

シミュレーテッド分岐マシンでの制約付き 組み合わせ最適化問題のパラメーター自動調整

Method Enabling Simulated Bifurcation Machine to Automatically Tune Parameters of Constrained Combinatorial Optimization Problems

鈴木 賢 SUZUKI Masaru 泉 泰一郎 IZUMI Yasuichiro

東芝デジタルソリューションズ(株)のシミュレーテッド分岐マシン(Simulated Bifurcation Machine, SBMと略記)は、クラウドサービス上のGPU(Graphics Processing Unit)で組み合わせ最適化問題を解くサービスで、大規模な問題の近似解が高速に得られる。しかし、現実の組み合わせ最適化問題には制約条件が伴い、良い近似解を得るには、制約条件に合わせてパラメーターを調整する必要がある。これは、利用者にとって時間と手間の掛かる作業であり、SBMの実用上の障壁となっていた。

今回、このパラメーター調整を自動化し、利用者の手を煩わせることなく良い近似解が得られる新たな手法を開発し、マネージドサービスとして提供するとき求められる使いやすさを実現した。

The Simulated Bifurcation Machine (SBM), a cloud service to solve combinatorial optimization problems through the use of cloud-based graphics processing units (GPUs), makes it possible to find a nearly optimal solution to large-scale problems in a short time. However, actual combinatorial optimization problems usually contain constraints, requiring the tuning of parameters to obtain better results. This task involves considerable time and effort and places a heavy burden on users, thus posing a serious obstacle to practical use of the SBM.

Toshiba Digital Solutions Corporation has now developed a method that enables the SBM to tackle constrained combinatorial optimization problems. This method automates the tuning of parameters without the need for troublesome processes, providing users with easy operation as a managed service.

1. まえがき

組み合わせ最適化問題は、世の中の様々な場面に登場する古くて新しい問題である。東芝デジタルソリューションズ(株)は、SBMというサービスを提供し、これまで解けなかったような組み合わせ最適化問題を解くことに、顧客やパートナーとともに取り組んでいる。

組み合わせ最適化問題を実際に解くには、制約条件を考慮する必要があり、制約条件を満たす良い解を得るには、求解の試行錯誤を含む多大な労力が掛かる。今回、制約条件に伴うパラメーター調整を自動化する新たな手法を開発した。この手法を適用することで、SBMをマネージドサービスとして提供する際に求められる使いやすさを実現した。

ここでは、組み合わせ最適化問題における制約条件の扱いに伴う課題と、その解決策として実現したパラメーターの自動調整手法について述べる。

2. 組み合わせ最適化問題とシミュレーテッド分岐マシン

2.1 組み合わせ最適化問題とイジングマシン

組み合わせ最適化問題とは、定量的に定めた目的関数を最大あるいは最小にするように、選択枝を表す変数の値を組

み合わせることをいう。創薬の例では、疾病に関与する酵素に結合してその働きを阻害するような複数の化学物質を新薬の候補とし、酵素と化学物質が最も安定結合するような組み合わせを選ぶ。変数が増えると取り得る組み合わせの数は膨大になるので、組み合わせ最適化問題を解くのが難しくなるが、それらを解くために、様々な手法が提案されてきた。

イジングマシンは、このような取り組みの一つである。イジングマシンで組み合わせ最適化問題を解くときには、その目的関数を、(1)式のように、ある物理的構造を表すイジングモデルのエネルギー関数として表現する。

$$\text{minimize } \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \mathbf{x}_i \mathbf{Q}_{ij} \mathbf{x}_j \quad (1)$$

\mathbf{x} : 組み合わせ変数 (0, 1 変数)

\mathbf{Q}_{ij} : \mathbf{x}_i と \mathbf{x}_j の間に働く相互作用の大きさを表す係数

物理的構造のエネルギーが基底状態に落ち着くという自然現象を借りて、イジングモデルにマッピングした目的関数を最小化させたときの変数値の組み合わせを最適解として得る。組み合わせ変数 \mathbf{x} は、選択枝を取るか取らないか(1か0か)のバイナリー変数で表し、目的関数は、その

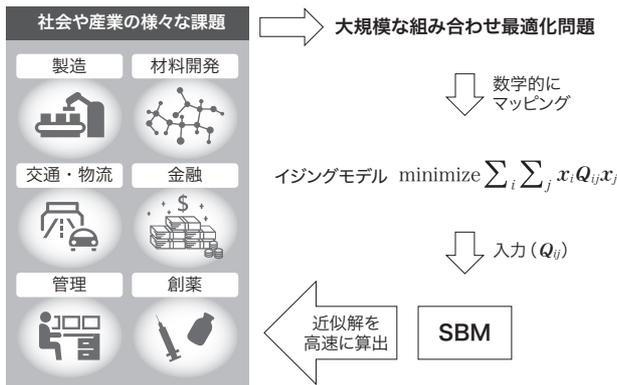


図1. SBMの適用分野

イジングモデルを利用し、大規模な組み合わせ最適化問題の近似解が高速に得られる。

Fields of application of SBM

2次式で表される（本来のイジングモデルの変数は、スピン変数と呼ばれ、1か-1の2値を取る）。ここでは、便宜上、実際のイジングマシンで多く採用されているQUBO（Quadratic Unconstrained Binary Optimization：制約なし2次バイナリー最適化問題）形式をイジングモデルと呼ぶ。QUBOは、イジングモデルを線形変換したもので、問題表現として等価である。

2.2 大規模組み合わせ最適化問題を高速に解くSBM

東芝グループは、量子現象を応用したイジングマシンの研究を行ってきた。その研究過程の中で見いだされたアルゴリズムがシミュレーテッド分岐（SB）アルゴリズムである。これは、通常のコンピュータ上で実行でき、大規模な組み合わせ最適化問題の近似解（最適解に近く実用上十分良い解）を高速に得られることが特長である^{(1), (2)}。

当社は、このSBアルゴリズムをクラウドサービス上のGPUに実装し、SBMとして簡便に利用できるサービスを提供している（図1）。

3. シミュレーテッド分岐マシンをマネージドサービスにするための課題

現実の組み合わせ最適化問題をイジングマシンで解くときには、付随する制約条件の扱いが難しい。QUBOという名前が示すとおり、元々イジングモデルは制約条件を考慮していないからである。この章では、SBMを含むイジングマシンでどのように制約条件を扱うのかや、実用上の問題点について述べる。

3.1 イジングマシンで制約条件付き問題を解く手法

実際の組み合わせ最適化問題では、変数の1次の項からなる線形制約（線形等式制約若しくは線形不等式制約）が

加わることが多い。その制約を満たすという条件の下で、目的関数を最小化するのである。2.1節で述べた新薬探索問題の例では、薬剤を構成する化学物質は、酵素のポケットと呼ばれる構造に結合する。制約条件の一つは、一つのポケットには高々一つの化学物質しか結合できないというものである。この制約条件は、あるポケットに結合する化学物質の候補を表すバイナリー変数 x_i を用いて、 $\sum_i x_i \leq 1$ という1次不等式で表せる。

イジングマシンで制約条件付き2次バイナリー最適化問題を解くには、目的関数の中に何らかの形で制約条件を組み込む必要がある。線形不等式制約ならば、新たにスラック変数 y を導入して線形等式制約に変換する。その線形等式制約に違反する量の二乗に比例する関数を障壁関数として加えたものを、新たな目的関数とする。障壁関数の値が、変数が制約条件を満たすときだけ最小となり、満たさなときには非常に大きくなることで、目的関数を最小化したときには同時に制約条件も満たされることを期待するものである。更に、 y の値を変化させることで、元の線形不等式制約を満足する近似解の探索が実現できる。

3.2 制約条件付き問題を解くときの問題点

しかし、3.1節で述べた方法には次のような問題点があり、実用上の障壁になっている。

問題点① 線形制約の組み込み 図2に示すとおり、 y を導入して線形制約を目的関数に組み込む労力が必要である。 y は、複数のバイナリー変数 y_k とエンコーディング係数 s_k でエンコーディングしなければなら

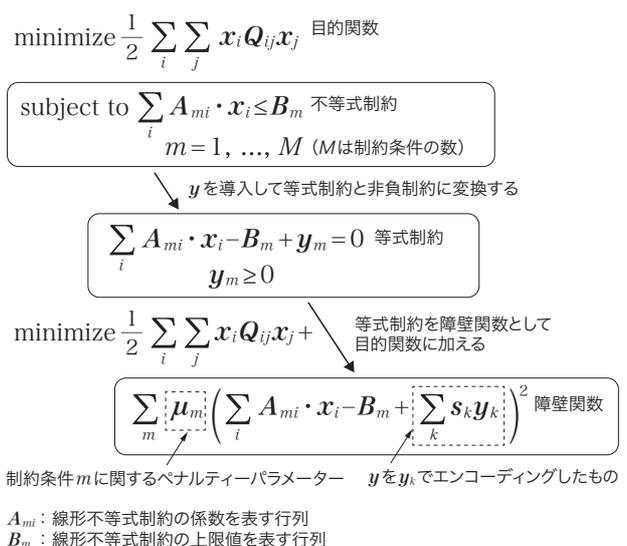


図2. 線形不等式制約の目的関数への組み込み

スラック変数を導入し、障壁関数として目的関数に組み込む。

Embedding of linear constraints into objective function

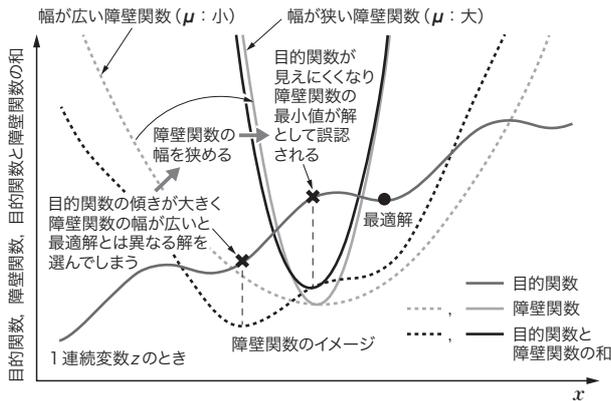


図3. 障壁関数による精度悪化の例

障壁関数の幅を狭める (μ を大きくすると), 障壁関数の効果が大きくなり過ぎ、最適解を探索しにくくなる。

Example of accuracy deterioration of objective function caused by penalty function

い。最終的に、目的関数と障壁関数を足し合わせたものを新たな目的関数として、式を整理する必要もある。
 問題点② 良い近似解への到達 制約の近辺で目的関数の傾きが大きいと、障壁関数に与える比例係数(ペナルティパラメーター) μ を大きく取る必要があり、全体として障壁関数の効果が大きくなり過ぎてしまう(図3)。結果として、目的関数の最小値よりも、制約条件を満たす組み合わせの探索に計算が使われ、時間内に良い近似解に到達できないことがある。

問題点③ μ の組み合わせ調整 良い近似解に到達させるには、制約条件ごとの μ の最適な組み合わせを見いださなければならない。実際の問題では、制約条件の数が数千に及ぶこともあり、これ自体が難しい組み合わせ最適化問題になる。これを、人手で調整することは困難である。

イジングマシンであるSBMをマネージドサービスとして提供するには、これら三つの問題点を解決する必要があり、課題は、線形制約の扱いの自動化といえる。

4. 制約条件付き問題のシミュレーテッド分岐マシンによる求解の自動化

3章で述べた課題解決のために、線形等式制約付き最適化問題に適用されている交互方向乗数法という手法をイジングマシンと組み合わせた新しい手法(拡張ラグランジュ探索)を考案した。この手法によるSBMでは、次のようにして制約付き2次バイナリー最適化問題を解く。

(1) 拡張ラグランジュ関数による最小化問題 線形不等式制約に y を導入する。その上で、障壁関数だけでな

く、制約周辺での目的関数の傾きを打ち消すようなラグランジュ乗数項を目的関数に加えた拡張ラグランジュ関数にする。すると、求解は、この拡張ラグランジュ関数の最小化問題になり、ラグランジュ乗数項の導入によって、 μ を大きく取る必要がなくなる(問題点②への対策)。
 (2) 二つの部分問題への分割 拡張ラグランジュ関数の最小化は、 y と μ を固定して x を求める最小化部分問題Aと、 x と μ を固定して y を求める最小化部分問題Bに分割する。Aは、制約なし2次バイナリー最適化問題に帰着できるので、制約がない分、SBMで効率良く解ける。Bは、解析的に解ける問題に帰着できるので、時間の掛かる解の探索が不要になる。

いずれの問題も、元の目的関数の係数行列 Q と、線形不等式制約の上限値を表す行列 A_{mi} , B_m を基に、SBM内部で新たな目的関数を容易に生成できる(問題点①への対策)。

(3) AとBの求解 Aの解 x を用いて次のBを解き、Bの解 y を用いて次のAを解くことを反復して近似解へと収束させていく。このとき、 x と y を用いて、 μ の値も同時に更新する。すなわち、 μ の調整は自動である(問題点③への対策)。

拡張ラグランジュ探索によって、問題点①, ②, ③の解決が期待できる。

5. 拡張ラグランジュ探索による自動化の評価

5.1 拡張ラグランジュ探索による自動化

まず、求解の準備と実行に労力が掛かる問題点①と③がどのように解決されているかを確認する。

図4は、4章で説明した拡張ラグランジュ探索に基づく求解手順を、イジングマシンによる一般的な求解手順と比較したものである。拡張ラグランジュ探索では、 Q_{ij} , A_{mi} , B_m を入力データとしてSBMに与えれば、近似解を得られる。一般的な求解手順で利用者の負担となっていた、制約条件の組み込みと μ の調整は不要である。これにより、マネージドサービスに求められる使いやすさが実現できたと考える。

5.2 拡張ラグランジュ探索の精度評価

良い解を得ることが困難という問題点②と③が解決されたかどうかを、QPLIBベンチマークセット(A Library of Quadratic Programming Instances)⁽³⁾を用いた性能評価で確認した。QPLIBから、線形不等式制約付き非凸2次バイナリー最適化問題(非凸:最適解を探すのが難しい問題種別)の全91問を選び、拡張ラグランジュ探索で近似解を得て、QPLIBが公開しているBest-Known解(種類の様々なソルバーによる最高記録)と比較した。SBMは、AWS

(Amazon Web Services) のp3.2xlarge GPU インスタンスを用い、時間制限30分の下で実行した。表1にその結果を示す。

Best-Known 解と同等以上の解を得た割合は、行列 Q の

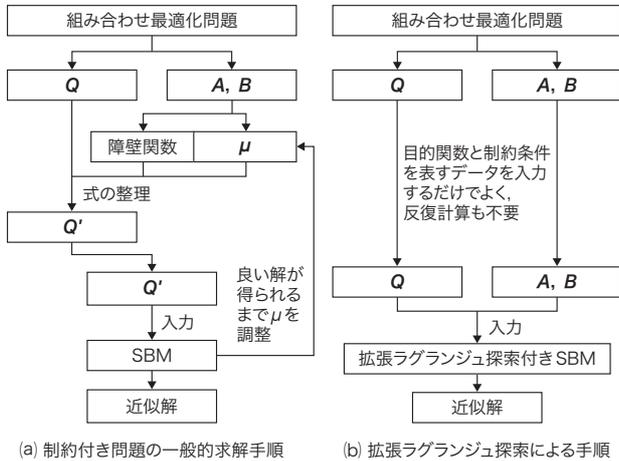


図4. 開発手法による求解手順

拡張ラグランジュ探索によって、一般的求解手順で必要だった制約条件の組み込みや反復計算などが不要になった。

Flows of processes to obtain nearly optimal solutions

表1. QPLIBを用いた拡張ラグランジュ探索の性能評価結果

Results of performance evaluation using QPLIB (library of quadratic programming instances)

条件ごとの結果が得られた割合	sparse 問題	dense 問題
BBest-Known 解と同等以上 (QPLIB に解がないものを含む) (%)	61	36
30分で実行可能解を得た (%)	91	86
30分で実行可能解を得られず (%)	9	14

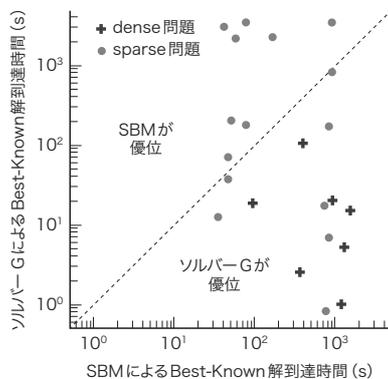


図5. QPLIBを用いたBest-Known 解到達時間の比較

QPLIBでBest-Known 解に到達した問題の計算時間を比較すると、SBMは、sparse 問題で優位である。

Comparison of time to reach best-known solutions of conventional and newly developed methods evaluated using QPLIB

非ゼロ要素割合が50%以下の問題 (sparse 問題と呼ぶ) で61%, 50%を超える問題 (dense 問題と呼ぶ) で36%であった。ただし、この中にはQPLIBにBest-Known 解が登録されていないものも含まれている。実行可能解を得た割合は、それぞれ91%, 86%だった。更に精度の向上を図っていく必要はあるが、 μ 調整の自動化によって、近似解を得るのは困難ではなくなったと考える。

図5は、厳密解法である分枝限定法によるソルバー G⁽⁴⁾とSBMの両方でBest-Known 解に到達した22問について、その計算時間を示している。ソルバー Gは、時間制限60分である。sparse 問題ならばSBMが優位なものが多数となった。問題の特性に応じて解法を選ぶか、両方で求解して良い方を選ぶという手法が有効と考える。

6. あとがき

制約付き2次バイナリー最適化問題に対して、拡張ラグランジュ探索という新しい手法を考案し、 μ などのパラメータの自動調整を可能にして、マネージドサービスに求められる使いやすさを実現した。現在、この自動調整手法を適用したSBMは、幾つかの分野で評価中であり、金融分野では実運用の準備に入っている。

今後は、拡張ラグランジュ探索の実問題への適用とともに、更なる大規模化と高精度化を進め、実用化・事業化を推進していく。また、イジングモデル自体は汎用的であるが、顧客が抱える実問題との間にはギャップがあるため、そのギャップを埋め、より顧客に近い実問題を直接解けるようにして、サービスの高度化や自動化も進めていく。

文献

- (1) Goto, H. et al. Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems. Science Advances. 2019, 5, 4, eaav2372.
- (2) Goto, H. et al. High-performance combinatorial optimization based on classical mechanics. Science Advances. 2021, 7, 6, eabe7953.
- (3) Zuse Institute Berlin. "QPLIB: A Library of Quadratic Programming Instances". <http://qplib.zib.de/index.html>, (accessed 2021-06-10).
- (4) Mittelman, H. "Binary Non-Convex QPLIB Benchmark". <http://plato.asu.edu/ftp/qplib.html>, (accessed 2021-06-10).



鈴木 賢 SUZUKI Masaru, D.Sc.
東芝デジタルソリューションズ(株)
ICTソリューション事業部 エンベデッドシステム第二部
博士(理学)
Toshiba Digital Solutions Corp.



泉 泰一郎 IZUMI Yasuichiro, M.Eng.
東芝デジタルソリューションズ(株)
ソフトウェアシステム技術開発センター
Toshiba Digital Solutions Corp.