



令和5年10月12日

量子アニーラーで順列型組合せ最適化問題を解くためのイジングモデルのサイズと要求分解能を大幅に削減する画期的な設計手法を開発

【本研究成果のポイント】

- 量子アニーラーで順列型組合せ最適化問題を解く場合に用いられる順列生成イジングモデルのサイズと要求分解能を大幅に削減する設計手法（dual-matrix domain-wall法）を開発しました。
- これまでよく用いられてきた単純な one-hot 法により n 要素の順列生成を行うイジングモデルのサイズは $n^3 - n^2$ 個であり、また要求分解能は $2n - 4$ でした。
- dual-matrix domain-wall 法を用いると、サイズを $6n^2 - 8n$ 、要求分解能を 2 に、それぞれ大幅に削減することができます。
- 300 頂点の無向グラフに対する巡回セールスマン問題に dual-matrix domain-wall 法を適用した場合、それを量子アニーラーで解くためのイジングモデルのサイズを従来の one-hot 法より 25 分の 1 以下に削減することができました。

【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 データグループと共同で、順列生成イジングモデルのサイズと要求分解能を大幅に削減する設計手法（dual-matrix domain-wall法）を開発しました。イジングモデル（*1）と呼ばれる複数のスピン変数の二次式は、量子アニーラー（*2）に埋め込み（*3）、量子焼きなまし（アニーリング）を行うことにより、イジングモデルの評価値をなるべく最小化するようなスピン変数へのスピン値の割り当てを求めることができます。量子アニーラーの規模と計算精度に制限があるため、イジングモデルのサイズと要求分解能（*4）をなるべく小さくすることが望まれています。

巡回セールスマン問題（*5）などの順列型組合せ最適化問題を量子アニーラーで解くには、まず、順列を生成する順列生成イジングモデルを構成要素として含むイジングモデルに変換します。 n 要素 $0, 1, \dots, n-1$ の順列を生成するイジングモデルではスピン変数からなる $n \times n$ の行列 $S = (s_{i,j})$ を用い、one-hot 表現（*6）で順列を表します。順列の i 番目が要素 j のときに $s_{i,j} = +1$ となります。図 1 は 5×5 行列による順列の one-hot 表現の例で、巡回セールスマン問題の解の訪問順 $[3, 1, 0, 2, 4]$ を表しています。

スピン変数の行列 $S = (s_{i,j})$ が、順列を表す one-hot 表現を格納していることの必要十分条件は、行列 S のすべての行と列が $+1$ を 1 個ずつ格納していることです。このような条件を満たす行列 S を最適解としてもつイジングモデルを順列生成イジングモデルと呼びます。幅広く用いられている従来の one-hot 法では、各行、各列の合計がすべて $-(n-2)$ であることを利用する次の式を用いています。

$$\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \left((n-2) + \sum_{j=0}^{n-1} s_{i,j} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \left((n-2) + \sum_{i=0}^{n-1} s_{i,j} \right)^2$$

この数式を展開して得られる二次式が順列生成イジングモデルとなります。このイジングモデルのサイズは $n^3 - n^2$ であり、要求分解能は $2n - 4$ となります。

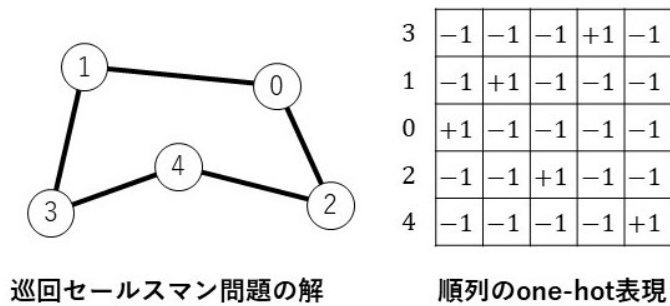


図 1: 巡回セールスマン問題の解[3,1,0,2,4]とそれを one-hot 表現で表す大きさ 5×5 の行列

今回開発した dual-matrix domain-wall 法によるイジングモデルでは、サイズを $6n^2 - 8n$ 、要求分解能を2に、それぞれ大幅に削減しました。これにより、順列型組合せ最適化問題をイジングモデルに変換し、量子アニーラーで解を求める場合に、より大きな問題を高い精度で取り扱うことができますようになります。

【背景】

社会における多くの問題は、制約の下で複数の選択肢から最適な組合せを見つける組合せ最適化問題として考えることができます。その中でも、順列型組合せ最適化問題は、 $n!$ 通りある順列の中から最適なものを選ぶ問題で、巡回セールスマン問題や作業順の最適化など、多くのアプリケーションがあります。しかし、 $n!$ 通りの膨大な組合せの中から最適なものを見つけるのは容易ではなく、膨大な計算時間を要します。

近年、量子効果を利用して組合せ最適化問題の解を求める量子アニーラーが注目されています。量子アニーラーを用いて組合せ最適化問題を解く手順は以下の通りです。まず、組合せ最適化問題を等価なイジングモデルに変換します。次に、変換されたイジングモデルを量子アニーラーに埋め込みます。このステップでは、量子アニーラーがイジングモデルの評価値を最小とする解を探索する準備を行います。その後、一定時間の量子焼きなまし（アニーリング）を繰り返し行うことにより、イジングモデルの評価値を最小化する解を探索します。最終的に、求めたイジングモデルの解を逆変換することで、もとの組合せ最適化問題の解が得られます。この手法により、従来の古典的なアルゴリズムでは扱いが難しかった複雑な組合せ最適化問題の解を、量子アニーラーが高速かつ効率的に求めることが期待されています。

順列型組合せ最適化問題を量子アニーラーで解くためには、 $n \times n$ の行列 $S = (s_{i,j})$ を用いて、順列を one-hot で表現する方法が幅広く用いられています。しかし、各行各列の合計が $-(n-2)$ となる条件を利用する従来の one-hot 法では、順列生成イジングモデルのサイズが $n^3 - n^2$ と非常に多くなります。その結果、埋め込みに用いる量子アニーラーのセル数が膨大なものとなり、取り扱える順列型組合せ最適化問題のサイズ (n の値) が小さく制限されていました。また、要求分解能は $2n - 4$ であるため、 n が大きくなると量子アニーラーの計算精度の限界を超え、最適解を得ることが困難になります。

整数を表すのに domain-wall 表現 (*7) を用いれば、one-hot 表現に比べて、イジングモデルのサイズを削減できることが知られています。QUBO モデル (*8) で domain-wall 表現を順列生成に適用する方法が提案されています (Philippe Codognet: Domain-Wall / Unary Encoding in QUBO for Permutation Problems. Proc. of QCE 2022: 167-173)。この方法 (all-different domain-wall 法) をイジングモデルに適用すると、サイズと要求分解能は、それぞれ $\frac{1}{2}n^3 - \frac{3}{2}n$ と $n - 1$ に小さくすることができますが、約半分の削減にとどまっています。

【研究成果の内容】

今回開発した dual-matrix domain-wall 法は、順列生成のためのイジングモデルであり、one-hot 表現で順列を表すスピン変数の $n \times n$ 行列 $S = (s_{i,j})$ に加え、 $n \times (n-1)$ 行列 $A = (a_{i,j})$ と $(n-1) \times n$ 行列 $B = (b_{i,j})$ を追加します。変数の個数が約 3 倍増加することになりますが、イジングモデルのサイズを $6n^2 - 8n$ 個に、要求分解能を 2 に、それぞれ大幅に削減することができます。

図 1 の順列の one-hot 表現において、各行が one-hot 表現であるとみなした場合、得られる整数列 $[3, 1, 0, 2, 4]$ は順列を表しています。一方、各列を one-hot 表現とみなして得られる整数列 $[2, 1, 4, 0, 3]$ は逆順列 (* 9) を表しているとみなせません。dual-matrix domain-wall 法では、行列 A の各行が domain-wall 表現で整数を表し、それを並べた整数列が順列を表します。同様に、行列 B の各列が domain-wall 表現で整数を表し、それを並べた整数列が逆順列を表します。それらが行列 S の one-hot 表現による順列、逆順列とそれぞれ一致している場合に最適解になるように、イジングモデルを次のように設計します。

まず、次の 3 つの行列を導入します。

- ・ $\Delta S = (\Delta s_{i,j}) : \Delta s_{i,j} = s_{i,j} + 1$ (大きさ $n \times n$)
- ・ $\Delta A = (\Delta a_{i,j}) : \Delta a_{i,j} = a_{i,j-1} - a_{i,j}$ (大きさ $n \times (n-1)$)
- ・ $\Delta B = (\Delta b_{i,j}) : \Delta b_{i,j} = b_{i-1,j} - b_{i,j}$ (大きさ $(n-1) \times n$)

ただし、 $a_{i,-1}$ と $b_{-1,j}$ は +1、 $a_{i,n}$ と $b_{n,j}$ は -1 とします。

これらの行列はスピン変数の行列でなく、スピン変数の行列 S, A, B から計算される行列です。次の条件を満たせば、スピン変数の行列 S に one-hot 表現による順列が格納されます。

- (1) 行列 A の各行が domain-wall 表現
- (2) 行列 B の各列が domain-wall 表現
- (3) ΔS と ΔA が等しい
- (4) ΔS と ΔB が等しい

これらの条件を全て満たす場合に評価値が最小になるよう、イジングモデルを設計します。

$$\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (\Delta a_{i,j})^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (\Delta b_{i,j})^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i,j} - \Delta a_{i,j})^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i,j} - \Delta b_{i,j})^2$$

この式は $s_{i,j}$ 、 $a_{i,j}$ 、 $b_{i,j}$ を変数とする二次式に展開することができ、得られた二次式が順列生成イジングモデルとなります。4 つの総和項が上の (1) から (4) の条件にそれぞれ対応します。4 つの条件を満たすとき、4 つの総和項のそれぞれが最小値 $2n$ 、 $2n$ 、 0 、 0 を取ります。したがって、このイジングモデルが最小値 $4n$ をとるとき、行列 S に one-hot 表現による順列が格納されています。図 2 はスピン変数の行列 S, A, B が格納する値の例と、その場合の行列 ΔS 、 ΔA 、 ΔB の各要素の値を示しています。(1) ~ (4) の条件をすべて満たしていることが確認できます。このイジングモデルの二次項の個数は $6n^2 - 8n$ 、要求分解能は 2 となり、従来の one-hot 法による順列生成イジングモデルより大幅な削減となっています。

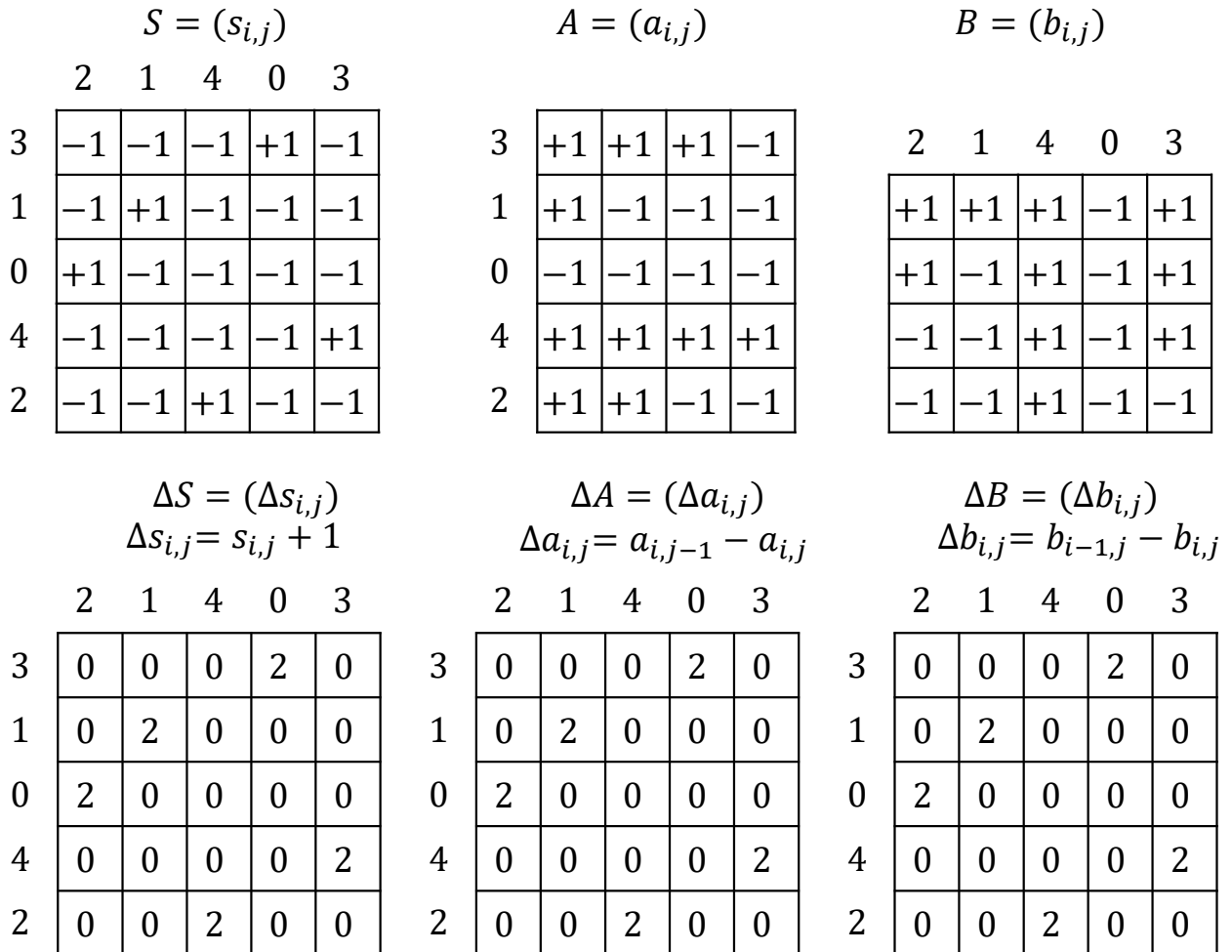


図 2 : Dual-matrix domain-wall 法によるイジングモデルの最適解の例。この最適解は順列[3,1,0,4,2]とその逆順列[2,1,4,0,3]を表している。

順列型組合せ最適化問題には、例えば、巡回セールスマン問題、グラフ同型問題、二次割当問題などがあります。順列生成イジングモデルはこれらの問題に適用可能です。例えば、無向グラフの巡回セールスマン問題 (*10) では図 3 の重み付き無向グラフが与えられたときに、すべての頂点を一度ずつ訪問する最短巡回を求めます。図 3 では、巡回順を表す順列[0,1,4,8,...,3]が最適解になります。図 4 のグラフは、このような接続関係が平面の重み付き無向グラフについて、巡回セールスマン問題を解くイジングモデルを生成したときのサイズを表しています。グラフの頂点数が多くなると、従来の one-hot 法ではサイズが急激に増加します。all-different domain-wall 法を用いることにより、サイズが約半分に節約できています。一方、dual-matrix domain-wall 法は、頂点数の増加にともなうサイズの増加がこれら 2 つの方法に比べ極めて緩やかであり、無向グラフが頂点数 300 のときは、従来の one-hot 法に比べて 25 分の 1 以下に削減できています。

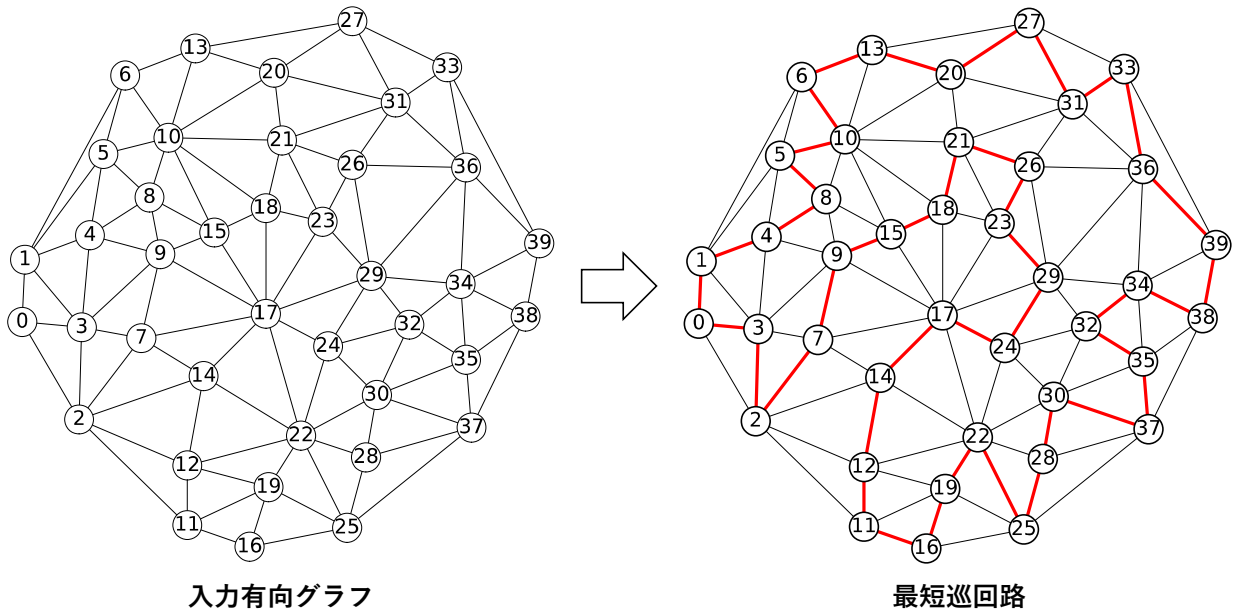


図 3：40 頂点の有向グラフと最短巡回路

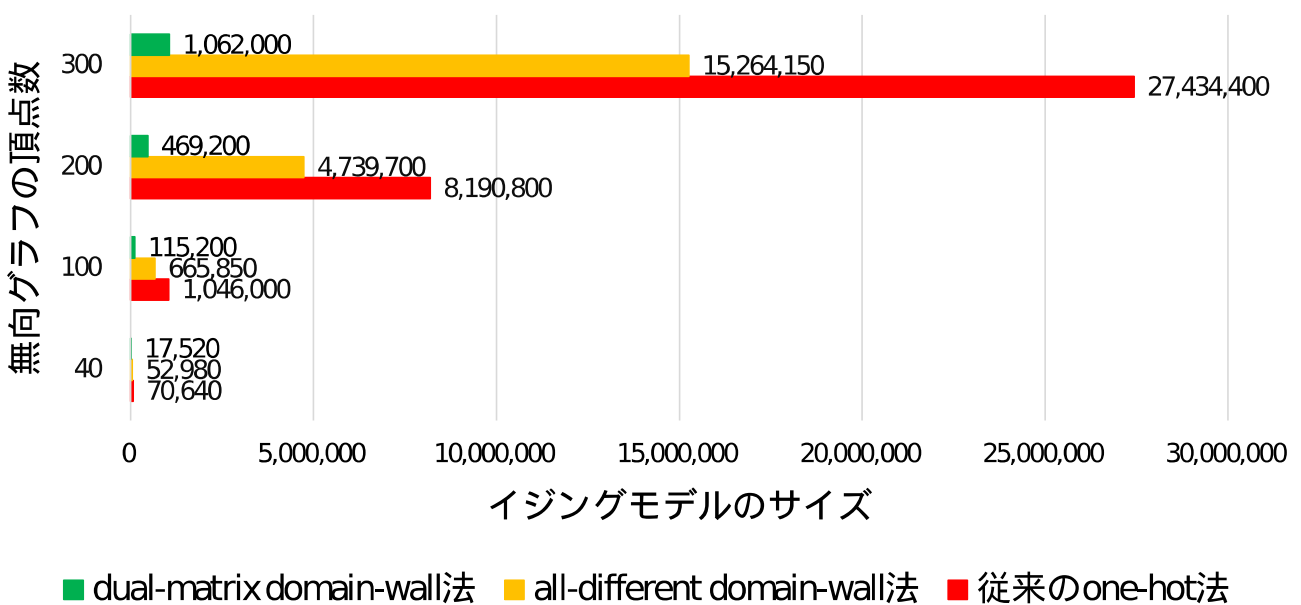


図 4：無向グラフの巡回セールスマン問題を解くイジングモデルの二次項の個数

なお、dual-matrix domain-wall 法の技術内容は特許出願済みです。また、論文プレプリントでは、部分順列生成 (*11) への dual-matrix domain-wall 法の拡張や、二次割当問題、部分グラフ同型問題、マッチング問題などへ適用した場合の二次項の個数、最新の量子アニーラー D-Wave Advantage のペガサスグラフに順列生成イジングモデルを埋め込んだ場合に使用するセル数の評価を行っています。

【今後の展開】

順列型組合せ最適化問題は多くのアプリケーションがあるにもかかわらず、それを解くためのイジングモデルはサイズと要求分解能が大きくが大きいと、実際の量子アニーラーを用いて最適解を得るのは困難でした。今回開発した dual-matrix domain-wall 法は、これらの課題を解決する大きなブレイクスルーと言えます。ただし、現時点での量子アニーラーはまだ規模が小さく、計算精度も十分ではないため、従来の古典計算機を用いた問題解法を凌駕するには、量子アニーラーの大規模化と高性能化が待たれます。一方、それまでの代替として、量子効果に基づかず、イジング

モデルの解を求める疑似量子アニーラーの研究が盛んに行われています。我々の研究グループでも GPU を用いた疑似量子アニーラー ABS2 (<https://abs2.cs.hiroshima-u.ac.jp/>) を開発しており、dual-matrix domain-wall 法を含めた様々な手法を用いて組合せ最適化問題の高速解法を探求していく予定です。

【用語説明】

*1 イジングモデルとグラフ表現

イジングモデルは、 -1 または $+1$ の値をとる複数のスピン変数の二次式です。例えば、4変数 s_0, s_1, s_2, s_3 のイジングモデル

$$s_0s_1 - 2s_0s_2 - s_1s_2 + s_1s_3 - 2s_2s_3 + s_0 - 2s_1 + s_2 + 3s_3$$

は5つの二次項 ($-2s_0s_2$ など) と4つの一次項 ($3s_3$ など) から構成されています。また変数を頂点、二次項を辺としてグラフで表すと図5のようになります。このイジングモデルは $s_0 = s_2 = s_3 = -1, s_1 = +1$ のとき、最小値 -12 をとる最適解となります。また、二次項の個数、つまりグラフの辺の個数(この例の場合5)をイジングモデルのサイズと呼びます。

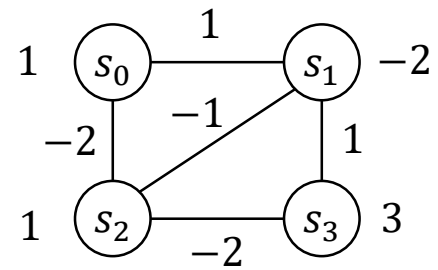


図5：イジングモデルのグラフ表現

*2 量子アニーラー

量子効果に基づいて、特定のグラフ形状をもつイジングモデルの解を求める量子コンピューターを「量子アニーラー」と呼びます。D-Wave Systems 社の開発した量子アニーラー D-Wave 2000Q は、2048 個のセルがキメラグラフの形状で接続されています。各セルをイジングモデルの変数とその一次項に対応付け、セル間の接続を二次項に対応付けるよう設定すると、そのキメラグラフの形状をもつイジングモデルの解を量子焼きなまし (アニーリング) により求めることができます。図6は128セルのキメラグラフを示しており、これを16倍の大きさ(縦横それぞれ4倍)に拡張したものが2048セルのキメラグラフです。

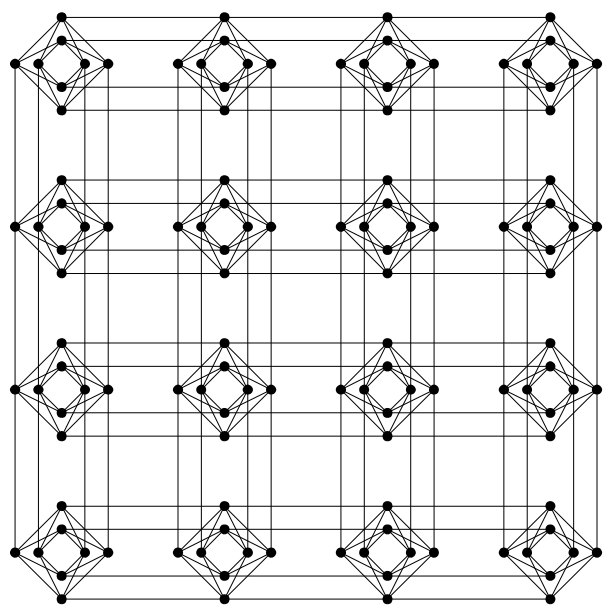
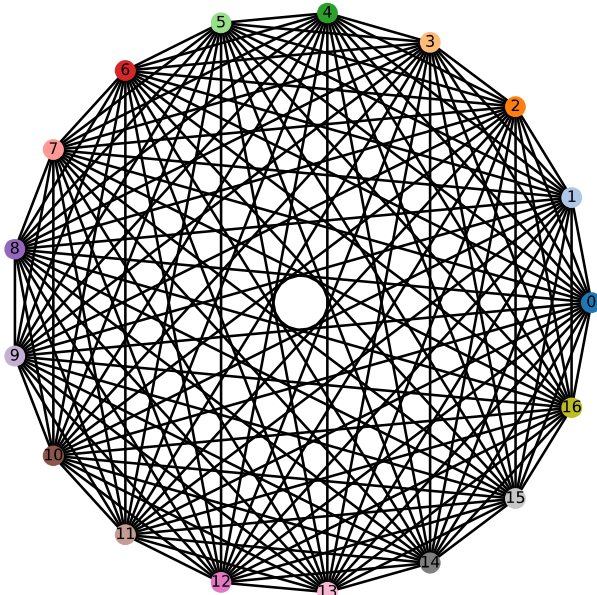


図6：128セルのキメラグラフ

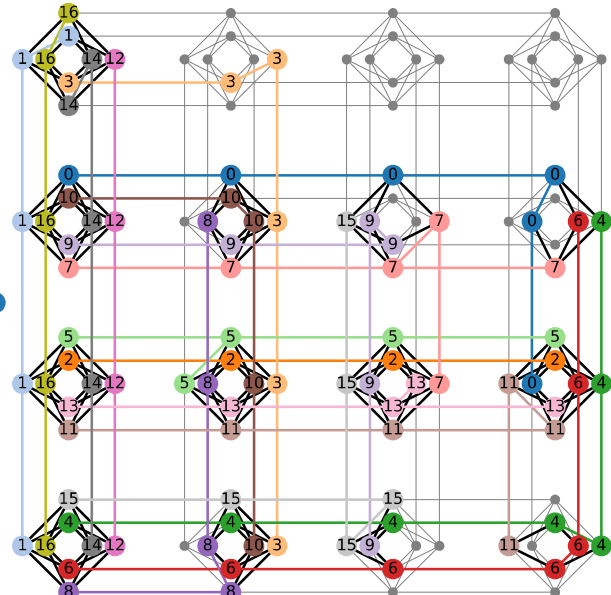
* 3 イジングモデルの量子アニーラーへの埋め込み

量子アニーラーD-Wave 2000Q でキメラグラフとは異なる形状のイジングモデルを扱う場合は、事前に埋め込みを行います。この埋め込みでは、イジングモデルの変数をキメラグラフのセルに対応付けます。対応付けは、イジングモデルの接続関係がキメラグラフ上で維持されるように定める必要があります。

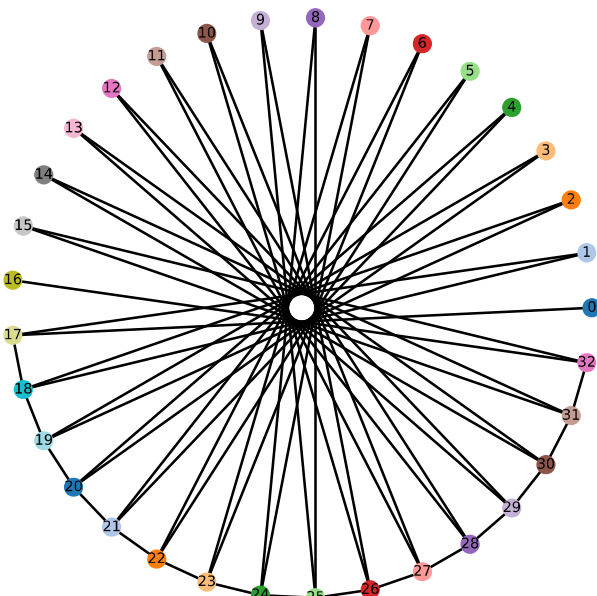
図 7 は、17 変数イジングモデルと 33 変数イジングモデルの 128 セルのキメラグラフへの量子アニーラーへの埋め込みをそれぞれ示しています。17 変数イジングモデルは、変数のすべての組合せに二次項を持つため、密なイジングモデルとなっています。一方、33 変数イジングモデルの各変数は最大で 4 つの二次項を構成しており、疎なイジングモデルです。変数とセルの対応は接続関係を維持するように定める必要があるため、イジングモデルの各変数がキメラグラフの複数のセルに割り当てられています。疎なイジングモデルの方が変数の個数は多いにもかかわらず、サイズ（二次項の個数）が小さいため、使用するセルの数はかなり少なくなっています。したがって、変数の個数よりもサイズを削減することが、埋め込みに必要となる量子アニーラーのセルの個数の節約につながります。



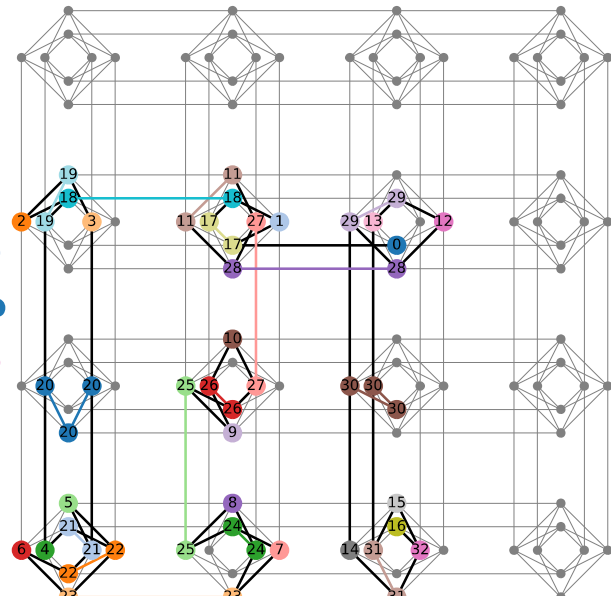
密なイジングモデル



密なイジングモデルの埋め込み



疎なイジングモデル



疎なイジングモデルの埋め込み

図 7：密な 17 変数イジングモデル（二次項の個数：136）と疎な 33 変数イジングモデル（二次項の個数：51）の 128 頂点キメラグラフ（右側）への埋め込み。例えば、疎なイジングモデルの変数 31 は、右側のキメラグラフでは 2 つのセルに割り当てられています。イジングモデルでは変数 31 は変数 14、15、30、32 と接続していますが、対応付けられたセルにおいてもこれらの接続が維持されています。

* 4 量子アニーラーの計算精度とイジングモデルの要求分解能

整数係数に限定したイジングモデルにおいて、係数の最大絶対値を要求分解能と呼びます。この値が大きいほど、量子アニーラーに高い計算精度を要求することになります。それは次のような係数圧縮が行われるためです。

実際の量子アニーラーで扱うイジングモデルの係数は例えば範囲が $-1.0 \sim +1.0$ というように範囲指定された実数値を設定できます。しかし、イジングモデルが量子アニーラーに要求する計算精度を正確に評価するために、あえてイジングモデルの各項の係数を整数に限定することが行われます。そのようなイジングモデルを量子アニーラーで扱う際には、整数係数の最大絶対値（要求分解能）で各係数を除する前処理を行います。これにより、係数を $-1.0 \sim +1.0$ の範囲に圧縮して、量子アニーラーで扱えるようにします。例えば、上記のイジングモデルの場合、要求分解能である 3 で除して次のようになります：

$$\frac{1}{3}s_0s_1 - \frac{2}{3}s_0s_2 - \frac{1}{3}s_1s_2 + \frac{1}{3}s_1s_3 - \frac{2}{3}s_2s_3 + \frac{1}{3}s_0 - \frac{2}{3}s_1 + \frac{1}{3}s_2 + s_3$$

同じ値で除しているため、最適解が変わることはありません。量子アニーラーの計算精度は限られているため、除する整数が大きくなると、絶対値の小さい係数や差の小さい 2 つの係数が現れることがあります。そのような小さい係数や係数の差を正しく取り扱うことができなくなるため、計算精度が限られた量子アニーラーでは最適解を得るのが困難になります。以上より、イジングモデルの係数の最大絶対値、つまり、要求分解能は小さい方が望ましいと言えます。現在の量子アニーラーの計算精度は 5 ～ 6 ビット程度と言われており、要求分解能は $2^5 = 32$ 程度が限界です。

* 5 巡回セールスマン問題

複数の都市が入力として与えられて、それらをすべて一度ずつ巡る訪問順で総巡回路長が最短のものを求める組合せ最適化問題。訪問順は都市の順列なので、順列型組合せ最適化問題です。

* 6 スピン値による one-hot 表現

0 から $n-1$ の整数を表すのに、 n 個のスピン値を用い、 k 番目が $+1$ 、他が -1 のとき、整数 k を表すとみなします。ここで、先頭は 0 番目であり、例えば、 $[-1, -1, -1, +1, -1]$ は 3 を表します。 n 個のスピン変数 s_0, s_1, \dots, s_{n-1} が one-hot 表現であるスピン値を格納するためのイジングモデルは、合計が $(-1) \times (n-1) + (+1) \times 1 = -(n-2)$ となることを利用して次の二次式で得られます。

$$\frac{1}{2} \left((n-2) + \sum_{j=0}^{n-1} s_j \right)^2 = \sum_{i=1}^{n-1} s_{i-1}s_i + (n-2) \sum_{i=0}^{n-1} s_i + \frac{1}{2}n^2 - \frac{3}{2}n + 2$$

n 個のスピン変数が one-hot 表現のとき、この式の評価値は最小値 0 となります。このイジングモデルのサイズは $\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$ であり、要求分解能は $n-2$ となります。また、図 1 の行列のように、 $n \times n$ の行列の各行が one-hot 表現で整数を表し、それらの整数が異なる場合、得られる整数列は順列となります。これを順列の one-hot 表現と呼びます。

* 7 スピン値による domain-wall 表現

0 から $n-1$ の整数を表すのに、 $n-1$ 個のスピン値を用い、先頭から k 番目までが $+1$ 、

残りが-1のとき、整数 k を表すとみなします。ここで、先頭は0番目であり、例えば、 $[+1, +1, +1, -1]$ は3を表します。 $n - 1$ 個のスピン変数 s_0, s_1, \dots, s_{n-2} が domain-wall 表現であるスピン値を格納するためのイジングモデルは、+1と-1 が隣り合っているとところが一箇所であることを利用して次の二次式で得られます。

$$\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (s_{i-1} - s_i)^2 = - \sum_{i=1}^{n-1} s_{i-1} s_i - s_0 + s_{n-2} + n - 2$$

ここで、 $s_{-1} = +1$ 、 $s_{n-1} = -1$ として左辺を展開しています。 $n - 1$ 個のスピン変数が domain-wall 表現のとき、 $s_{i-1} - s_i = 2$ となるのは一箇所、それ以外は0となります。よって、この式の評価値は domain-wall 表現のときに、最小値4となります。このイジングモデルのサイズは $n - 2$ であり、要求分解能は1となり、one-hot 表現に比べて大幅に小さくなります。

* 8 QUBO モデル

QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) は、0または1の値をとる複数のバイナリ変数の二次式です。イジングモデルとは変数がスピン値かバイナリ値を取る点のみ異なります。QUBO モデルとイジングモデルは、そのグラフ形状 (接続関係) を変えることなく等価に変換可能であり、また、変換によりサイズは変わりません。

* 9 順列と逆順列

n 要素の2つの順列 $P = [p(0), p(1), \dots, p(n - 1)]$ と $Q = [q(0), q(1), \dots, q(n - 1)]$ が全ての i について $q(p(i)) = i$ 成り立つ時、つまり、逆関数の関係になっている時、 P と Q は互いに逆順列です。

* 10 無向グラフの巡回セールスマン問題を解くためのイジングモデル

頂点数 n の無向グラフの頂点集合を $0, 1, \dots, n - 1$ とし、辺集合を E 、辺 $(u, v) \in E$ の長さを $w_{u,v}$ とします。また、辺の長さの最大値より十分大きい値 M を決めます。one-hot 表現による順列を格納するスピン変数の行列 $S = (s_{i,j})$ としたとき、次の式により、順列が定める訪問順による巡回路長を評価することができます。

$$\sum_{i=0}^{n-1} \sum_{(u,v) \in E} (w_{u,v} - M) \left((s_{i,u} + 1)(s_{i,v} + 1) + (s_{i,v} + 1)(s_{i,u} + 1) \right)$$

ただし、 $i' = (i + 1) \bmod n$ とします。 i 番目に訪問する頂点が u であり、その次の i' 番目に訪問する頂点が v である場合に $s_{i,u} = s_{i',v} = +1$ となります。よって、 $(s_{i,u} + 1)(s_{i',v} + 1) = 4$ が成り立ち、この式の評価値は、one-hot 行列が表す訪問巡の巡回路長の4倍から $4M$ をマイナスした値となります。式の中で $-M$ は、辺がない場合の係数を0として、辺がある場合にその長さに応じて負の値とするためです。これにより辺のない訪問巡を選ばなくなります。この式を展開して得られるイジングモデルと順列を表す行列 $S = (s_{i,j})$ を生成するイジングモデルをあわせることにより、最短巡回路を求めるためのイジングモデルを得ることができます。

* 11 部分順列

n 個の要素から m 個 ($m < n$) の要素を重複なく選んで並べる順列。例えば、 $n = 5$ 、 $m = 3$ のとき、 $0, 1, 2, 3, 4$ から3個選んで並べた $[3, 0, 1]$ は部分順列です。

【発表情報】

出願特許：特願2023-125848 「モデル生成装置、モデル生成方法、順列生成システム、およびプログラム」

論文プレプリント：「Dual-Matrix Domain-Wall: A Novel Technique for

Generating Permutations by QUBO and Ising Models with Quadratic Sizes』
<https://arxiv.org/abs/2308.01024>

※Technologies に招待論文として採択決定・掲載予定。

特別講演 (Plenary Talk) : 「Reducing Ising Model Sizes for Solving
Permutation-Based Combinatorial Optimization through Dual-Matrix Domain-
Wall Encoding」 The 7th ZIB - IMI - ISM - NUS - RIKEN - MODAL Workshop
on Future Algorithms and Applications, 2023 年 9 月 27 日 - 10 月 1 日
(<https://optimizationworkshop2023.zib.de/>)

【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
