アメーバに着想を得た解探索アルゴリズムとそのナノフォトニクス実装

青野 真士^{1,2}

¹東京工業大学 地球生命研究所 (〒152-8550 東京都目黒区大岡山2-12-1-17E)

²科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町4-1-8)

Amoeba-Inspired Solution-Searching Algorithm and its Nanophotonics Implementation

Masashi AONO^{1,2}

¹Earth-Life Science Institute, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1-17E Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8550

²PRESTO, Japan Science and Technology Agency, 4-1-8 Honcho, Kawaguchi, Saitama 332-0012

(Received December 7, 2016)

A single-celled amoeba (a plasmodial slime mold), which exhibits complex spatiotemporal oscillatory dynamics, has shown to be used to search for a solution to a combinatorial optimization problem. Photoexcitation transfer phenomena in a certain quantum-dot network mediated by optical near-field interactions generate stochastic spatiotemporal dynamics. Here we review a novel computing architecture that exploits the spatiotemporal dynamics in the quantum-dot network to solve the satisfiability problem, which is an NP-complete problem.

Key Words: Natural Computing, Combinatorial Optimization, Non-von-Neumann Architecture, Nanophotonics

1. はじめに

21世紀に入り加速的發展を遂げる情報通信技術を担うのは、半導体デバイスの微細化限界に挑戦するハードウェア産業と、人工知能プログラムの威力を誇示するソフトウェア産業である。フォン・ノイマンが半世紀以上前に創始したデジタル計算パラダイムは、ハードとソフトを分離することで、同じプログラムを異なるデバイスで実行できる汎用性を実現し、両産業の分業による成長を促進した。しかし、その延長線上で次の半世紀、とくに個別の用途をもつ無数の小型機器が接続されるIoT時代を先導するイノベーションを本当に起こせるだろうか？自然界に目を向けると、生物は環境適応的に行動できる知的能力を備えた小型・低消費エネルギーの計算デバイスであると見なせる¹⁾。そこにハードとソフトの区別はなく、個別の用途に特化した分子や細胞の集団が環境と相互作用し情報を処理している。こうした自然現象が有する膨大な計算パワーを活かす新たな計算パラダイムこそが、真のイノベーションの萌芽になるのではないだろうか？

著者らは、自律分散型情報処理システムの典型例であるアメーバ状単細胞生物・粘菌(*Physarum polycephalum*)のユニークな並列処理法に着想を得て、重要な組合せ最適化問題である「充足可能性問題」の膨大な数の解候補の中から、揺らぎを伴った試行錯誤的な探索により正解を

高速に発見できるアルゴリズム「アメーバモデル」を定式化した^{2,3)}。アメーバモデルは、従来型デジタルコンピュータ上でソフトウェアとして実行することもできるが、時空間ダイナミクスとして表現されているため、専用のハードウェアを構築して物理的に実装するのに適している。従来のシリコンデバイスとは異なる確率的な挙動を示す先端デバイスを用いて実装することにより、様々な応用で威力を発揮する超小型・超低消費エネルギーの非ノイマン型コンピュータが開発できると期待される。現在のところ、複数のコンデンサを並列接続したアナログ電子回路^{4,5)}およびデジタル電子回路(FPGA)により、物理的に実装されたアメーバモデルの正常動作が確認されている。さらに、熱揺らぎを利用して確率的に揺らいだ応答を実現する「電子ブラウンラチェット」と呼ばれる半導体ナノワイヤ素子を用いた実装も提案されている⁶⁾。本論文では、ナノスケールの量子ドットのネットワークにおいて、近接場光相互作用を介して光エネルギー(励起子)の移動先となる量子ドットが選択される確率過程を活用することで、アメーバモデルをナノフォトニクスの技術を用いて実装できることを理論的に示した著者らの研究^{7,8)}について概説する。

2. アメーバモデル(AmoebaSAT)

充足可能性問題(Satisfiability Problem: SAT)とは、複

数の論理的制約条件 (Fig. 1) を満たすよう複数の論理変数に真偽値を割当てることができるか判定する一種の制約充足問題である⁹⁾。SATを高速に解けるシステムは、自動推論や情報セキュリティなど、広範な人工知能応用において威力を発揮すると期待される¹⁰⁾。ところが、NP完全と呼ばれる計算複雑性のクラスに属するSATを、多項式時間で解くアルゴリズムは知られていない。その解候補の数は問題サイズ N (論理変数の数)に対して指数関数的(2^N)に増大し組合せ爆発を引き起こす。

「アモebaモデル(AmoebaSAT)」では、各変数の真偽値がアモebaの足が伸びた状態あるいは縮んだ状態により表現され、ある組合せの足が伸びたとき論理的制約条件により禁じられる足の伸長を抑制するよう導く「バウンスバック制御」(後述)と呼ばれる一種のフィードバック制御の下で、全ての足が並行的に伸び縮みを繰り返す (Fig. 1)。各足のバウンスバック制御に対する応答は確率的に揺らぐため、試行錯誤的な解探索が実現し、全ての足が各自の伸びたあるいは縮んだ状態を維持できる安定状態に到達した時、SAT解が得られる (Fig. 2)。

アモebaモデルの解探索性能を従来の確率的局所探索アルゴリズムと比較すると、制約条件をランダムに生成して作られた問題例につき、前者は後者より圧倒的に少ない反復回数で解に到達することがわかった^{2,3,6,8)}。

Fig. 1 Bounceback control in the amoeba-inspired algorithm that is applied in reference to a SAT instance.

Fig. 2 A SAT solution $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (1, 1, 1, 1)$, which is found when the spatiotemporal dynamics of the amoeba-inspired algorithm stabilized.

一回の反復処理において、従来のアルゴリズムが一つの変数の値のみを更新するのにに対し、アモebaモデルは全変数の状態を同時並行的に変化させるため、状態空間中のより遠方へとより短時間で移動できる。この特長がアモebaモデルの高い解探索能力をもたらしていると考えられる。したがって、アモebaモデルの反復処理を物理実装により高速に実行できる専用ハードウェアが開発できれば、ノイマン型コンピュータで走る従来型アルゴリズムより劇的に短時間でSAT解を探索できる可能性がある。

3. アモebaモデルのナノフォトニクス実装

3.1 光励起移動の確率的時空間ダイナミクス

適切な二つの異なるサイズをもつナノスケールの量子ドット (Quantum Dot: QD) を近接場光相互作用が可能な距離 (QDのサイズ程度) に配置すると、小さい方のQD (小QD) への光照射により生じた光励起 (励起子) は、それと共鳴するエネルギー単位を持つ大きい方のQD (大QD) へと確率的に移動する (Fig. 3)。移動した光励起は、やがてより低い準位へと緩和し、輻射に伴ってエネルギーが散逸する。一方、大QDに光が照射されている場合は、そこに生じた光励起が下位のエネルギー準位を占有するので、いわゆるstate-filled状態を作り出すことができる。大QDがstate-filled状態にあるとき、小QDにある光励起は、大QDへの移動を抑制される (移動確率が低減する) ため、小QDから輻射して散逸するか、あるいは、他の位置にある共鳴準位をもつ大QDを探索して移動する。

こうした光励起移動現象はドレスト光子モデル¹¹⁾により理論的な説明がなされており、その再現性はInGaAs, ZnO, CdSe等のナノ構造において実験的に確認されている。二層のInGaAs量子ドットによる室温での光励起移動も実現されている¹²⁾。さらに、その光励起移動は、従来型の電子デバイスによるビットフリップ回路と比較して、約1万分の1の消費エネルギーで実現できることが示されている¹³⁾。

3.2 バウンスバック制御

本システムでは、 N 変数のSATを解くために、エネルギー供給源となる1個の小QDと、 $2N$ 個の大QDを用いる (Fig. 4)。大QDには変数名 $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ と真偽値 $v \in \{0, 1\}$ がラベルされている。いま、ある離散的な時間ステップ (反復回数) t において、 $QD_{i,v}$ への光励起移動が生じ、そこからの輻射 (発光) が観測されたとき、これを $Y_{i,v}(t) = 1$ と書くことにし、本システムが $x_i = v$ という割当てを検討中であると考え、輻射が観測されないときは $Y_{i,v}(t) = 0$ と書く。 $QD_{i,v}$ がstate-filledされた状態とそうでない状態を、それぞれ $L_{i,v}(t) = 1$ と $L_{i,v}(t) = 0$ と書くとき、輻射 $Y_{i,v}(t) = 1$ は、それぞれ確率 $P^+_{i,v}(t)$ と $P^-_{i,v}(t)$ で発生するものとする (ただし $P^+_{i,v}(t) < P^-_{i,v}(t)$)。すなわち、「バウンスバック信号」の適用は $L_{i,v}(t) = 1$ として表現される。さらに、輻射 $Y_{i,v}$ の累積量を表現する変数として、

次のように定義される $X_{i,v} \in \{-1, 0, 1\}$ を導入する.

$$X_{i,v}(t+1) = \begin{cases} X_{i,v}(t) + 1 & (\text{if } Y_{i,v}(t) = 1 \text{ and } X_{i,v}(t) < 1), \\ X_{i,v}(t) + 1 & (\text{if } Y_{i,v}(t) = 0 \text{ and } X_{i,v}(t) < -1), \\ X_{i,v}(t) & (\text{otherwise}). \end{cases} \quad (1)$$

こうして決まる累積輻射 $X(t) = (X_{1,0}(t), \dots, X_{N,1}(t))$ を毎時刻読み取り, 変数割当て $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ を次のように判定する.

$$X_i(t) = \begin{cases} 0 & (\text{if } X_{i,0}(t) = 1 \text{ and } X_{i,1}(t) \leq 0), \\ 1 & (\text{if } X_{i,1}(t) = 1 \text{ and } X_{i,0}(t) \leq 0), \\ x_i(t-1) & (\text{otherwise}). \end{cases} \quad (2)$$

バウンズバック信号 $L_{i,v}(t)$ は, 問題インスタンスに応じて定義される「バウンズバック規則」と呼ばれる禁止則に従い, すべての $X(t)$ の状態を参照して決定される. 例えば, Fig. 1 の状態では $X_{2,1}(t) = 1$ と $X_{3,0}(t) = 1$ が成立しており, これは $x_2 = 1$ と $x_3 = 0$ という割当てを表現している. この状況でFig. 1 のインスタンスの左から二番目の条件(not x_2 or x_3 or not x_4)に注目すると, これを充足するためには $x_4 = 1$ という割当ては許されない. そこで, $x_4 = 1$ を禁じるためにバウンズバック信号 $L_{4,1}(t) = 1$ を適用する. 同様に, 条件(x_1 or not x_2)と(x_1 or x_3)から $L_{1,0}(t) = 1$ が, (x_3 or not x_4)から $L_{4,1}(t) = 1$ が決定される. Fig. 1 では他にも $L_{2,0}(t) = 1$ と $L_{3,1}(t) = 1$ が適用されているが, これらはそれぞれ $x_2 = 1$ と $x_3 = 0$ という割当てに対する排中律を成立させるためである. こうした方針に従い, 全条件について変数間の相互依存関係を調査し, バウンズバック規則の集合が定義される(詳細は文献8)を参照).

システムの状態 $X(t)$ は, すべての (i,v) について $X_{i,v}(t) = 1 \Rightarrow L_{i,v}(t) = 0$ または $L_{i,v}(t) = 1 \Rightarrow X_{i,v}(t) \leq 0$ が成り立つとき, 「安定」である. 逆に, これらの条件が成立しないときは, $L_{i,v}(t)$ に依存して, 次ステップの $X_{i,v}(t+1)$ の符号が $X_{i,v}(t)$ のそれと異なるものとなる確率が高く, $X(t)$ が不安定になる. バウンズバック規則は, 正解の状態(Fig. 4)のみを安定可能とするように定義されているため, このシステムはバウンズバック制御を反復して試行錯誤的な探索を行い, インスタンスが解をもつならばその状態に到達して安定する. アメーバモデルのダイナミクスが安定することとその状態がSAT解を表現していることが同値であることは, 数学的に証明されている¹⁴⁾.

3.3 性能評価

アメーバモデルをナノフォトニクス実装した際に実現する解探索性能を評価するために, 最も単純な確率的局所探索アルゴリズムのうちの一つであるWSAT¹⁵⁾を取り上げ, 両者の性能を比較した. SATのベンチマーク問題のオンラインライブラリSATLIB[†]で提供されている各イ

Fig. 3 Stochastic spatiotemporal dynamics of photoexcitation transfer in a quantum-dot network.

Fig. 4 A SAT solution $(x_1, x_2, x_3, x_4) = (1, 1, 1, 1)$, which is found when the photoexcitation transfer dynamics in the quantum-dot network stabilized with constant radiation from exclusive QDs.

ンスタンスにつき, 約500回のモンテカルロシミュレーションを行い, 解に到達するのに要する反復回数(t)の平均を計測した. ここで扱ったベンチマーク問題は, Uniform Random-3-SATと呼ばれるクラスに属する, 変数の数 $N = 75$ で節の数 $M = 325$ の約40インスタンスである. Fig. 5 に, ナノフォトニクス実装版アメーバモデルとWSATを用いてシミュレーションを行なった結果を, 後者が解到達に要した反復回数の小さい順番でソートして示した. ナノフォトニクス実装版アメーバモデルは, より大きな反復回数を要する問題, すなわち, より難しい問題であればあるほど, WSATと比較してより少ない

Fig. 5 Performance comparison between nanophotonic implementation of AmoebaSAT (white circle) and WSAT (black dot) on the number of steps (iterations) required for reaching a SAT solution for 75-variable random 3-SAT instances with 325 clauses.

[†] <http://www.cs.ubc.ca/~hoos/SATLIB/benchm.html>

反復回数で解に到達した⁸⁾。アメーバモデルにおいては、こうした傾向は、変数の数が大きくなるにつれてより顕著になることが確認されている^{2,3,6,8)}。

4. おわりに

SATはNP完全問題であり、多くの複雑な組合せ最適化問題をSATに変換することができる。よって、高速なSAT解探索マシンには高い汎用性があり、実社会の多くの組合せ最適化の場面で活躍できると期待される。これまでに、アメーバモデルをアナログ回路^{4,5)}、デジタル回路、およびナノデバイス⁶⁻⁸⁾を用いて実装する方法が複数提案され、小さな問題サイズのSATについてはアナログ回路により正しく解探索を実行できることが物理的に実証されている⁵⁾。今後、大きなサイズのSATに対し、集積性、高速性、消費エネルギーなどの観点から従来手法と比較してどのような優位性を主張できるかを、詳細に検証していく必要がある。

アメーバモデルのナノフォトニクス実装を実験的に実現するには¹⁶⁾、現時点ではバウンスバック制御を実行するための装置を量子ドットのネットワークの外部に構成する必要があり、それとの通信が高速性のボトルネックになると予想される。そこで、外部の制御装置を導入せずに、量子ドットの適切な配置のみによってバウンスバック制御を実装する方法を模索している。これが実現すれば、ナノスケールの光励起移動現象の特長である高速性、省スペース性、低消費エネルギー性がより際立ち、自然現象が有する計算パワーを活かす新たな計算パラダイムの開拓につながるものと期待される。

謝 辞

本研究に関連した共同研究を行ってきた大津 元一(東京大)、葛西 誠也(北海道大)、川添 忠(東京大)、

金成 主(NIMS)、成瀬 誠(NICT)、野村 航(九州大)、原 正彦(東工大)、堀 裕和(山梨大)、已波 弘佳(関西学院大)をはじめとする諸氏(敬称略)に感謝する。

参考文献

- 1) 小林 聡, 萩谷 昌己, 横森 貴編著: 自然計算へのいざない(近代科学社, 東京, 2015)。
- 2) M. Aono, S.-J. Kim, L. Zhu, M. Naruse, M. Ohtsu, H. Hori, and M. Hara: *Proc. 2012 Int. Sym. Nonlinear Theory and its Applications* (2012) 586.
- 3) M. Aono, S.-J. Kim, S. Kasai, H. Miwa, and M. Naruse: *Proc. 2014 Int. Sym. Nonlinear Theory and its Applications* (2014) 499.
- 4) M. Aono, S.-J. Kim, S. Kasai, H. Miwa, and M. Naruse: *Appl. Phys. Lett.* **103** (2013) 163703.
- 5) 若宮 遼, 葛西 誠也, 青野 真士, 成瀬 誠, 已波 弘佳: 信学技報(IEICE Technical Report) **ED2014-152** (2015) 81.
- 6) M. Aono, S. Kasai, S.-J. Kim, M. Wakabayashi, H. Miwa, and M. Naruse: *Nanotechnology* **26** (2015) 234001.
- 7) M. Naruse, M. Aono, S.-J. Kim, T. Kawazoe, W. Nomura, H. Hori, M. Hara, and M. Ohtsu: *Phys. Rev. B* **86** (2012) 125407.
- 8) M. Aono, M. Naruse, S.-J. Kim, M. Wakabayashi, H. Hori, M. Ohtsu, and M. Hara: *Langmuir* **29** (2013) 7557.
- 9) M. R. Garey and D. S. Johnson: *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness* (W. H. Freeman and co., New York, 1945)。
- 10) A. Biere, M. Heule, H. Van Maaren, and T. Walsh, (Eds.): *Handbook of Satisfiability* (IOS Press, Amsterdam 2009)。
- 11) M. Ohtsu, T. Kawazoe, T. Yatsui, and M. Naruse: *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **14** (2008) 1404.
- 12) T. Kawazoe, M. Ohtsu, S. Aso, Y. Sawado, Y. Hosoda, K. Yoshizawa, K. Akahane, N. Yamamoto, and M. Naruse: *Appl. Phys. B* **103** (2011) 537.
- 13) M. Naruse, H. Hori, K. Kobayashi, P. Holmström, L. Thylén, and M. Ohtsu: *Opt. Express* **18** (2010) A533.
- 14) 已波 弘佳, 青野 真士, 成瀬 誠, 葛西 誠也: 信学技報(IEICE Technical Report) **COMP2013-71** (2014) 77.
- 15) Schoning, U: *Proc. 40th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science* (1999) p. 410.
- 16) W. Nomura, M. Naruse, M. Aono, S.-J. Kim, T. Kawazoe, T. Yatsui, and M. Ohtsu: *Advances in Optical Technologies 2014* (2014) 569684.