



令和3年10月29日

組み合わせ最適化問題をアダプティブ・バルク・サーチで高速に解く QUBO ソルバーの GPU 実行環境を無償公開します

情報提供

【本研究成果のポイント】

- QUBO（二次無制約二値最適化）問題を解くことにより、資源配置やスケジューリングなどのさまざまな最適化を行えることが知られており、そのため多くの企業・大学が QUBO 問題を解く QUBO ソルバーの開発を競っています。
- アダプティブ・バルク・サーチは、GPU の計算能力を最大限に引き出すように設計された QUBO ソルバーで、さまざまな局所探索手法を同時に実行します。
- QUBO 問題によって適した局所探索手法が異なるため、実行経過を観察しながらその QUBO 問題に適した局所探索手法を求め、重点的に実行します。
- アダプティブ・バルク・サーチによる QUBO ソルバーの実行環境を、研究評価目的に限り無償公開します。
- 利用者は、QUBO 問題の行列を公開 GPU サーバーにアップロードすることにより、アダプティブ・バルク・サーチが求めた解を得ることができます。
- 公開 GPU サーバー URL : <https://qubo.cs.hiroshima-u.ac.jp/>

【概要】

広島大学大学院先進理工系科学研究科の中野浩嗣教授らの研究チームは、株式会社 NTT データと共同で、QUBO 問題を GPU で解く新しい計算方式「アダプティブ・バルク・サーチ」を開発し、2020 年 8 月に国際会議 International Conference on Parallel Processing (ICPP) で発表しました。この計算方式の改良を、発表後も続けてきました。主な改良点は次の通りです。

- さまざまな解探索手法を同時実行して、良解を求めると予想される解探索手法を自動的に選択。
- それまでに発見した良解を保持する解プールを複数個用いて独立に探索し、解プールが互いに近づくように少しずつ探索空間を絞っていくことにより、暫定最良解の近傍をなるべく網羅的に探索する。
- 最大 128k(131, 072)ビットの大規模全結合 QUBO 問題に対応可能。

改良の結果、QUBO 問題の種類によっては、改良前には 1 時間実行しても得られなかった最適解が 1 分程度で得られるようになりました。この改良版 QUBO ソルバーを、広島大学大学院先進理工系科学研究科コンピュータシステム研究室に設置した GPU サーバー（NVIDIA RTX A6000 GPU を 5 基搭載）で研究評価目的に限り無償公開します。利用者は、解きたい QUBO 問題をこの公開 GPU サーバーにアップロードすることができます。QUBO ソルバーは 5 基の GPU をフルに活用してその QUBO 問題の解を探索し、得られた解を利用者に提示します。

【背景】

QUBO 問題とは、大きさ $n \times n$ の上三角行列 $W=(W_{ij})$ が与えられたときに、エネルギー関数 $E(X)=\sum W_{ij}x_i x_j$ の値が最小となる 0 と 1 だけの値をとる n 要素のベクトル $X=(x_i)$ を求める問題です。下の図は大きさ 5×5 の QUBO 問題の例です。例えば、ベクトル X が $(0, 1, 1, 0, 1)$ ときのエネルギー値は、 x_1, x_2, x_4 の 3 つの要素が 1 なので、1、2、4 行目かつ 1、2、4 列目の要素（赤）の合計で、 -7 になります。

ベクトル X の大きさ 5 なので、ベクトルは(0, 0, 0, 0, 0)から(1, 1, 1, 1, 1)までの $2^5=32$ 通りありますが、エネルギー値 $E(X)$ が -7 より小さくなるベクトル X は存在しないので、この(0, 1, 1, 0, 1)が最適解となります。 n が大きくなると、ベクトルの組み合わせの数 2^n は巨大な値となり、そのなかからエネルギー値が最小となる最適解を求めるのは困難になります。そのような場合は最適解の保証はないけれど、エネルギー値がなるべく小さい解（良解）を求める方法が用いられます。

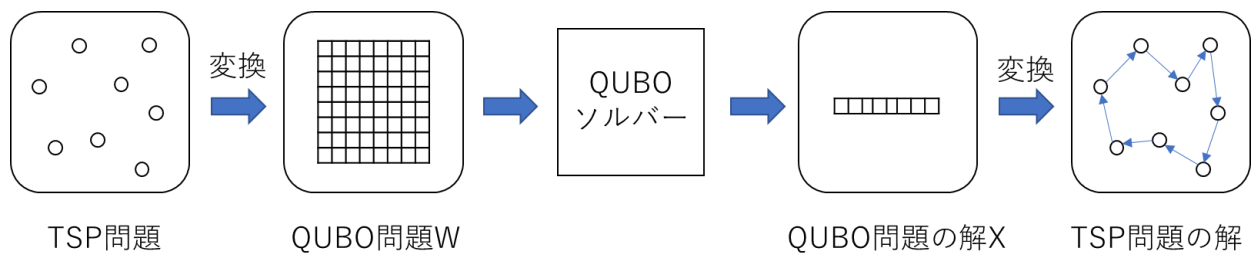
	0	1	2	3	4
0	-3	-2	7	5	2
1	0	8	-3	3	-7
2	0	0	4	-3	-5
3	0	0	0	8	3
4	0	0	0	0	-4

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
0	1	1	0	1

大きさ 5 X 5 の QUBO 問題 W の例

最適解

生産活動や社会活動のさまざまな場面において、効率化やコスト削減のために、資源配置やスケジューリングの最適化を目的する組み合わせ最適化問題として扱い、最良解を求めたい場面が多くあります。ほとんどの組み合わせ最適化問題は QUBO 問題に等価変換することができます。与えられた QUBO 問題に対して最適解もしくは良解を求めることができる QUBO ソルバー（QUBO 問題を解くアルゴリズムやシステム）があれば、それをを用いて多くの問題を解決することができます。例えば、複数の都市が与えられたときに、そのすべての都市を最短移動距離で巡る訪問順を求める巡回セールスマン問題（TSP 問題）は QUBO ソルバーを用いて下の図の手順で解くことができます。まず、TSP 問題の都市の配置を QUBO 問題の行列 W に変換します。変換された QUBO 問題を QUBO ソルバーで解き、良解 X を求めます。その良解 X を TSP 問題の訪問順に変換します。用いられる 2 つの変換は簡単な計算で行うことができるので、ほぼ QUBO ソルバーの処理時間で TSP 問題を解くことができます。また、QUBO 問題の解のエネルギー値が小さいほど TSP 問題の解も小さくなります。よって、短い処理時間で良解を求めることができる QUBO ソルバーがあれば、TSP 問題の良解（移動距離の短い順回路）を短時間で求めることができます。TSP 問題に限らず、さまざまな組み合わせ最適化問題は、QUBO 問題に同様に変換することにより、QUBO ソルバーを用いて解くことができます。

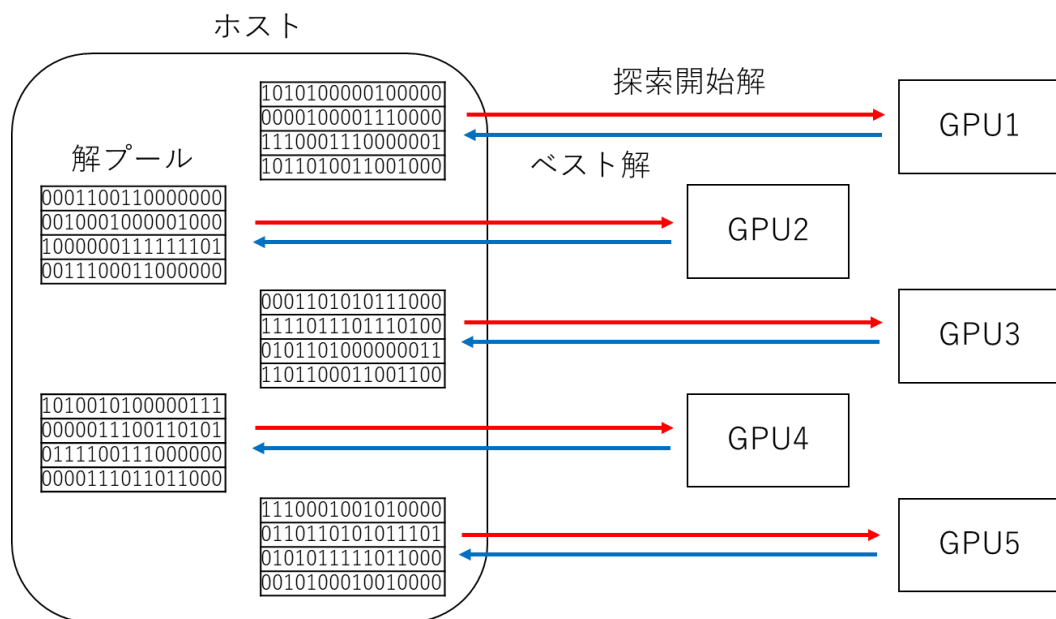


QUBO ソルバーが多くの組み合わせ最適化問題を解く鍵になるので、より大規模な QUBO 問題に対してより良い解をより高速に求める QUBO ソルバーの開発を多く企業や大学が競っています。例えば、カナダの D-Wave 社の量子アニーリングマシンは、量子効果に基づいた素子を用いた QUBO ソルバー専用量子計算機であり、最大 5600 ビット程度の QUBO 問題を高速に解くことができます。また、日本国内の複数の大手企業が、ASIC、FPGA、レーザー光などを用いた QUBO ソルバー専用計算機の開発を競っています。また、QUBO ソルバーを現実的な組み合わせ最適化に適用する実証実験も数多く行われています。

【研究成果の内容】

広島大学の中野浩嗣教授らの研究チームと株式会社 NTT データは、共同研究の一環として、GPU や FPGA を用いた QUBO ソルバーの開発を行ってきました。他の QUBO ソルバーと同様に、基本的にエネルギー値 $E(X)$ がより小さくなるようにベクトル X を 1 要素だけ変更する処理を繰り返す局所探索を行ないます。さまざまな局所探索手法がありますが、QUBO 問題の入力の特徴によって、適した局所探索手法は異なります。アダプティブ・バルク・サーチでは、QUBO 問題の入力行列に対して、適した局所探索手法を自動的に求め、その局所探索手法を重点的に用いることにより、良解を短時間で求めるとというのが基本アイデアです。

今回無償公開するアダプティブ・バルク・サーチによる QUBO ソルバーは、複数の GPU を搭載した GPU サーバーで動作します。各 GPU に対応して、ホストは複数の解を保持する解プールをホストのメモリに用意します。QUBO ソルバーの実行開始時に、解プールの解はランダムなベクトルで初期化します。ホストは解プールの解をランダムに選び、遺伝的アルゴリズムの突然変異や交叉などの操作を行って改変したものを探索開始解として GPU に送ります。探索開始解を受け取った GPU は、そこを中心とする局所探索を始めます。このとき、焼き鈍し法、タブー探索、ブレイクアウト局所探索などを含めたさまざまな局所探索方法からひとつを選んで解探索を行います。一定の解探索を行ったあと、探索の過程で得られたベスト解をホストに送り返し、ホストはこれが良解であれば、解プールの中の最下位の解と交換します。これを繰り返し、全体の最良解を探索結果として出力します。



この QUBO ソルバーは、GPU が返すベスト解がどの解改変方法と局所探索法により得られたかを記録しておき、その記録をもとに、より良いベスト解を得た方法を高頻度で選択するようになっていきます。よって、さまざまな解改変方法と探索手法を用意しておき、それを適切に選ぶことで、多種の QUBO 問題に対応できるようになっています。

また、解プールは優れた解を残すため、時間とともに解プールの中の最良解とそのごく近傍の良解ばかりが解プールを占めるようになってしまいます（遺伝的均一化）。すると、探索範囲が狭くなり、解プールから離れたところにある解を無視するようになってしまい、良解が得られなくなります。本 QUBO ソルバーは、複数の解プールを用いることにより、唯一の最良解とその近傍解だけに集約されてしまうのを防いでいます。また、異なる解プール間での交叉や、解プール間を移動しながら探索する手法も取り入れ、解プールをゆっくりと近づけることにより、現時点で得られている最良解の近傍をなるべく網羅的に探索するようになっていきます。これにより、ペナルテ

ィ項により多くの深い局所最適解を持ち、真の最適解の発見が困難な QUBO 問題に対しても、優れた探索性能を発揮します。

本 QUBO ソルバーは、GPU の計算リソースを最大限に活用し、128k(131,072) ビットの大規模全結合 QUBO 問題に対応可能です。特に密 QUBO 問題（行列にゼロ要素が少ない QUBO 問題）に対して高い性能を発揮します。QUBO 問題の行列の各要素のビット数は 16 / 32 / 64 ビットから選ぶことができます。ソルバー内部の演算精度は必要に応じて 32 / 64 ビットから選択することができます。これまでに発表されてきたさまざまな QUBO ソルバーの中でも最大規模・最大精度のものとなります。

【今後の展開】

より大規模な QUBO 問題や疎 QUBO 問題（行列に非ゼロ要素が少ない QUBO 問題）に対しても高い性能を発揮できるように改良するとともに、実問題に適用し、実証実験を行っていきます。

【用語説明】

●GPU

Graphics Processing Unit の略で、グラフィック処理のための集積回路です。計算処理能力の高さから、グラフィック処理以外のさまざまな処理を高速化することができますため、多くのスーパーコンピュータに搭載されています。

●遺伝的アルゴリズム

複数の解からなる集合に対して、解を遺伝子とみなして、突然変異や交叉などの操作を行ない、よりよい解（遺伝子）を残してく解探索アルゴリズム。

●局所探索法

現在の解 X から 1 要素だけ変更した近隣解への移動を繰り返す。基本的には解が改善する場合は移動し、悪化する場合は移動しない。

●焼き鈍し法

局所探索法であるが、悪化する場合の移動も許容し、局所最適解（近隣の中で最適な解）に留まってしまいうことを避ける手法。

●タブー探索

局所探索法であるが、過去の探索経路をある程度覚えておいて、同じ解への移動を避けることにより、局所最適解に留まらないようにする手法。

●ブレイクアウト局所探索

局所最適解に留まってしまっているときに、現在の解を強制的に遠くまで移動させ、局所最適解から脱出する探索手法。

【発表情報】

国際会議名：International Conference on Parallel Processing (ICPP) 2020

論文タイトル：Adaptive Bulk Search: Solving Quadratic Unconstrained Binary Optimization Problems on Multiple GPUs

著者：Ryota Yasudo、Koji Nakano、Yasuaki Ito、Masaru Tatekawa、Ryota Katsuki、Takashi Yazane、Yoko Inaba

DOI 番号：10.1145/3404397.3404423

公開 GPU サーバー URL：<https://qubo.cs.hiroshima-u.ac.jp/>

【お問い合わせ先】

大学院先進理工系科学研究科 中野 浩嗣 Tel：082-424-5363 FAX：082-424-5363 E-mail： nakano@hiroshima-u.ac.jp
--

発信枚数：A4版 4枚（本票含む）