量子ニューラルネットワークを用いた組合せ最適化及びその応用

Combinatorial Optimization by Quantum Neural Networks and Its Applications

長谷川幹雄 Mikio HASEGAWA

アブストラクト 近年、イジングハミルトニアンエネルギー最小化を利用した最適化問題の解法が検討されている (S. Utsunomiya et al., Optics Express 19, 2011). また、そのような手法を大規模に実装する技術の研究も進んでいる (T. Inagaki et al., Science, 234, 2016). 本稿では、このようなハードウェアで実現する量子ニューラルネットワークを用いた組合せ最適化アルゴリズムを検討する. 対象とする組合せ最適化問題の目的関数は、イジングスピンの相互結合に実装することとなる. 相互作用によるエネルギー最小化を用いた最適化問題の解法は、Hopfield-Tank Neural Network を用いた従来研究において様々な組合せ最適化問題に適用されてきた. 本稿では、Hopfield-Tank Neural Network を用いた巡回セールスマン問題の解法を、量子ニューラルネットワークで動作させる方法を説明する. シミュレーション結果を示しながら、提案手法の有効性を示す.

キーワード 量子ニューラルネットワーク, 相互結合ニューラルネットワーク, 組合せ最適化, 巡回セールスマン問題

Abstract An optimization method based on energy minimization of the Ising Hamiltonian has been proposed in recent research (S. Utsunomiya et al., Optics Express 19, 2011). Large-scale implementation of such a high-speed optimization method has also been proposed. (T. Inagaki et al., Science, 234, 2016). This paper introduces the quantum neural networks, that can be realized by high-speed devices and applies them to combinatorial optimization problems. In such schemes using quantum neural networks, an objective function for target optimization problems has to be implemented on mutual connections. In this paper, a mutually connected neural network has been implemented on quantum neural networks to solve combinatorial optimization problems. The simulation results show that quantum neural networks can solve combinatorial optimization problems.

Key words Quantum Neural Networks, Mutually Connected Neural Networks, Combinatorial Optimization, Traveling Salesperson Problems

1. はじめに

相互結合ニューラルネットワークは、エネルギー関数を自律的に減少させるので、組合せ最適化問題にける最小値探索への応用が可能である⁽¹⁾. しかしながら、そのダイナミクスはローカルミニマムの状態で停止してしまうことがしばしばあり、最適解が得られないことが多い. そのため、確率的な雑音^{(2)~(4)}やカオスダイナミクス^{(5),(6)}を適用して良好な解を得る手法が提案されてきた. しかし、相互結合ニューラルネットワークによる最適化手法は、対象とする問題の状態を 0 または 1 のニューロンの状態で表現する必要があり、他のヒューリスティック解法^{(7),(8)}と比較すると性能は低いという問題があった.

近年、量子ニューラルネットワーク^{(9)~(11)}を用いた最適化手

法が、非常に高速に、かつ、規模の大きな問題にも適用できる可能性が示されている. これは、イジングモデルにおけるハミルトニアンを最小化する. 既に、ハードウェアの開発も進み、Max-Cut 問題において、その高速性と有効性が実証されている. 組合せ最適化問題を高速に解くハードウェアとして、非常に期待できるものである.

本稿では、相互結合ニューラルネットワークを用いたアルゴリズムを、量子ニューラルネットワークに実装することによって、様々な組合せ最適化問題を解くことができることを説明する. まず、文献(1)で Hopfield と Tank が相互結合ニューラルネットワークを適用した巡回セールスマン問題への応用方法から説明し高速な量子ニューラルネットワークが適用可能であることを示す.

2. 量子ニューラルネットワーク

本稿で用いる量子ニューラルネットワークは、式 (1) に示すイジングモデルのハミルトニアンを最小化するように振る舞う.

長谷川幹雄 正員 東京理科大学工学部電気工学科
E-mail hasegawa@ee.kagu.tus.ac.jp
Mikio HASEGAWA, Member (Faculty of Engineering, Tokyo University of Science, Tokyo, 125-8585 Japan).
電子情報通信学会 基礎・境界サイエティ
Fundamentals Review Vol.11 No.2 pp.113-117 2017 年 10 月
©電子情報通信学会 2017

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N \lambda_i \sigma_i. \quad (1)$$

ただし、 σ_i は i 番目のイジングスピンの状態（1 または -1）、 J_{ij} は i 番目のイジングスピンと j 番目のイジングスピンとの間の相互作用、 λ_i は i 番目のイジングスピンに加わる外部の影響である。このニューラルネットワークは、相互結合を有するネットワークでは、ノード数の増加につれて結合本数はその二乗で増えてしまうので、結合をどのように実現するかが問題となる。

文献(9)では、光パラメトリック発振器 (OPO: Optical Parametric Oscillator) の位相をスピンとして用いるコヒーレントイジングマシンが提案されている。ノード数分の光パルスファイバの中で伝搬させ、ノード間の結合を外部の FPGA 等を介して各々の光パルスにフィードバックする方法が提案されている。これによって、大規模な相互結合の実現が可能となっている。文献(10)では、実際に 2000 ノードの量子ニューラルネットワークの実装に成功しており、その動作が示されている。本稿では、このようなハードウェアを用いることを前提とした、組合せ最適化問題の高速解法を説明する。

3. 相互結合ニューラルネットワークを用いた組合せ最適化問題の解法

相互結合ニューラルネットワークを用いて、様々な組合せ最適化問題の解の探索を行うことができる⁽¹⁾。以下では、エネルギー関数の自律的減少を説明し、巡回セールスマン問題への適用例を紹介する。

3.1 相互結合ニューラルネットワークとエネルギー関数の自律的減少

N 個のニューロンを相互結合したニューラルネットワークの状態 $x_i(t)$ の更新を、以下のように定義する。

$$x_i(t+1) = u \left[\sum_{j=1}^N w_{i,j} x_j(t) - \theta_i \right] \quad (2)$$

ここで、 $w_{i,j}$ はニューロン j から i への結合重みであり、 θ_i はニューロン i の発火のしきい値、 u はヘビサイド関数 ($y \geq 0$ のとき $u[y] = 1$, $y < 0$ のとき $u[y] = 0$) とする。

このようなニューラルネットワークにおいて、相互結合を双方向に等しくし ($w_{i,j} = w_{j,i}$)、自己結合をゼロ ($w_{i,i} = 0$) に設定して、ニューロンの状態を一つずつ非同期に更新していくと、最終的にニューロン状態の変化が起こらなくなる。このニューラルネットワークは、各ニューロンを式 (1) で非同期に更新するたびに、エネルギー関数

$$E(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{i,j} x_i x_j + \sum_{i=1}^N \theta_i x_i \quad (3)$$

を必ず減少させる。すなわち、ニューロンの状態更新のみで、自律的に $E(\mathbf{x})$ の極小値を探索する。このエネルギー関数の自律的な最小化を利用して、組合せ最適化問題における最小値の探

索を行うことができる。

このエネルギー関数の減少を組合せ最適化問題の解探索に応用するためには、まず、探索する解の状態を 1 または 0 の変数で表現し、最小化する目的関数をニューロンの状態 x_i の関数として定式化する。次に、それを式 (3) のエネルギー関数 $E(\mathbf{x})$ の形に変形し、係数比較により結合重み $w_{i,j}$ としきい値 θ_i を得る。得られた $w_{i,j}$ と θ_i を用い、式 (2) でニューラルネットワークの状態を更新していくことで目的関数を減少させることが可能となり、ニューラルネットワークの状態が探索した解を表現する。

3.2 巡回セールスマン問題への適用例

巡回セールスマン問題は、 n 個の都市の座標が与えられたときに、一つの都市をスタートし、全都市を一度ずつ訪問して、最後にスタートした都市に戻ってくる巡回路の中で、最短のものを求める組合せ最適化問題である。この解を相互結合ニューラルネットワークを用いて探索するために、まず、探索する巡回路を、ニューロンの状態で表現する。Hopfield と Tank の手法⁽¹⁾では、 n 都市の問題に対して $n \times n$ 個のニューロン $x_{i,j}$ を用い、 i を都市の ID とし、 j を訪問順の番号と定義する。すなわち、 $x_{i,j} = 1$ となったとき、都市 i を j 番目に訪問することを意味する。ニューラルネットワークが示す巡回路の例を図 1 に示す。図 1 (a) のように発火した場合には、図 1 (b) のような順番で都市を訪問することを意味する。

図 1 の二次元グリッド上に並べられたニューロンは、 i と j の二つのラベルを持つので、ニューラルネットワークの状態更新式は式 (4) のようになる。

$$x_{i,j}(t+1) = u \left[\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N w_{i,j,k,l} x_{k,l}(t) - \theta_{i,j} \right] \quad (4)$$

この状態更新式によって減少させられるエネルギー関数は、式 (5) のようになる。

$$E(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N w_{i,j,k,l} x_{i,j} x_{k,l} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \theta_{i,j} x_{i,j} \quad (5)$$

ただし、 $w_{i,j,k,l}$ は、 (i,j) 番目のニューロンと (k,l) 番目のニューロンとの間の相互結合の重み、 $\theta_{i,j}$ は、 (i,j) 番目のニューロン

図 1 ニューラルネットワークの状態が示す巡回路

の発火のしきい値である。

この表現を用いると、巡回路の長さに対応する目的関数として、以下のような式を用いることができる。

$$E_1 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N d_{i,k} x_{i,j} (x_{k,j(\bmod N)+1} + x_{k,j-2(\bmod N)+1}) \quad (6)$$

ただし、 $d_{i,k}$ は都市 i と都市 k の間の距離である。 E_1 を減少させると、全体の経路長は短くなる。しかし、これだけではニューラルネットの状態が巡回路を形成しない。各都市を一度ずつ訪問させるためには、

$$E_2 = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N x_{i,j} - 1 \right)^2 \quad (7)$$

を 0 に最小化する必要がある。また、各訪問順には一つの都市しか訪問できないので、

$$E_3 = \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^N x_{i,j} - 1 \right)^2 \quad (8)$$

も最小化しておく必要がある。

式 (6)~(8) の E_1 , E_2 , E_3 をニューラルネットワークによって最小化するための、結合重み $w_{i,j,k,l}$, 及び、しきい値 $\theta_{i,j}$ を求める。ニューロン状態を $x_{i,j}$ としているので、状態更新式とエネルギー関数は、二次のインデックスを持つ形式にする。この変形では、 $x_{i,j} \times x_{i,j} = x_{i,j}$ を用い、自己結合を 0 にすることに注意する。まず式 (6) は、以下のように変形できる。

$$E_1 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N d_{i,k} \cdot (\delta_{j(\bmod N)+1,l} + \delta_{j-2(\bmod N)+1,l}) x_{i,j} x_{k,l} \quad (9)$$

ただし、 $\delta_{i,k}$ はクロネッカーデルタで、 $i = k$ のときは $\delta_{i,k} = 1$, $i \neq k$ のときは $\delta_{i,k} = 0$ である。式 (9) をエネルギー関数と比較することで、 E_1 を減少させる結合重みは、

$$w_{i,j,k,l} = -2d_{i,k} (\delta_{j(\bmod N)+1,l} + \delta_{j-2(\bmod N)+1,l}) \quad (10)$$

のように得られる。式 (7) は、以下のように変形できる。

$$E_2 = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \delta_{i,k} (1 - \delta_{j,l}) x_{i,j} x_{k,l} - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_{i,j} + N \quad (11)$$

式 (11) をエネルギー関数と比較すると、 E_2 を減少させる結合重み $w_{i,j,k,l}^2$ 及びしきい値 $\theta_{i,j}^2$ が得られる。

$$w_{i,j,k,l}^2 = -2\delta_{i,k} (1 - \delta_{j,l}) \quad (12)$$

$$\theta_{i,j}^2 = -1 \quad (13)$$

E_3 を減少させる結合重み、及びしきい値も、式 (8) から同様に計算すると、結合重み $w_{i,j,k,l}^3$ 及びしきい値 $\theta_{i,j}^3$ がそれぞれ得られる。

$$w_{i,j,k,l}^3 = -2\delta_{j,l} (1 - \delta_{i,k}) \quad (14)$$

$$\theta_{i,j}^3 = -1 \quad (15)$$

巡回セールスマン問題の解探索を行うためには、 E_1 , E_2 , 及び E_3 をいずれも最小化する必要がある。パラメータ A , B , 及び C を用いて、全体の目的関数を $E_{\text{TSP}} = AE_1 + BE_2 + CE_3$ と置く。これを減少させる結合重み、及び、しきい値は、

$$w_{i,j,k,l}^{\text{TSP}} = -Ad_{i,k} (\delta_{j(\bmod N)+1,l} + \delta_{j-2(\bmod N)+1,l}) - B\delta_{i,k} (1 - \delta_{j,l}) - C\delta_{j,l} (1 - \delta_{i,k}) \quad (16)$$

$$\theta_{i,j}^{\text{TSP}} = -\frac{B+C}{2} \quad (17)$$

と得られる。これらを用いて、ニューロンの状態更新をする。ここで、ニューラルネットワークの状態が探索された巡回路を表現するようになる。

しかし、この手法は目的関数を減少させるのみであり、ローカルミニマムで探索が止まってしまう。そこで、性能を改善するために、確率的な揺らぎやカオスを用いてニューラルネットワークの状態を揺らがせ、より良い解を探索させる手法が用いられる^{(2),(3),(6)}。本稿では、量子ニューラルネットワークを用いて、良好な解を高速に探索する手法を説明する。

4. 量子ニューラルネットワークを用いた高速な組合せ最適化の応用例

本章では、Hopfield-Tank の相互結合ニューラルネットワークを用いた組合せ最適化問題の解法を、量子ニューラルネットワークで動作させる手法を述べる。式 (1) を最小にする量子ニューラルネットワークは、以下のモデルでシミュレーションできる。

$$\frac{dc_{ij}}{dt} = (-1 + p - c_{ij}^2 - s_{ij}^2)c_{ij} + \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \xi_{ijkl} c_{kl} - \lambda_{ij} \quad (18)$$

$$\frac{ds_{ij}}{dt} = (-1 - p - c_{ij}^2 - s_{ij}^2)s_{ij} + \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \xi_{ijkl} s_{kl} - \lambda_{ij} \quad (19)$$

ただし、 c_{ij} と s_{ij} はそれぞれ (i,j) 番目の光パルスの同相成分と直交成分であり、 ξ_{ijkl} は (i,j) 番目と (k,l) 番目のパルスの間の相互作用、 λ_{ij} は (i,j) 番目の光パルスの外部磁界に相当する項、 p は OPO に対する注入光のポンプレートである。

4.1 量子ニューラルネットワークを用いた巡回セールスマン問題の解法

式 (9),(10) で導出した結合及びしきい値は、1 と 0 の状態を持つニューロンで構成された相互結合ニューラルネットを用いて巡回セールスマン問題を解くものである。これを基本として、量子ニューラルネットワークへと拡張する。

相互結合ニューラルネットワークでは、 $x_{i,j} = 1$ となった時はニューロンの発火とみなしたが、量子ニューラルネットワークでは、 $c_{ij} > 0$ となった場合を発火とみなし、都市 i を j 番目に訪問することに対応させる。 c_{ij} は正の値、または負の値に成長していくので、この二つの状態をそれぞれ 1 と -1 として定式化することとする。そのため、式 (16) 及び (17) で導出した結合としきい値を、1 と -1 を出力に持つニューロンモデルを用いると仮定して変更する。

出力が 1 または 0 のニューロンの出力を、出力が 1 または -1 に変換するために、 $\hat{x}_{ij} = 2x_{ij} - 1$ を用いる。このニューロンを用いた際の出力は、以下のように定義する。

$$\hat{x}_{i,j}(t+1) = r \left[\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \hat{w}_{i,j,k,l} \hat{x}_{k,l}(t) - \hat{\theta}_{i,j} \right] \quad (20)$$

ただし、 $y \geq 0$ のとき $r[y] = 1$ 、 $y < 0$ のとき $r[y] = -1$ とする。これを元の $w_{i,j,k,l}$ 及び $\theta_{i,j}$ で表現するために、 $x_{ij} = \hat{x}_{ij}/2 + 1$ を用いて式 (4) を以下のように変形する。

$$\hat{x}_{i,j}(t+1) = r \left[\sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{w_{i,j,k,l}}{2} \hat{x}_{k,l}(t) - \left(\theta_{i,j} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{w_{i,j,k,l}}{2} \right) \right] \quad (21)$$

これより、 $\hat{w}_{i,j,k,l}$ 及び $\hat{\theta}_{i,j}$ は以下のように得られる。

$$\hat{w}_{i,j,k,l} = \frac{w_{i,j,k,l}}{2} \quad (22)$$

$$\hat{\theta}_{i,j} = \theta_{i,j} - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{w_{i,j,k,l}}{2} \quad (23)$$

式 (16) 及び (17) で得られた重み及びしきい値を、 $\hat{w}_{i,j,k,l}$ 及び $\hat{\theta}_{i,j}$ に変換すると、式 (20) に示すような出力が 1 と -1 のニューラルネットワークでも巡回セールスマン問題が解けるようになる。

文献(1)で用いられた問題にこの手法を適用した結果を、図 2 に示す。縦軸は、注入光のポンプレート p であり、横軸は、加えたノイズの大きさである。また、この問題を解いている際の各量子ニューロンの振舞いの時系列を、図 3 に示す。図 3 より、量子ニューラルネットワークの状態が、探索をしながら徐々に収束していく様子が分かる。図 2 から、パラメータを調整する

図 2 シミュレーションによる性能評価

図 3 量子ニューラルネットワークの挙動

ことによって、100%の割合で最適解を探索することができていることが分かる。

5. ま と め

本稿では、量子ニューラルネットワークを用いた組合せ最適化アルゴリズムを紹介した。このアルゴリズムは、コヒーレントイジングマシンに実装することにより、非常に高速に実行することが可能である⁽¹⁰⁾。本稿で紹介した方法を応用することによって、様々な組合せ最適化問題に、高速な量子ニューラルネットワークを適用することが可能になる。

今後は、更に様々な種類の組合せ最適化問題に適用し、有効性を確認していく。特に、高速な最適化が必要な無線通信における様々な組合せ最適化問題に適用していく。

謝辞 本研究は、総合科学技術・イノベーション会議により制度設計された革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) により、科学技術振興機構を通して委託されたものである。

文 献

- (1) J. J. Hopfield and D. W. Tank, "Neural computation of decisions in optimization problems," *Biol. Cybern.*, vol. 52, no. 3, pp. 141–152, 1985.
- (2) E. Aarts and J. Korst, "Boltzmann machine for the traveling salesman problems," *Eur. J. Oper. Res.*, vol. 39, no. 1, pp. 79–95, 1989.
- (3) Y. Akiyama, A. Yamashita, M. Kajiura, and H. Aiso, "Combinatorial optimization with Gaussian machines," *Proc. IEEE International Joint Conference on Neural Networks*, pp. 533–540, 1989.
- (4) D. E. Van den Bout and T. K. Miller, "Improving the performance of the Hopfield-Tank neural network through normalization and annealing," *Biol. Cybern.*, vol. 62, no. 2, pp. 129–139, 1989.
- (5) H. Nozawa, "Solution of the optimization problem using the neural network model as a globally coupled map," *Physica D*, vol. 75, no. 1–3, pp. 179–189, 1994.
- (6) M. Hasegawa, T. Ikeguchi, T. Matozaki, and K. Aihara, "An analysis on additive effects of nonlinear dynamics for combinatorial optimization," *IEICE Trans. Fundamentals*, vol. E80-A, no. 1, pp. 206–213, Jan. 1997.
- (7) M. Hasegawa, T. Ikeguchi and K. Aihara, "Combination

of chaotic neurodynamics with the 2-opt algorithm to solve traveling salesman problems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, no. 12, pp. 2344–2347, 1997.

- (8) M. Hasegawa, T. Ikeguchi, K. Aihara, and K. Itoh, “A novel chaotic search for quadratic assignment problems,” *Eur. J. Oper. Res.*, vol. 139, no. 3, pp. 543–556, 2002.
- (9) S. Utsunomiya, K. Takata, and Y. Yamamoto, “Mapping of Ising models onto injection-locked laser systems,” *Opt. Express*, vol. 19, no. 19, pp. 18091–18108, 2011.
- (10) T. Inagaki, Y. Haribara, K. Igarashi, T. Sonobe, S. Tamate, T. Honjo, A. Marandi, P. L. McMahon, T. Umeki, K. Enbutsu, O. Tadanaga, H. Takenouchi, K. Aihara, K. Kawarabayashi, K. Inoue, S. Utsunomiya, and H. Takesue, “A coherent Ising machine for 2000- node optimization problems,” *Science*, vol. 354, no. 6312, pp. 603–606, 2016.
- (11) P. L. McMahon, A. Marandi, Y. Haribara, R. Hamerly, C. Langrock, S. Tamate, T. Inagaki, H. Takesue, S. Utsunomiya, K. Aihara, R. L. Byer, M. M. Fejer, H. Mabuchi, and Y. Yamamoto, “A fully-programmable 100- spin coherent Ising machine with all-to-all connections,” *Science*, vol. 354, no. 6312, pp. 614–617, 2016.

(CCS 研究会提案, 平成 29 年 7 月 7 日受付 8 月 1 日最終受付)

長谷川幹雄 (正員)

平 7 東京理科大・基礎工・電子応用卒, 平 9 同大学院基礎工学研究科修士課程了, 平 12 同博士後期課程了, 博士 (工学). 平 9-12 日本学術振興会特別研究員 (DC1). 平 12 郵政省通信総合研究所 (現在の国立研究開発法人情報通信研究機構) 入所. 平 19 東京理科大・工・第一部・電気・講師, 平 22 同准教授を経て, 平 27 から同教授. カオス, ニューラル

ネットワークに関する基礎研究, モバイルネットワーク, コグニティブ無線に関する応用研究などに従事. 平 18-21 本会通信ソサイエティ英文論文誌編集委員会編集委員. 平 23-29 *Communications Express* 編集委員会編集委員. 平 25-26 複雑コミュニケーションサイエンス研究専門委員会委員長. 平 26-28 非線形問題研究専門委員会幹事. 平 27 本会回路とシステムワークショップ実行委員長. 平 20, 21 本会通信ソサイエティ活動功労賞, 平 26, 28 基礎・境界ソサイエティ貢献賞, 平 28 NOLTA ソサイエティ貢献賞, 平 24 ソフトウェア無線研究会論文賞, 平 27 通信ソサイエティ論文賞 (英文論文誌 B Best Paper Award) など各受賞.