

組合せ最適化と量子アニーリング

徳永 健一* 鈴木 拓実*

Combinatorial Optimization and Quantum Annealing

Ken-ichi Tokunaga* and Takumi Suzuki*

組合せ最適化問題は、厳密解を求めるには従来の計算機では膨大な時間を要する場合があります、ヒューリスティックな近似解法や、機械学習の利用など様々な工夫が考えられてきた。量子アニーリング理論は組合せ最適化問題を解くことを主な目的として発展した理論であり、多項式時間アルゴリズムが発見されていない難しい問題に近似解を与える手法の一つとして注目を集めている。本稿では、量子アニーリングを古典的コンピューター上に再現された実装の一つである `dwave-neal` を用いて、いくつかの組合せ最適化問題を解いた例を示し、これからの産業界とヒューリスティックアルゴリズムの関連について概観を述べる。

<https://doi.org/10.69290/j.001179-vol32>

Keywords: 組合せ最適化, メタヒューリスティック, イジング模型, QUBO

1. 組合せ最適化問題とは

組合せ最適化とは、有限個の選択肢の中から最適なものがどれであるかを探る離散数学の一分野である。

実生活でも幅広く応用されており、例えば、鉄道の乗換案内で所要時間が最も短くなる経路を探すのがその一例である（最短経路問題）。「限られたおこづかいで何を遠足のおやつに持っていくか？」といった問題も組合せ最適化である（ナップサック問題）。所定の目的地を一回ずつ巡って出発地に戻るのに、最も移動コストが少なくなるものを探す問題（巡回セールスマン問題）はとくに有名である。

実用上では、人員配置や生産計画、物流などの分野の様々な問題に組合せ最適化問題が適用できる。

1.1. 計算の複雑さ

組合せ最適化では微積分のような解析的な道具を利用しにくく、特有の難しさがある。計算の難しさを表す指標の一つに計算量という考え方がある。これは、入力されるデータのサイズに対して計算時間がどれだけ増えるかを評価するものである。例えば、前述の鉄道乗換の例を解く方法の一つにダイクストラのアルゴリズムが知られており、計算量はだまかに駅の数と線路の本数の多項式倍で評価される¹。これに対し、遠足のおやつ問題は多項式時間で解ける方法が発見されていない。おやつ選択肢が大量にあるとコンピューターでも最善を選択するのが難しいというわけである。

多項式時間かどうかは理論、実践の両軸で重要であり、計算複雑性理論では次のようにいくつかのクラスが定義されている。

- P: 多項式時間で解ける問題。
- NP: 答えが正しいかどうかを多項式時間で判断できる問題。

*アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

¹ ダイクストラが最初に提案した方法 [3] は、駅数 V に対して $O(V^2)$ で経路を求めるものであ

った。

- NP 完全: NP であり、かつ任意の NP の問題から多項式時間で帰着できる問題。
- NP 困難: 任意の NP の問題から多項式時間で帰着できる問題。

NP の定義は、問題を解く時間とは関係ないことに注意が必要である。

1.2. 近似解法

多項式時間で解けるアルゴリズムが発見されていない問題は現実的な時間内で解くのは難しい。そこで、必ずしも正確な解ではないが現実的な時間内で比較的良い解 (近似解) を探す方法が採用されることが多い。

一つは貪欲法と呼ばれるものがある。これは問題がいくつかの部分に分けられるとき、各時点で最善の選択をし続けるような戦略であり、先述の遠足のおやつ例はこの方法で近似解が得られることが知られている。

このほかにも多くの近似解法が提案されているが、その一つに量子コンピューター (アニーラー) を利用する方法がある。以下の節では量子コンピューターとは何かについて概観を示すとともに、組合せ最適化との関連性について紹介する。

2. 量子コンピューターとアニーラー

量子コンピューターは、従来の 0,1 で表現される bit 単位に変わり、

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (1)$$

のように 2 つの基底状態 $|0\rangle, |1\rangle$ の重ね合わせで表現される qubit を演算単位とする計算機の総称である (図 1)。2 つの状態 $|0\rangle, |1\rangle$ を同時に扱うことで並列処理を実現するという狙いがある。

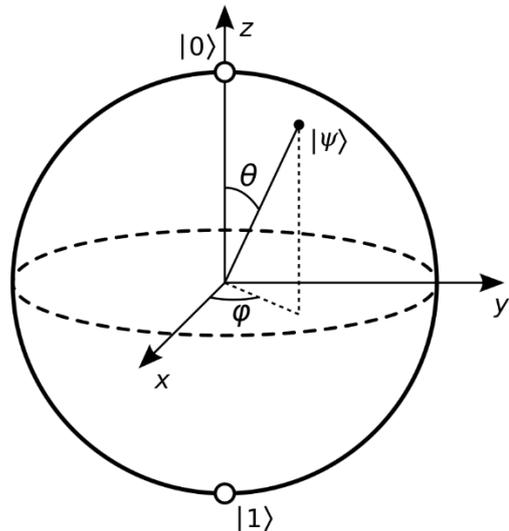


図 1 ブロッチ球による qubit の表現 [1]。
 $|\psi\rangle$ には球面上を動く自由度がある

量子コンピューターは、問題を解く手法の違いで大きく「ゲート型」と「アニーリング型」の 2 種類に分類される。ゲート型は、従来の論理回路を量子的なものに取り換えた「量子ゲート」を用いて qubit を操作する方式であり、超伝導式、イオントラップ式など様々な手法が提案されている。汎用的な計算が可能であり、RSA 暗号が破られるなどと話題になっているが、現在のハードウェアでは実装が難しく、未だ実用化に至っていない。

これに対し、アニーリング型の量子コンピューターは、組合せ最適化問題を解くことに特化したもので、金属加工の手法の一つである焼きなまし (annealing) に因んで名づけられている。

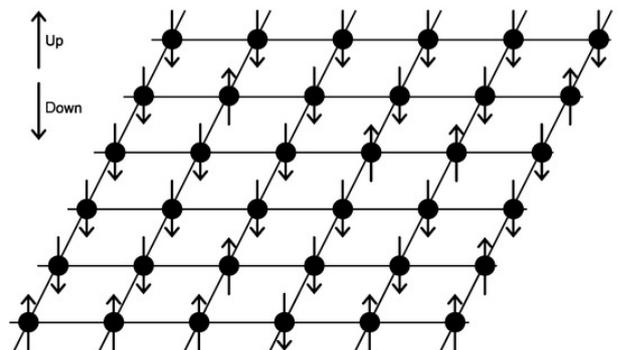


図 2 イジング模型の模式図 [4]

現在主流となっているアニーリング型の量子コンピューターは、1998 年に発表された 門脇、

西森 [8] によるものである。これは、統計力学の基本的なモデルの 1 つであるイジング模型 (Ising model) の基底状態 (もっともエネルギーの低い状態) を探すというものであり、2011 年にカナダの D-Wave Systems 社によってすでに商用の量子コンピューターが発表されている。また、アニーリングを古典コンピューター上の疑似乱数でシミュレートした simulated annealing (SA) と呼ばれる手法も存在する。本稿で使用したものは SA の Python モジュールである dwave-neal である。

このように、アニーリング型の量子コンピューターは、ゲート型と比べて実用化が進んでおり、近未来における実務での活用非常に大きな期待が寄せられている。

2.1. イジング模型と QUBO 形式

ここで量子アニーリング理論の基礎となっているイジング模型について説明する。イジング模型は、図 2 のように格子点の頂点にスピンを配置して磁性体をモデル化したものであり、以下のようなハミルトニアンで記述される。

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \quad (2)$$

ここで $\sigma_i \in \{+1, -1\}$ は粒子 i のスピン変数、 h_i は粒子 i に作用する外場の大きさである。 $J_{i,j}$ は粒子 i, j 間の交換相互作用の因子であり、 $\langle i, j \rangle$ は近接粒子について和をとることを意味する。物理現象はエネルギーが低くなるように現れるため、例えば $J_{i,j} > 0 (\forall i, j)$ の場合は隣接粒子が同じスピンになる傾向となるため強磁性体、 $J_{i,j} < 0 (\forall i, j)$ の場合はスピンのたがいが違くなる傾向になるため反強磁性体となる。このモデルは非常に単純でありながら、相転移、臨界現象をもうまく説明できたため古くから多くの物理学者に関心を寄せられていた [5]。

1 次元系や、外場のない 2 次元系のイジング模型は厳密に解けることが知られているが

[6][7]、外場のある 2 次元系や 3 次元系以上を解く場合は、現状では何らかの方法で近似解を求めることになる。イジング模型をハードウェアとして再現し、基底エネルギー状態を実験的に求めようとするものがアニーリング型量子コンピューターである。

3. 最適化問題とアニーラー

コンピューター上では $\{+1, -1\}$ のスピン変数 σ_i よりも、 $\{0, 1\}$ のバイナリ変数を扱う方が、都合が良い。そこで、(1) に対して

$$x_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (3)$$

のような変換を施すと、バイナリ変数 $x_i \in \{0, 1\}$ に関する以下のような形式が得られる²。

$$H = \sum_{i,j} Q_{i,j} x_i x_j + \sum_i b_i x_i \quad (4)$$

このような形式について最適化をはかる問題は QUBO (quadratic unconstrained binary optimization) と呼ばれる。QUBO は最適化問題を記述するうえで便利な形式である。

4. アニーラーによる最適化の例

4.1. 問題の QUBO 化

組合せ最適化問題をアニーラーによって解くためには、まず問題を QUBO, あるいはそれよりも次数の高い HUBO (higher order unconstrained binary optimization) と呼ばれる形式に書き換える必要がある。この変換はあらゆる問題に対して統一的に行えるものではなく、問題に応じた工夫や発想を必要とするが、多くの組合せ最適化問題は QUBO 形式として表現できることが知られている [9]。本稿では、その中から四色問題、巡回セールスマン問題、グラフ分割問題の 三つを取り

で無視している。

² 定数項はハミルトニアンでは意味を持たないの

扱い、SAによる解の一例を示すことにする。

4.2. 四色問題

四色問題とは、「平面上の地図を、隣接する領域が同じ色にならないように塗り分けるには四色あれば十分であるか」という問題である。この命題は1976年にK.AppelとW.Hakenによって証明されており[10]、その意味で四色定理とも呼ばれている。しかしながら、この証明はコンピューターの力技によるものであったことから当時の学界では物議を醸し、「エレファントな証明」などと揶揄されていたようである。

さて、四色問題はグラフの言葉を使うことでQUBOの形式に言い換えることができる。自己ループのない平面的³な無向グラフ $G=(V,E)$ と色の集合 C を与え、変数 $x_{i,j}$ を「頂点 $i \in V$ に色 $j \in C$ が塗られていれば1, そうでなければ0」となるように定義する。このとき、四色問題は色の集合 C の要素の個数が4の時に次の値を0にすることと同等である。

$$H = \sum_{(u,v) \in E} \sum_{j \in C} x_{u,j} x_{v,j} + \sum_{i \in V} A_i \left(1 - \sum_{j \in C} x_{i,j} \right)^2 \quad (5)$$

ここで A_i は重み係数である。第一項の和の各項 $x_{u,j}x_{v,j}$ は隣接頂点 $(u,v) \in E$ が同じ色で塗られている場合に、かつその時に限り1となるので、第一項全体を0にすることはすべての隣接頂点どうしが違う色となるように塗り分けることと同義である。この項は目的関数、コスト関数などと呼ばれる。一方、第二項は各頂点 $i \in V$ がいずれか1色で塗られていることを意味しており、制約項、ペナルティ項などと呼ば

れる。因子 A_i は目的関数と比した際の制約条件の影響力と解釈でき、この値は人間が経験的に適切に調整する必要がある。

四色問題を解くにあたって事前に平面的グラフを用意する必要があるが、今回は平面上に一樣乱数で生成した点群に対してドロネー分割を利用して作成することにした。この方法では次数が非常に大きい頂点を持つようなグラフは生成されにくい、確実に平面グラフを得ることができる。

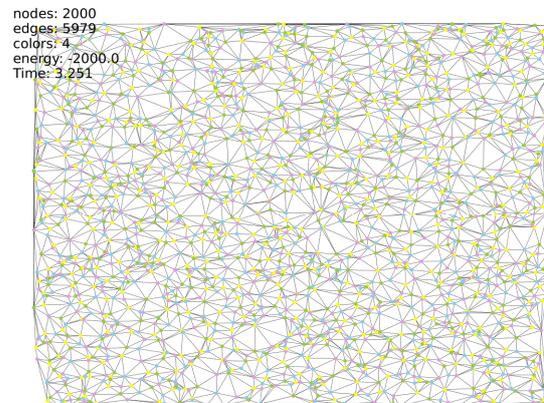


図3 ドロネー分割により作成した2000頂点の平面的グラフをアニーリングによって四色で彩色した結果の一例。

図3に結果の一例を示す。頂点は2000個、辺は5979本あり、このグラフを約3秒程度で四色に塗り分けできている。

4.3. 巡回セールスマン問題

巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP) とは、与えられた複数の都市すべてを1回ずつ巡回して出発点に戻るような経路のうち、最短のものはどれか? という問題で

³ 一般に、平面上に辺どうしが重ならないように描かれるグラフを平面グラフと呼び、平面グラフに同型なグラフは平面的であるという。彩色問題において平面的グラフを対象とするのは、

例えば青森県の外ヶ浜町のように飛び地のある地域を同じ色で塗らないといけないようなケースを除外するためである。

ある。NP 困難に属する問題であり、古典的な Held-Karp による方法 [11] では都市数を n とし $\Theta(2^n n^2)$ 掛かり、 $n = 20$ 程度で既に現実的な時間での計算が困難になる。その後も様々な研究がなされたものの、多項式時間で解けるアルゴリズムは現状発見されていない。

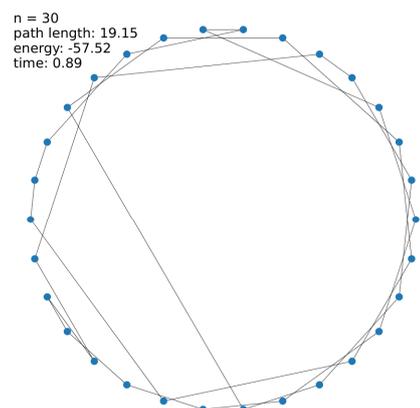
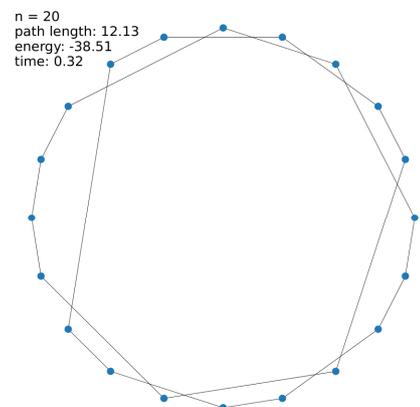
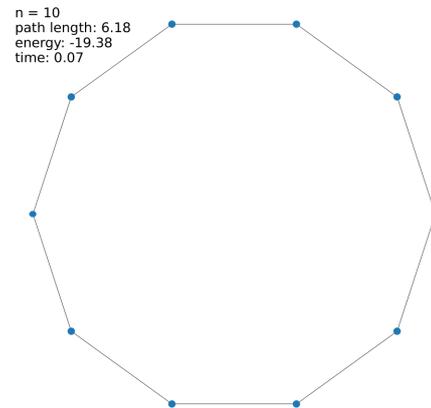
以下、TSP を QUBO で書くことを考える。グラフ $G = (V, E)$ を与え、辺 $(u, v) \in E$ における移動コストが $d_{u,v}$ であるとする⁴。また、時刻 $t \in T$ を、セールスマンが出発する瞬間を $t = 0$ 、出発地に戻る瞬間を $t = |V|$ とし、1つの都市を通過するごとに1ずつ増加するように定める。すなわち、 $T = \{0, 1, \dots, |V|\}$ である。バイナリ変数 $x_{i,t} \in \{0, 1\}$ を「セールスマンが時刻 $t \in T$ に都市 $i \in V$ を訪れるならば1、そうでなければ0」となるように定義すると、TSP は以下の値を最小化する問題に言い換えることができる。

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{t=0}^{|V|-1} \sum_{i,j} d_{i,j} x_{i,t} x_{i,(t+1)} \\
 & + \sum_{t=0}^{|V|} \left(\sum_{i \in V} x_{i,t} - 1 \right)^2 \quad (6) \\
 & + \sum_{i \in V} \left(\sum_{t=0}^{|V|-1} x_{i,t} - 1 \right)^2
 \end{aligned}$$

第1項は巡回路の総移動コストであり、今回の目的関数である。第2項は、各時刻 $t \in T$ ではセールスマンが1都市にしかいないことを課しており、第3項は、各都市 $i \in V$ には1度しか訪れないことを課す制約項となっている。

図4にTSPをアニーラーで解いた一例を示す。今回は最短経路がほとんど自明となるようにすべての都市が1つの円周上に等間隔に並ぶようなグラフを入力として与えている。都市数は順に、

10, 20, 30, 100 である。また、移動コストとしては2点間のユークリッド距離を与えている。



⁴ 一般に $d_{u,v} = d_{v,u}$ とは限らない。例えば、 $(u, v) \in E$ の間に坂がある場合は往路と復路の移

動コストに差があることが想像できる。

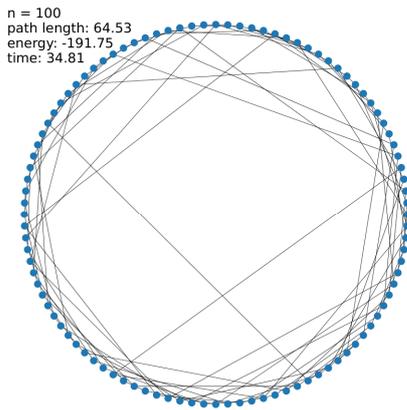


図 4 円周上に等間隔に配置された都市に対する巡回セールスマン問題をアニーリングによって解いた結果の一例

10 都市の場合は比較的厳密解を得やすいが、都市数が増えるごとに次第に厳密解からずれていくことが分かる。都市数が 100 になると処理時間が 30 秒程度にも及び、アニーラーでも基底エネルギー状態を探るのが難しい様子が見られる。これは、目指すべき値が明確ではないという点に原因があると考えられる。四色問題の場合、ハミルトニアンを 0 にすることと正しい塗り分けが実現されることが同等であった。一方、QUBO 形式の TSP では、総移動コストの最適値が事前に分からない。むしろ、それこそが我々の求めるものに他ならない。目的関数の最適値が不明である影響は大きく、これによって目的関数と制約項の間に相互作用が生じ、アニーリングの過程で総エネルギーが低くなる方向を探ることが難しくなっている可能性がある。

4.4. グラフ分割問題

無向グラフ $G = (V, E)$ と正の整数 k が与えられる。頂点集合 V を、以下の条件を満たすように k 個の空でない部分集合 $V_j (j = 1, \dots, k)$ に分割する。

1. $\{V_j\}_{j=1}^k$ は互いに素である。すなわち、 $V_i \cap V_j = \emptyset (i \neq j)$, かつ $\cup_{j=1}^k V_j = V$.
2. $\{V_j\}_{j=1}^k$ の大きさはすべて等しい。すなわち、 $\#V_j = n/k (\forall j)$.

グラフ分割問題 (graph partition, GP) とは、このような条件を満たす分割の中で、異なる分割をまたぐ辺の数が最も少ないものがどれであるかという問題であり、NP 困難に属する。

グラフ G のラプラシアン行列⁵ を L 、 $n = |V|$ とする。また、バイナリ変数 $x_{i,j} \in \{0,1\}$ を「頂点 $i \in V$ が j 番目の分割に属するとき 1, そうでないならば 0」となるように定義し、 $x_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, \dots, x_{n,j})^T$ と書くことにする。このとき、グラフ G を k -分割する問題は以下の値を最小化することに帰着される [12]。

$$\begin{aligned}
 H = \beta & \left(\sum_{j=1}^k x_j^T L x_j \right) \\
 & + \sum_{j=1}^k \alpha_j \left(\sum_{i=1}^n x_{i,j} - \frac{n}{k} \right)^2 \quad (7) \\
 & + \sum_{i=1}^n \gamma_i \left(\sum_{j=1}^k x_{i,j} - 1 \right)^2
 \end{aligned}$$

第 1 項が分割を跨ぐ辺の本数を少なくすることに対応している。第 2 項は、各分割を構成する頂点の数が等しくなるようにする制約項であり、第 3 項はすべての頂点 $i \in V$ がある 1 つの分割に入っていることを要請する制約項である。

なお、入力として与えるグラフは四色問題の時と同様にドロネー分割で作成することとした。

⁵ グラフ G の次数行列を D 、隣接行列を A としたとき、 $L = D - A$ をグラフ G のラプラシアン

行列と呼ぶ。

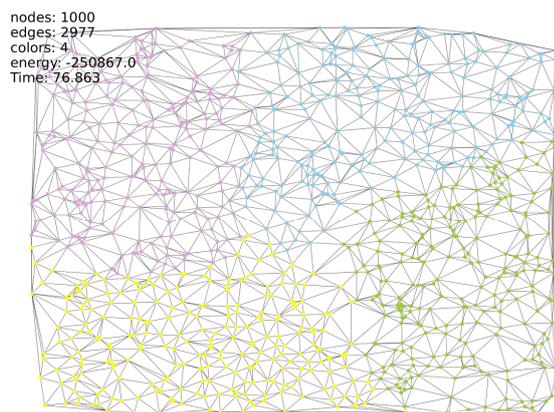


図 5 ドロネー分割によって作成した頂点数 1000 のグラフをアニーリングによって 4 分割した結果の一例。

モデル (6) に従って GP をアニーラーで解いた一例を図 5 に示す。ここでは 1000 頂点のグラフを四つに分割しており、分割ごとに頂点を色分けして表示している。計算には 80 秒程度要したが、正しく分割できていることが分かる。しかし、分割を跨ぐ辺をどの程度少なくできているのかは評価が難しい。

5. ハードウェアの現状とまとめ

今回は、dwave-neal を用いた simulated annealing によって代表的な 3 種類の組合せ最適化問題の近似解を求め、現実的な時間の中でそれなりのパフォーマンスを出せることを確認できた。しかし、近年では古典コンピュータ上でシミュレートされた量子アニーリングでは実際の量子力学の理論と整合しないことがあるとする研究もあり [13]、より早く正確な解を得るために量子デバイスを導入する必要があることが示唆される。他方、量子アニーリングが SA、古典アルゴリズムと比べて計算速度上優位になる理論的根拠は今のところなく、ノーフリールンチ定理 [14] における汎用アルゴリズムに該当するとして批判する研究者も多い [2]。

今回紹介した代表的な組合せ最適化問題は、QUBO 化をしてアニーラーで解くことができた。一般的な組合せ最適化問題を QUBO 化するには、

三次以上の高次の目的関数の処理や、不等式制約条件をペナルティ項として表現する方法など、それぞれの問題に応じていくつかのテクニックを使って行う必要がある。現状では汎用化することは難しく、経験値や発見的手法に負うことが多い。

今後、量子アニーリング計算機が実用化されれば、実務上の組合せ最適化問題を解決する現実的な選択肢となりうると考えられる。その時を見据えて、ハードウェアの開発状況を注視し、アニーリング計算のためのソフトウェアを整備していく必要がある。当面は古典的な手法や機械学習を活用する手法などから、問題の種類や規模に応じて適切な手法を選択することになるだろう。

参考文献

- [1] <https://en.wikipedia.org/wiki/Qubit>
- [2] 川畑史郎, 量子コンピューターと量子アニーリングマシン 基礎から最先端まで, アドバンス・シミュレーション・ニュース No.7, 2023
- [3] E. W. Dijkstra, “A note on two problems in connexion with graphs”, Numer. Math. 1, 269–271 (1959).
- [4] M. Nakamura, K. Kaneshima, and T. Yoshida, “Petri net modeling for ising model formulation in quantum annealing”, Applied Sciences 11, 10.3390/app11167574 (2021).
- [5] M. Niss, “History of the lenz-ising model 1920-1950: from ferromagnetic to cooperative phenomena”, Archive for History of Exact Sciences 59, 267–318 (2005). A. Klamt, G. Schüürmann, J. Chem. Soc., Perkin Trans. II (1993) 799.
- [6] 田崎晴明「統計力学」培風館 (2008).
- [7] 西森秀稔「相転移・臨界現象の統計物理学」培風館 (2005).
- [8] K. Tadashi and N. Hidetoshi, “Quantum annealing in the transverse ising model”, Physical Review E 58, 5355–5363 (1998).

- [9] A. Lucas, “Ising formulations of many np problems”, *Frontiers in Physics* **2**, 10.3389/fphy.2014.00005 (2014).
- [10] K. Appel, W. Haken, and J. Koch, “Every planar map is four colorable”, *Illinois Journal of Mathematics* **21**, 429–567 (1977).
- [11] M. Held and R. M. Karp, “A dynamic programming approach to sequencing problems”, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* **10**, 196–210 (1962).
- [12] H. Ushijima-Mwesigwa, C. F. A. Negre, and S. M. Mniszewski, “Graph partitioning using quantum annealing on the d-wave system”, in *Proceedings of the second international workshop on post moores era supercomputing, PMES’17 (2017)*, pp. 22–29.
- [13] B. Yuki and N. Hidetoshi, “Simulated quantum annealing as a simulator of nonequilibrium quantum dynamics”, *Physical Review A* **104**, 022607 (2021).
- [14] D. H. Wolpert and W. G. Macready, “No free lunch theorems for search”, in (1995).

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMIII（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。