拡張イジングマシンの求解性能の解析

理学専攻・情報科学コース　2340676　藤元 彩花

1　はじめに

イジングマシンは, 組合せ最適化問題を解くことに特化したコンピュータであり, 富士通のデジタルアニーラ [1] など半導体回路を用いた様々な方式が提供されている．これらの方式では組合せ最適化問題を, 磁性体の数理模型であるイジング模型の基底状態探索問題に変換することによって求解する．そのため, 既存のイジングマシンでは, 入力形式であるイジング模型, つまり二値二次形式に問題を定式化することが必要となる．一方で, 不等式制約や高次コストを扱う問題では, 二値二次形式に問題を定式化することが難しいという場合がある．これらの問題を定式化するためには, 決定変数だけではなく補助変数が必要になり, 変数の数が大幅に増えるため, 小規模な問題でも最適解を得ることが難しい．このような背景をもとに, 新しい定式化により多様な目的関数を表現できる拡張イジングマシンが提案された [2,3]. 拡張イジングマシンは既存の定式化で使用される決定変数に加えて, 決定変数に従属して一意に定まる従属変数を使用する．この従属変数が二値の二次形式で表現できない不等式制約や高次コストを含む関数を表現することで, 効率的な求解を可能にしている．本稿では, 既存のイジングマシンの定式化手法である QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 形式と拡張イジングマシンでの定式化の比較を行った．その上で, 高次項を含む問題, k-XORSAT での拡張イジングマシンの求解性能を様々なパラメータをチューニングすることによって調べた.

また, 決定変数の値を二値ではなく任意の整数値を取ることができるような拡張法が提唱された [4]. 整数値の決定変数で定式化を行うことで, 二値変数の定式化よりも解空間が広がるためイジングマシンのサンプラーとしての性能の向上が予想される．本稿では, 整数変数拡張イジングマシンを使用して歪正規分布をサンプリング可能であることを示した.

2　拡張イジングマシン

拡張イジングマシンは二値二次形式での定式化に従属変数によって表現される制約を加えたことによって多様な目的関数を表現することができるイジングマシンである. 0/1 バイナリ変数 x_i を用いた場合，以下のように定式化される.

$$H\left(\boldsymbol{x}\right) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} W_{ij}x_ix_j - \sum_{i=1}^{n} b_ix_i + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k G_k\left(r_k\right) \tag{1}$$

$$r_k = \sum_{i=1}^{n} Z_{ki}x_i + c_k \tag{2}$$

n は決定変数の個数，m は制約式の個数，W_{ij} は 2 次項の重み，b_i は 1 次項の重み，λ_k は制約の重み，Z_{ki} は制約中の 1 次項の重み, r_k は関数 G_k で制約されるリソース量, c_k は制約 k が違反の状態であれば G_k が正の値をとるように設定された定数である.

式 (1) の右辺の第 1 項と第 2 項はハミルトニアンの二次形式を表す．拡張イジングマシンの定式化で加わった第 3 項, G_k は，不等式制約あるいは高次コストなどを表現することができ, 問題の種類に応じて形が選ばれる従属変数で, r_k を介して決定変数に従属して値が決まる変数である．そのため, この定式化では独立な変数は増えないため問題サイズが制約の定式化によって大きくなることはない.

3　整数拡張イジングマシン

整数拡張イジングマシンは, 拡張イジングマシンの決定変数を二値ではなく整数値をとることができるように拡張したイジングマシンである．任意の整数値を取る決定変数 x_i を用いた場合, 以下のように定式化される.

$$H\left(\boldsymbol{x}\right) = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} W_{ij}x_ix_j - \sum_{i=1}^{n} b_ix_i + \sum_{k=1}^{m} \lambda_k G_k\left(r_k\right) \tag{3}$$

$$r_k = \sum_{i=1}^{n} Z_{ki}x_i + c_k \tag{4}$$

決定変数の取りうる値以外は, 従来のイジングマシンのエネルギー式である (1) と同様である．整数値の決定変数で定式化を行うことで決定変数を実数の近似として使用することができ, 二値展開を用いずに一般の数量を表現でき, イジングマシンおよびサンプラーとしての表現力, 性能が向上する.

4　拡張イジングマシンによる k-XORSAT 問題の求解

XORSAT は排他的論理和充足問題である [5]. この XORSAT 問題はガウスの消去法で多項式時間で解くことが可能であるが, 最適化問題として定式化された場合には, 従来型のコンピュータにとっては困難な問題になることもある.

本研究で使用した k-regular k-XORSAT 問題 (以下 k-XORSAT 問題) は, 一つの方程式が k 個の変数を含み, 各変数が k 個の方程式に現れるような問題である.

上記のような k-XORSAT 問題は, 高次積を含む形で定式化することが可能であるため, 拡張イジングマシンを使用して求解できる．そこで, 拡張イジングマシンでの定式化 (以下 HUBO (Higher-Order Unconstraint Binary Optimization) 形式) と既存のイジングマシンでの定式化 (以下 QUBO 形式) の求解結果を比較し, どのような差があるのかを調査した.

図 1 に制約 (方程式) の数である問題サイズ n と解に到達するまでのイテレーション数である ITS (Iteration To Solution) の 10 インスタンスの平均の関係を QUBO 形式と HUBO 形式で比較した結果を示す．QUBO 形式と HUBO 形式ではスケーリング指数に大きな差異が見られなかったが, HUBO 形式の方が QUBO 形式

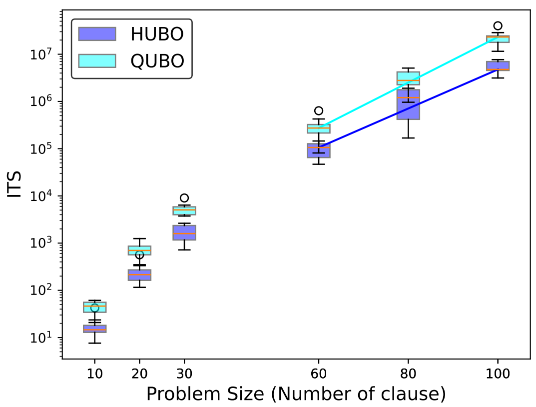

図 1: 縮退度 2 のインスタンスの問題サイズ n と ITS の関係. x 軸と y 軸は log スケールである.

と比較して高速に求解できることが読み取れる.

5 整数拡張イジングマシンによる歪正規分布のサンプリング

イジングマシンは, 最適化だけでなくサンプリングもできるコンピュータである. 整数値を使えるように拡張した整数拡張イジングマシンも同様に分布のサンプリングが理論的に可能である. また, 整数値の決定変数で定式化を行うことで, 二値変数の定式化よりも解空間が広がるためイジングマシンのサンプラーとしての性能の向上が予想される. 本章では, 任意の分布のサンプリングが可能であることを示す一例として, 歪正規分布とよばれる分布のサンプリングを行った結果を示す.

多変量歪正規分布は (5) のように定義される分布である [6].

$$f(\boldsymbol{X}) = 2\phi(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu}; \Sigma)\Phi(\boldsymbol{\alpha}^T \omega^{-1}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\mu})) \tag{5}$$

$$\phi(\boldsymbol{X}; \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{|\Sigma|(2\pi)^n}} \exp(-\frac{1}{2}\boldsymbol{X}^T \Sigma^{-1} \boldsymbol{X}) \tag{6}$$

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^{x} \phi(t)dt = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\right] \tag{7}$$

$\boldsymbol{X}$ は n 次元の決定変数のベクトル, $\boldsymbol{\alpha}$ は歪みを表すパラメータのベクトル, $\boldsymbol{\mu}$ は平均値のベクトル, Σ は分散共分散行列, ω は $\mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$, erf は誤差関数である. (6) は多変量の正規分布, (7) は多変量正規分布の累積密度関数になっている.

$\alpha = 0.05$, $\mu = 0$, $\sigma = 25$ の 1 変数の歪正規分布のサンプリングを行った結果を図 2 に示す. 理想的な歪正規分布と近似関数とサンプリング結果が視覚的にほぼ一致していることが確認できる. また, 理想的な歪正規分布とサンプリング結果の KS 検定の p 値は 0.068 であり有意水準 5%なら帰無仮説「分布が一致している」を棄却できないため, 拡張イジングマシンを使用して歪正規分布のサンプリングを行うことができたと考えられる.

6 まとめ

本研究は, 新しい定式化手法によって多様な目的関数を表現できる拡張イジングマシンが既存のイジングマシンよりも k-XORSAT 問題において高速に求解することができることを示した. また, 決定変数が任意の整数値を取ることができるように拡張した整数拡張イジングマシンを使用して多変量歪正規分布がサンプリング可能であることを示した.

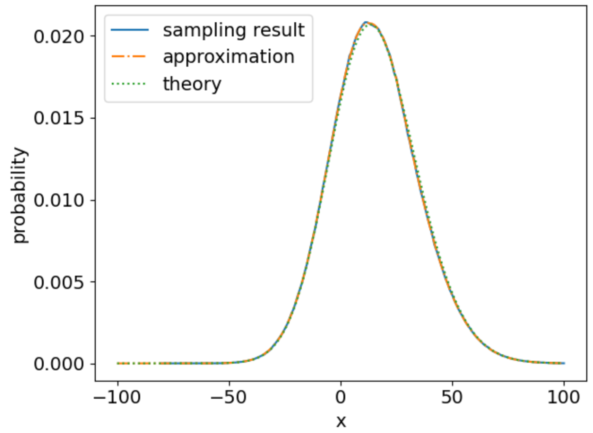

図 2: 歪正規分布と近似関数とサンプリング結果の確率密度関数の比較. イテレーションは最大 10^8 回行った. 理論的な多変量歪正規分布が緑の破線で, 分布を整数拡張イジングマシンの定式化の形式で近似した結果がオレンジの破線, 実際のサンプリング結果が水色の実線である.

参考文献

[1] S. Matsubara, M. Takatsu, T. Miyazawa, T. Shibasaki, Y. Watanabe, K. Takemoto and H. Tamura, *25th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC)*, pp. 667–672 (2020).

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

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

[4] 藤元彩花, 田村泰孝, 工藤和恵, 整数変数拡張イジングマシンによる歪んだ分布のサンプリング, 日本物理学会第 79 回年次大会 (2024) 16pE311-1.

[5] D. Perera, I. Akpabio, F. Hamze, S. Mandra, N. Rose, M. Aramon and H. G. Katzgraber, arXiv preprint arXiv:2005.14344 , (2020).

[6] A. Azzalini, Scandinavian journal of statistics **32**, 159 (2005).