拡張イジングマシンを用いた不等式制約付き組合せ最適化

理学専攻・情報科学コース　2340646　秋島 遥

1　はじめに

近年、組合せ最適化問題を解くことに特化した計算システムであるイジングマシンが注目されている。組合せ最適化問題は、配送計画やスケジューリングなど多くの分野での応用がある重要な問題である。イジングマシンで組合せ最適化問題を解くためには、問題を二値の二次多項式で定式化する必要があり、本研究では二値変数が $\{0,1\}$ の Quadratic Unconstrained Binary Optimization（QUBO）定式化を使う。

多くの組合せ最適化問題には、例えば配送計画問題における車両の容量制限のように、不等式制約が伴う。不等式制約は、そのままでは二値の二次多項式に定式化することはできず、スラック変数を導入して不等式を等式に変換し、定式化することが一般的である。しかし、スラック変数を表すためには追加の二値変数が必要であり、探索空間が広がることで解くことが難しくなるという課題がある。

そこで本研究では、不等式制約を実数の従属変数を用いて表すことができる拡張イジングマシンを扱う。拡張イジングマシンでは不等式制約定式化において追加の二値変数がいらないため、QUBO 定式化よりも効率良く解の探索ができると期待される。

本研究では、Quadratic Knapsack Problem (QKP) を対象として、拡張イジングマシン上で QUBO 定式化と拡張イジングマシン定式化による最適化を実行し、求解性能を比較した。また、拡張イジングマシンの性能を最大限発揮することを目指し、求解に関わるパラメータ設定の検討も行った。

2　拡張イジングマシン

拡張イジングマシン [1, 2] は、従来の二値の二次多項式のみを扱うイジングマシンを拡張し、不等式制約および 3 次以上の高次積を扱う機能を追加したものである。

2.1　ハミルトニアン

二値変数 $x_i \in \{0,1\}$ を用いて、拡張イジングマシンのハミルトニアン H は以下のように表される。

$$H(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} W_{i,j}x_i x_j - \sum_{i=1}^{n} b_i x_i + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k G_k(r_k)$$

$$r_k = \sum_{i=1}^{n} Z_{k,i}x_i + c_k$$

ここで、n は決定変数の数、m は制約の数、$W_{i,j}$ は変数 x_i と x_j の相互作用係数、b_i は変数 x_i に作用する係数である。r_k は関数 G_k で表される制約を受けるリソース量である。リソース量 r_k は係数 $Z_{k,i}$ によって変化する。関数 $G_k(r_k)$ を、本論文では従属変数と呼ぶ。

拡張イジングマシン定式化では、関数 G_k によって制約を表現する。不等式制約 $0 \le \sum_{i=1}^{n} Z_{i,k}x_i \le c_k$ は以下のように定式化できる。

$$G_k(r_k) = \max(0, r_k), \quad r_k = \sum_{i=1}^{n} Z_{k,i}x_i - c_k$$

$G_k(r_k)$ は、制約 k を満たす場合 $G_k = 0$、満たさない場合 r_k となる。$G_k(r_k)$ のパラメータである λ_k は正の数で設定する。このようにして、制約の違反量を従属変数で表すことができる。

2.2　求解パラメータ

拡張イジングマシンは、最適化アルゴリズムにレプリカ交換モンテカルロ法 (Replica-exchange Monte Calro; RMC) [3] を採用している。RMC は、複数の問題のコピー (レプリカ) を異なる温度で並行してシミュレーションし、一定の間隔で状態交換をすることで、効率的に状態空間を探索するサンプリング手法である。本研究では、この手法のパラメータである最高温度、最低温度、およびレプリカ間の温度間隔を最適化に特化して設定することで、最適解への到達時間を短縮することを目指す。具体的には、不要なレプリカを削減し、状態交換の効率が良い温度間隔に決めるようにする。レプリカの温度配置については、先行研究 [4] から全ての隣接するレプリカで交換確率が 20% 程度になるように設定し、本研究では特に最高温度、最低温度の設定方法についての指針を提案する。

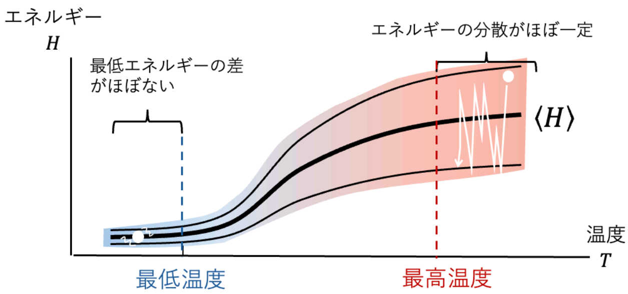

図 1: 最高温度・最低温度の設定のイメージ図

図 1 に提案手法の概要を示す。最高温度には、探索空間を広範囲を探索できる温度を設定する。しかし、ある温度でランダムサンプリングと同等の分散であれば、それ以上高温にする必要はない。よって、ランダムサンプリングと分散が同じくらいになる温度を最高温度に決める。最低温度は、最低エネルギー付近の小さな凸凹が探索できるくらい低温に設定したい。しかし、局所解に陥り、全く動かなくなるような温度にするとそのレプリカでは全く探索が行われなくなる。我々は最低温度レプリカのエネルギーの最頻値の割合に着目し、その割合が 0.1 程度のときに、効率よく探索が行われていることを実験的に発見した。よって、そのような温度を最低温度に設定する。

3　実験

2.2 節のパラメータ設定で実験を行った。

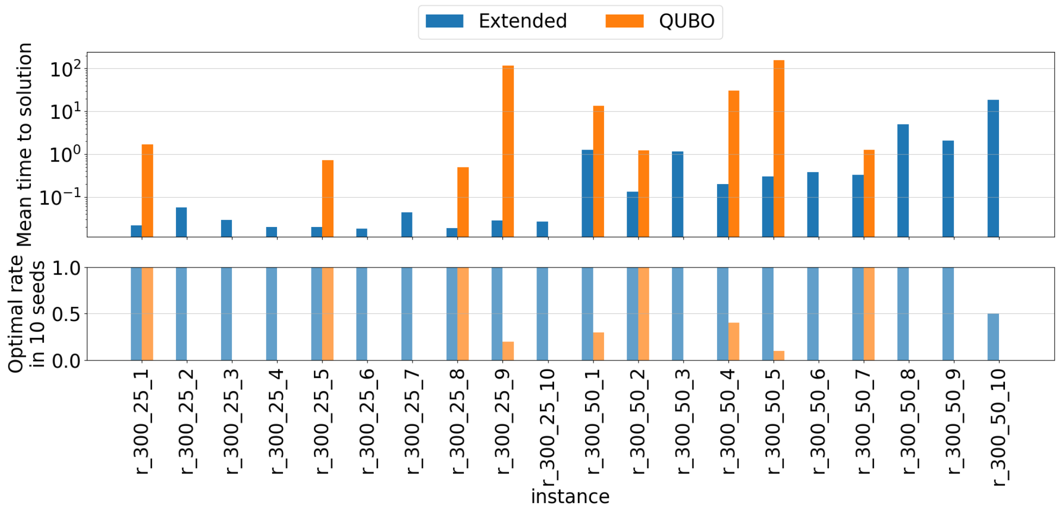

図 2: アイテム数 300 のインスタンスの求解結果

3.1　QKP (Quadratic Knapsack Problem)

QKP は、目的関数が二次のナップサック問題である。n 個のアイテムがあり、アイテム i とアイテム j を入れたときの価値を p_{ij}、アイテムの重さを w_i、ナップサックの容量を c とすると、以下のように表される。

$$\max_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} p_{i,j}x_ix_j \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^{n} w_ix_i \le c$$

二値変数 $x_i \in \{0,1\}$ は、アイテム i が選択されている場合に 1、それ以外の場合は 0 となる値である。本稿では、QKP のベンチマークセット [5] から、変数 300 個の問題を解いた結果を示す。価値 p_{ij} は $[1,100]$、重さ w_i は $[1,50]$ で乱数で決められている。また、価値行列の密度が 25, 50%と分かれており、それぞれ 10 インスタンス、合わせて 20 インスタンスがある。

3.2　定式化

価値 $p_{i,j}$ の最大化についてのコスト項は全ての定式化について共通であり、以下のように表される。

$$H_{\text{cost}} = -\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} p_{i,j}x_ix_j$$

3.2.1　QUBO 定式化

QUBO での QKP の定式化は、以下のように表される。

$$H_{\text{qkp\_qubo}} = H_{\text{cost}} + \lambda_{\text{im}}\left(\sum_{i=1}^{n} w_ix_i + \sum_{j=0}^{\lfloor \log_2 c\rfloor} 2^j y_j - c\right)^2$$

ここで、$y_j \in \{0,1\}$ である。必要な二値変数の数は、$n + \lfloor \log_2 c\rfloor + 1$ 個となる。

3.2.2　拡張イジングマシン定式化

拡張イジングマシンでの QKP の定式化は以下のように表される。

$$H_{\text{qkp\_extend}} = H_{\text{cost}} + \lambda_{\text{eim}} \max\left(0, \sum_{i=1}^{n} w_ix_i - c\right)$$

二値変数は n 個、従属変数は 1 個必要になる。

ここで、λ_{im}、λ_{eim} は、それぞれ QUBO 定式化、拡張イジングマシン定式化の制約項の強さを決めるペナルティ係数である。これらの値は、グリッドサーチで決定した。

3.3　結果

図 2 に、QUBO 定式化と拡張イジングマシン定式化による QKP の求解結果を示す。横軸はインスタンス、縦軸は上段が最適解に到達したシードのみで算出した最適解に到達した時点での実行時間の平均、下段がシード 10 個の中で最適解に到達した割合を表している。ほとんどの問題について拡張イジングマシン定式化の方が QUBO 定式化よりも高速に、安定して最適解に到達していることが読み取れる。

4　まとめ

不等式制約付きの組合せ最適化問題において、拡張イジングマシン定式化は QUBO 定式化と比べて優位性があることが示された。QUBO 定式化では、拡張イジングマシン定式化に比べて必要な二値変数が多く、探索空間が広くなるため求解性能の差が生まれていると考えられる。拡張イジングマシンを用いることで、不等式制約付きの組合せ最適化問題について、今まで従来のイジングマシンで求解が難しかった問題についてもより良い解を得ることが期待される。

参考文献

[1] F. Yin, H. Tamura, Y. Furue, M. Konoshima, K. Kanda and Y. Watanabe, Journal of the Physical Society of Japan **92**, 034002 (2023).

[2] Y. Watanabe, H. Tamura, Y. Furue and F. Yin, IEEE Access **12**, 14636 (2024).

[3] K. Hukushima and K. Nemoto, Journal of the Physical Society of Japan **65**, 1604 (1996).

[4] Y. F. Atchadé, G. O. Roberts and J. S. Rosenthal, Statistics and Computing **21**, 555 (2011).

[5] A. Billionnet and É. Soutif, `https://cedric.cnam.fr/~soutif/QKP/`.