．

5 おわりに

本研究では，ワンホット制約をもつ問題において制約重みを分割する手法を提案した．ワンホット制約をもつ代表的な問題である TSP を用いて評価を行った結果，提案手法は制約違反を起こすことなく，移動距離が低くなることがわかった．今後の課題として，提案手法を巡回セールスマン問題だけでなく他の組み合わせ最適化問題に適用することが挙げられる．

謝辞

本研究の一部は，文部科学省「次世代領域研究開発」(高性能汎用計算機高度利用事業費補助金)「量子アニーリングアシスト型次世代スーパーコンピューティング基盤の開発」，文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」新計算原理調査研究，科研費基盤 A #19H01095，科研費基盤 C#20K11838，科研費特別研究員奨励費 #22J22908 を受けて実施している．

参考文献

[1] Andrew Lucas. Ising formulations of many np problems. *Frontiers in physics*, p. 5, 2014.

[2] Takehara, et al. A multiple coefficients trial method to solve combinatorial optimization problems for simulated-annealing-based ising machines. In *2019 IEEE 9th International Conference on Consumer Electronics (ICCE-Berlin)*, pp. 64–69, 2019.