

イジングマシンの ハードウェア制限緩和アルゴリズムの提案

2023年度

菊池 脩太

学位論文 博士（工学）

イジングマシンの
ハードウェア制限緩和アルゴリズムの提案

2023年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

菊池 脩太

論文要旨

組合せ最適化問題は、与えられた制約条件を満たし、目的関数を最小または最大化する決定変数の組を求める問題である。量子アニーリングマシンや非量子イジングマシンといったイジングマシンは、組合せ最適化問題を高速・高精度に解くことが期待されている。しかし、イジングマシン実機にはハードウェア上の制限があり、性能を十分に発揮することができないという課題がある。そこで本研究では、ハードウェア上の制限を克服あるいは緩和するアルゴリズムの提案とその性質の理論的な検討を行なった。

本論文は全5章から構成される。第1章では、本論文の研究の背景と目的について述べる。第2章では、イジングマシンで組合せ最適化問題の解を得るための操作手順に沿って、組合せ最適化問題をイジングモデルで表現する方法、ハードウェア上の制限、内部アルゴリズムであるシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) と量子アニーリング (Quantum Annealing: QA) について予備知識を述べる。第3章では、ハードウェア上の制限の一つであるビット幅制限を緩和する手法について述べる。まず、SA 実行時にビット幅削減前後のイジングモデルの動的過程が異なることを示す。この動的過程が変化した原因を統計力学的な解析によって特定した後、解析結果を基にビット幅削減後イジングモデルの動的過程が元のイジングモデルのものと一致する SA のパラメータを提案する。第4章では、量子アニーリングマシンに入力可能な問題サイズ制限を緩和する手法について述べる。入力可能な問題サイズが大きい非量子イジングマシンと、高速に良解を得ることが期待される量子アニーリングマシンを組み合わせ、2つのイジングマシンの長所を活かしたハイブリッド最適化手法について説明する。ハイブリッド最適化手法の性能を評価するために、非量子イジングマシンとして SA を、量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を使用したシミュレーションを用いて評価する。シミュレーションでは、量子アニーリングマシンに入力可能または入力不可能な問題サイズのイジングモデルに対する解精度を評価する。同時に、ハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性についても検証する。さらに、SA と量子アニーリングマシンによるシミュレーションによって明らかとなった性質やハイブリッド最適化手法の潜在的な能力について評価するために、マスター方程式やシュレディンガー方程式を用いた SA と QA によるシミュレーションを実施する。第5章では、本論文の結論と今後の展望について述べる。

Thesis Abstract

Algorithms for mitigating hardware restrictions in Ising machines

Combinatorial optimization problems is a category of problems which find the optimal combination of decision variables to minimize or maximize the objective function for given constraints. Ising machines, including quantum annealing machines and non-quantum type Ising machines, have attracted attention as accurate and efficient solvers for combinatorial optimization problems. However, the performance of Ising machines is limited because of hardware restrictions. This study proposes algorithms to overcome or mitigate these hardware restrictions and provide theoretical analysis of the algorithms.

This thesis consists of five chapters. Chapter 1 introduces the research background and objectives. Chapter 2 presents basic knowledge, including methods to formulate combinatorial optimization problems in the Ising model, hardware restrictions, and internal algorithms such as Simulated Annealing (SA) and Quantum Annealing (QA), following the flow of solving combinatorial optimization problems with Ising machines. Chapter 3 describes a method to mitigate bit-width restriction. The study found a difference in the dynamical processes of the Ising model with SA before and after bit-width reduction. Thus, the SA parameters that align the dynamical processes of the reduced bit-width Ising model with the original Ising model, based on statistical mechanics analysis and these results. Chapter 4 describes a method to mitigate the problem size restrictions for quantum annealing machines. This study explains a hybrid optimization method that combines the larger problem size capability of non-quantum type Ising machines with the high-speed solution finding capability of quantum annealing machines. The performance of this hybrid method is evaluated using simulations with SA as the non-quantum type Ising machine and D-Wave Advantage as the quantum annealing machine. These simulations evaluate solution accuracy for problem sizes both feasible and infeasible for the quantum annealing machine, along with the parameter dependence of the hybrid method. In addition, simulations are performed with SA and QA using the master equation and the Schrödinger equation to evaluate the properties revealed by these simulations and the potential capabilities of the hybrid method. Chapter 5 describes the conclusions of this study and prospects.

業績リスト

定期刊行誌掲載論文

- [Shuta Kikuchi](#), Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Dynamical Process of a Bit-Width Reduced Ising Model With Simulated Annealing,” *IEEE Access*, vol. 11, pp. 95493-95506 (2023), 公開日：2023 年 8 月 31 日.
- [Shuta Kikuchi](#), Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Hybrid Optimization Method Using Simulated-Annealing-Based Ising Machine and Quantum Annealer,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 92, No. 12, pp. 124002-1-6 (2023), 公開日：2023 年 11 月 10 日.
- 田中宗, 服部智大, [菊池脩太](#), 「イジングマシンによる大規模組合せ最適化問題の解法を目指した変数固定アルゴリズム」, アンサンブル: 分子シミュレーション研究会会誌, 25 (3), pp. 211-217 (2023) , 公開日：2023 年 7 月 31 日.

国際会議発表

- [Shuta Kikuchi](#), Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Dynamical process on the bit-width-reduced Ising model and tuned method in simulated annealing,” *Adiabatic Quantum Computing Conference 2021*, 2021 年 6 月 22 日 (ポスター発表).
- [Shuta Kikuchi](#), Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Performance of quantum annealing with pre-processing by a non-quantum type Ising machine,” *Adiabatic Quantum Computing Conference 2022*, 2022 年 6 月 22 日 (ポスター発表).
- Kotaro Takahashi, [Shuta Kikuchi](#), and Shu Tanaka, “Properties of integer-binary encoding for simulated-annealing based Ising machines,” *Adiabatic Quantum Computing Conference 2022*, 2022 年 6 月 22 日 (ポスター発表).
- [Shuta Kikuchi](#), Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Analysis of hybrid method with quantum annealing machines and simulated-annealing-based Ising machines,” *28th International Conference on Statistical Physics*, 2023 年 8 月 7 日 (ポスター発表).
- Akane Amino, Tomohiro Hattori, [Shuta Kikuchi](#), and Shu Tanaka, “Proposal of a hybrid algorithm using Ising machines for constrained combinatorial optimization problems,” *28th International Conference on Statistical Physics*, 2023 年 8 月 7 日 (ポスター発表).

国内学会・研究会発表

- 菊池脩太, 戸川望, 田中宗, 「イジングマシン向けビット幅削減アルゴリズムの動的プロセス解析」, 第 24 回情報論的学習理論ワークショップ, 2021 年 11 月 12 日 (口頭発表).
- 菊池脩太, 戸川望, 田中宗, 「ビット幅削減イジングモデルのシミュレーテッドアニーリングにおける動的プロセスの解析」, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022 年 3 月 17 日 (ポスター発表).
- 高橋虎太郎, 菊池脩太, 田中宗, 「イジングマシンにおける整数・バイナリ変換の物理的性質」, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022 年 3 月 17 日ポスター発表.
- 菊池脩太, 戸川望, 田中宗, 「量子アニーリングマシンと非量子イジングマシンを利用したハイブリッド最適化手法に向けた解析」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12 日 (口頭発表).
- 高橋虎太郎, 菊池脩太, 田中宗, 「イジングマシンにおける整数・バイナリ変換の有限温度特性」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12 日 (口頭発表).
- 網野あかね, 服部智大, 菊池脩太, 田中宗, 「異種イジングマシンによるハイブリッドアルゴリズムの提案」, 第 47 回量子情報技術研究会, 2022 年 12 月 8 日 (ポスター発表).
- 高橋虎太郎, 菊池脩太, 田中宗, 「イジングマシンにおける整数・バイナリ変換の動的特性」, 日本物理学会第 78 回年次大会, 2023 年 9 月 16 日 (口頭発表).
- 網野あかね, 服部智大, 菊池脩太, 田中宗, 「制約付き組合せ最適化問題に対するイジングマシン実機とシミュレーテッドアニーリングのハイブリッド手法の提案」, 第 11 回量子ソフトウェア研究発表会, 2024 年 3 月 28 日 (口頭発表) (予定).

その他

- Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka, “Performance evaluation of hybrid method using different types of Ising machines,” *Qubits 2023*, 2023 年 1 月 19 日 (口頭発表)

目次

第 1 章	導入	1
1.1	研究の背景と目的	1
1.2	本論文の構成	5
第 2 章	基本的な事項の説明と記法の紹介	7
2.1	イジングモデルとその性質	7
2.2	イジングモデルによる組合せ最適化問題の表現	10
2.3	イジングマシンのハードウェア制限	14
2.4	シミュレーテッドアニーリングと量子アニーリング	21
2.5	実装されているイジングマシンのスペック	26
第 3 章	ビット幅削減後イジングモデルの動的過程	31
3.1	ビット幅削減手法の先行研究と課題	31
3.2	SA による BWR イジングモデルの求解	32
3.3	BWR イジングモデルの動的過程	35
3.4	BWR イジングモデルの統計力学的解析	37
3.5	提案 SA パラメータ	45
3.6	ランダムイジングモデルに対する効果の検証	47
3.7	考察	52
3.8	本章のまとめ	52
第 4 章	イジングマシンの特徴を活かしたハイブリッド最適化手法	53
4.1	大規模問題緩和手法の先行研究	53
4.2	ハイブリッド最適化手法	56
4.3	シミュレーションの設定	57
4.4	D-Wave Advantage に入力可能な問題サイズに対する評価	58
4.5	D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズに対する評価	62
4.6	ハイブリッド最適化手法の解析	65
4.7	本章のまとめ	73
第 5 章	結論と今後の展望	77
5.1	結論	77
5.2	今後の展望	78

付録 A	異なる温度スケジュールにおける提案 SA パラメータの性能	81
付録 B	D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズのイジングモデルに対するハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性	85
謝辞		89
参考文献		91

第 1 章

導入

1.1 研究の背景と目的

組合せ最適化問題は、解候補のうち制約条件を満たし、かつ目的関数を最大あるいは最小にする解を求める問題である。解候補は組合せ構造を有する決定変数の組によって定義されている。組合せ最適化問題の多くは、計算複雑性理論における NP(non-deterministic polynomial time) 完全または NP 困難に属している [1–4]。これらの問題は、多項式時間で厳密解を得る方法が知られていない。組合せ最適化問題の決定変数の数を N 個、 N に依存しない独立な定数を k とした場合に、計算時間が $O(k^N)$ 、すなわち指数関数的に増加するという課題がある。組合せ最適化問題は、様々な基礎学術分野だけではなく、多様な産業分野において見出される普遍的な問題である。実用的には、組合せ最適化問題の多くの場合は、最適解ではなくとも良解であれば十分であるという場合もあり、必ずしも最適解ではないが、良解を高速に探索可能な計算技術が開発されるならば、多大な影響を与えることが期待される。

このようなニーズのもと、組合せ最適化問題に特化したイジングマシンと呼ばれる計算機が開発されてきた [5]。例えば、2011 年に D-Wave Systems 社によって世界初の商用量子アニーリングマシン D-Wave が発表された [6]。量子アニーリングマシンは、量子アニーリング (Quantum Annealing: QA) [7] や断熱量子計算 [8, 9] という、量子力学的効果を活用したメタヒューリスティクスに基づくハードウェアである。また、シミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) あるいは焼きなまし法 [10–13] と呼ばれるメタヒューリスティクスを基本とする内部アルゴリズムを実装した非量子イジングマシンが様々な企業等から発表されている [14–21]。

イジングマシンで組合せ最適化問題の解を得るためには共通して次の三段階の操作が必要となる (図 1.1)。

まず第一段階では、組合せ最適化問題の目的関数や制約条件をイジングモデルのエネルギー関数やそれと等価な Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) によって表現する。イジングモデルは、ミクロな要素が多数集まったときに創発されるマクロな性質を取り扱う統計力学における基本的なモデルであり [22]、磁性体等の相転移の性質をはじめとした協力現象を理解するために用いられるモデルの一つである。イジングモデルは無向グラフ $G = (V, E)$ 上で定義される。ここで、 V, E はそれぞれ、無向グラフ G における頂点集合、無向辺集合である。エネルギー関数であるハミルトニアンは、 $+1$ または -1 を取る変数であるスピン σ_i と、各スピンに働く局所磁場および 2 スピン間に働く相互作用によって構築される。このイジングモデルにおける基底状態、すなわち最もエネルギーの低い状態の探索は、特定の場合を除いて NP 困難であることが知られている [23]。また、QUBO は Unconstrained Binary Quadratic Programming (UBQP) とも呼ばれ [24, 25]、バイナリ変数 $x_i \in \{0, 1\}$ によってハミルトニアンが構築され、イジングモデルと等価である

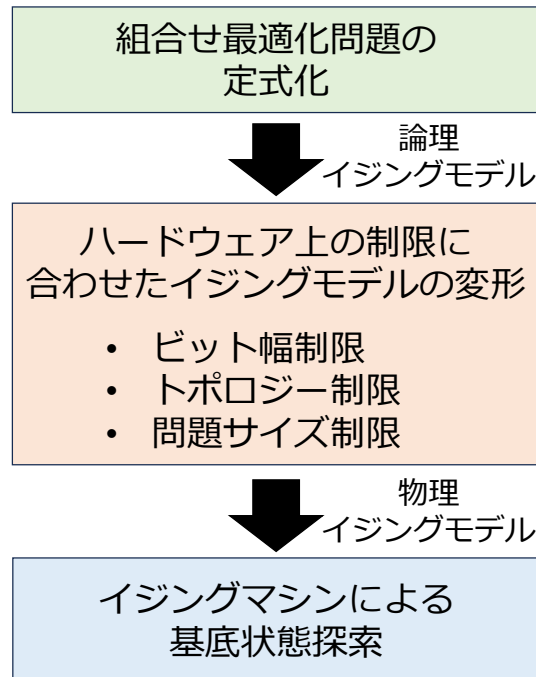


図 1.1: イジングマシンによる組合せ最適化問題の求解フロー

ことが示されている。このイジングモデルと QUBO は、様々な組合せ最適化問題や制約充足問題を表現可能であることが知られている [26, 27]。ここで制約充足問題とは、解候補のうち制約条件を満たす解を求める問題である。このように表現されたイジングモデルや QUBO を論理イジングモデルおよび論理 QUBO と呼ぶ。ここで、組合せ最適化問題の厳密解と論理イジングモデルや論理 QUBO の基底状態が対応する。

次に第二段階では、論理イジングモデルや論理 QUBO をイジングマシンのハードウェア上の制限を満たすように変換し、イジングマシンに入力する。本来は論理イジングモデルや論理 QUBO をイジングマシンに直接入力することが望ましいが、現在実装されているイジングマシンにはいくつかのハードウェア上の制限があるため、論理イジングモデルや論理 QUBO を変換する必要がある。このようにして、変換されたイジングモデルや QUBO を物理イジングモデルや物理 QUBO と呼ぶ。論理イジングモデルや論理 QUBO を入力する際に障壁となる制限は、ビット幅制限とトポロジー制限、問題サイズ制限である。ビット幅とは、イジングマシンに入力可能な係数の範囲である。イジングモデルにおいては、その係数は局所磁場と相互作用となる。ビット幅は実装されているハードウェアの形式によって異なる。デジタル回路である Application-Specific Integrated Circuits (ASIC) や Field-Programmable Gate Array (FPGA)、Graphic Processing Unit (GPU) によって実装されるイジングマシンのビット幅は、符号ビットの整数範囲で表現される。例えば、2 ビットでは $-1, 0, +1$ の範囲、4 ビットでは $[-7, 7]$ の範囲となる。超伝導回路によって実装されている量子アニーリングマシンである D-Wave 2000Q や D-Wave Advantage の係数の取りうる範囲は、理想的には相互作用が $[-1, 1]$ もしくは $[-2, 1]$ 、局所磁場が $[-2, 2]$ の範囲の実数となっている [28]。係数は 0.001 の精度で入力可能となっている [29]。しかし、イジングマシンで設定された係数の範囲を超えた係数は入力することは不可能であるため、物理イジングモデルや物理 QUBO に変換する必要がある。トポロジーとは、イジングマシンに入力可能なスピン間の相互作用のネットワーク構造を指す。論理イジングモデ

ルや論理 QUBO は、変数同士がすべて結合している完全グラフを想定しているが、現在までに実装されているイジングマシンの中には疎結合である二層二次元正方格子 [14] やキングスグラフ [15, 30–32], キメラグラフ [6, 33, 34], ペガサスグラフ [35] がトポロジーとなっているため、物理イジングモデルや物理 QUBO に変換する必要が生じる。最後に問題サイズ制限は、イジングマシンに一度に入力可能な変数の個数を指す。例として、D-Wave マシンについて考える。現在実装されている D-Wave Advantage 4.1 は 5,627 変数を入力可能である [36]。しかしながら、論理イジングモデルに入力可能な問題サイズ以上の変数がある場合、問題を入力することが不可能であるため、物理イジングモデルや物理 QUBO に変換が必要となる。

イジングマシンで組合せ最適化問題の解を得るための操作の第三段階は、イジングマシンで物理イジングモデルないしは物理 QUBO の低エネルギー状態を探索することである。探索方法は、前述の QA や SA をもとにしたアルゴリズムが主に使用されている [6, 14–18, 20, 31, 33, 34, 37–40]。また、量子インスパイアードな古典アルゴリズムであるシミュレーテッド量子アニーリング (Simulated Quantum Annealing: SQA) [41–43] やシミュレーテッド分岐 (Simulated Bifurcation: SB) アルゴリズム [44] を用いているイジングマシン [30, 44–47], 光パルスを用いた動的システムを使用しているイジングマシン [48–50] が開発されている。

イジングマシンを用いた研究は、様々な分野で産学を問わず盛んに行われている。例えば、機械学習 [51–54] や材料科学 [55–61], ポートフォリオ最適化 [62, 63], タンパク質量み込み [64], 交通最適化 [65–69], 量子コンパイラ [70], ブラックボックス最適化 [55, 71, 72] といった分野である。しかしながら、これらの研究は実装されているイジングマシンで解くことが可能な問題のみに限定されている。より幅広い種類や実際に解くことが期待されている組合せ最適化問題を実装されているイジングマシンで解くためには、操作の第二段階で示したハードウェア上の制限がボトルネックとなっている。

ハードウェアの技術発展は、ハードウェア制限を徐々に克服している。ビット幅制限については、非量子イジングマシンである CMOS アニーリングマシンにおいて、初期プロトタイプでは 2 ビット幅 [14] であったが、現在では 10 ビット幅を入力可能なマシンが開発されている [18]。トポロジーについては、D-Wave マシンの初期モデルからキメラグラフが実装されていた [6, 33, 34] が、D-Wave Advantage からより次数密度が高いペガサスグラフ [35] が実装されている。また、非量子イジングマシンにおいてはトポロジー制限のない完全グラフを実装したマシンが開発されている [16–18, 20, 44–47, 47, 73]。問題サイズ制限については、入力可能な問題サイズが徐々に拡大している。D-Wave マシンでは、初期モデルである D-Wave One では量子処理ユニット (Quantum Processing Unit: QPU) に 128 qubits が実装されていた [6] が、後発モデルである D-Wave Advantage 4.1 は 5,627 qubits が実装されている [36]。また、非量子イジングマシンでは、100,000 個以上の変数を入力可能なマシンが開発されている [18, 44, 46, 73]。ここで、ビット幅制限とトポロジー制限、問題サイズ制限という三つのハードウェア制限を図 1.2(a) のように、三つの軸として表す。このとき、ハードウェア制限における様々なイジングマシンの特徴を図 1.2(b) のように表現できると考える。この三つのハードウェア制限の範囲内に構築される立方体の体積が、そのイジングマシンが取り扱うことのできる問題の範囲と考えることができる。例えば、比較して多くの変数を入力可能とし、完全グラフをトポロジーとして実装しているイジングマシン 1 は問題サイズ制限とトポロジー制限の克服を優先しているが、ビット幅制限の影響は残っている。一方、イジングマシン 2 はビット幅制限がイジングマシン 1 よりも弱い、問題サイズ制限とトポロジー制限の影響は残っている。ここまで示したように、実装ハードウェアの違い等により特徴があるものの、ハードウェアの技術開発によりハードウェア制限は徐々に克服されてきている。しかしながら、実装されたイジングマシンの制限を超える問題を実際に取り扱うことができないという課題がある。

そこで、実装されたイジングマシンが取り扱うことのできる問題範囲を拡大するために、ソフトウェアの観

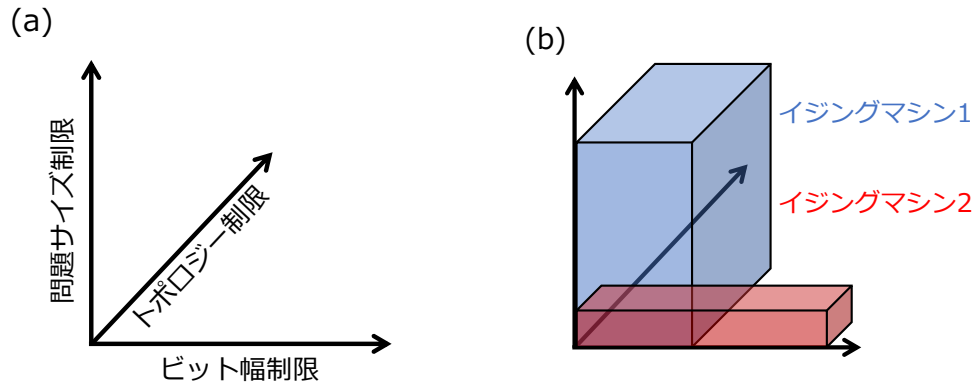


図 1.2: ハードウェア制限の表現. (a) ハードウェア制限の軸の説明, (b) 異なる特徴を持つイジングマシン 1 (青) とイジングマシン 2 (赤) のハードウェア制限の表現.

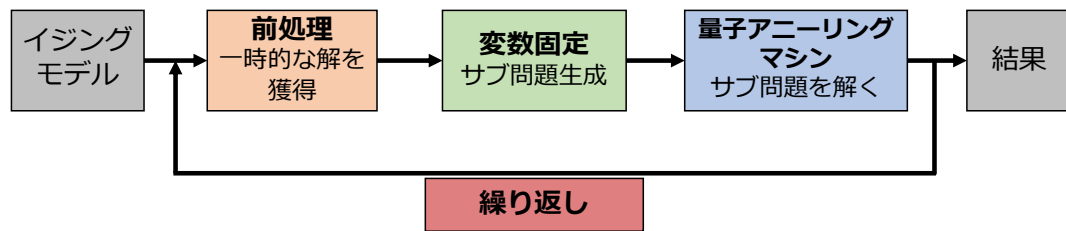


図 1.3: 変数固定手法による問題サイズ制限克服アルゴリズムの概要

点からハードウェア上の制限を克服あるいは緩和する手法が研究されている。ビット幅制限に対しては、イジングマシンのビット幅の範囲に収まるようビット幅を削減する手法が開発された。それらは、イジングマシンの入力可能な係数の最大値を基準にすべての係数を正規化する方法 [28] やイジングマシンのビット幅に収まるまですべての係数を 2 の乗で除算する手法 [74–76] である。また、これらの方法の課題であったビット幅削減によって論理イジングモデルの基底状態が変化してしまう現象を解消する、補助スピンを追加するビット幅削減手法 [74] が開発された。トポロジー制限に対しては、これまでに多くの埋め込み手法が提案されている [34, 35, 77–94]。例えば、任意の問題のグラフを任意のイジングマシンのトポロジーに埋め込む手法 [79] や、二層二次元正方格子 [88]、キングスグラフ [83]、キメラグラフ [78, 80, 82, 85, 86]、ペガサスグラフ [35, 94] それぞれの特徴に対応した手法がある。問題サイズ制限に対しては、特に問題サイズ制限が強い量子アニーリングマシンに対して、入力不可能な問題サイズを量子アニーリングマシンに入力可能なサイズまで削減する手法が開発されている。例えば、図 1.2 のように元の問題の一時的な解を得たのち、基準を満たす変数の値を固定することで、変数の数が小さいサブ問題を作る変数固定法を用いた解法が提案されている [90, 93, 95–109]。より解精度の高い手法となるよう、一時的な解を得るための方法や、基準の設定方法、繰り返しの有無の検討が行われている。このように、ソフトウェアの観点からハードウェア制限を克服または緩和する手法が開発され、実装されているイジングマシンの性能を引き出す試みがなされている。

しかしながら、提案されたハードウェア制限緩和手法を活用するためには検討が不十分である。ビット幅制

限に関しては、先行研究 [74] でビット幅削減前後のイジングモデルの基底状態が一致するという性質について議論されていたが、二つのイジングモデルを同じアルゴリズムで解く検討は行っていなかった。非量子イジングマシンの基本アルゴリズムである SA では、イジングモデルのスピンの数や係数によってパラメータを設定する。ビット幅削減前後のイジングモデルについて、この方法で設定したパラメータを用いて SA をした際に、近い値の解を得ることができれば、実使用の際にパラメータ設定を考慮する必要はなくなる。そのため、ビット幅削減前後のイジングモデルについて、同じパラメータを用いた SA 実施時の解について評価することは重要である。問題サイズ制限に関しては、先行研究でそれぞれ提案された変数固定手法について、その性能を評価しているが、前処理や変数固定、繰り返しといったステップの重要性に関する議論は少ない。それぞれのステップの重要性を調査することは、今後変数固定を含む問題サイズ制限克服アルゴリズムを構築する上で重要である。また、前処理段階において非量子イジングマシンを活用した明確な事例は報告されていない。非量子イジングマシンは、量子アニーリングマシンよりも問題サイズ制限は弱く、多くの変数を入力できる高集積性を強みとしており、現在までのハードウェアの技術発展の経緯からこの傾向は継続すると考えられる。そのため、非量子イジングマシンの高集積性を活用した変数固定手法が今後望まれる可能性がある。

そこで本論文では、先行研究において検討が不十分であった点に着目し、イジングマシンのハードウェア上の制限を克服あるいは緩和するアルゴリズムの提案とその性質の評価を行い、現在の手法の課題を解決することが目的である。本研究によって、特にビット幅制限に課題のある非量子イジングマシンや問題サイズ制限に課題のある量子アニーリングマシンが取り扱う問題の範囲が広がることが期待できる。取り扱う問題の範囲が広がり、性能が引き出されたイジングマシンを用いた研究が可能となり、様々な事例の創出を助け、今後のイジングマシンの活用に貢献できると考えている。

1.2 本論文の構成

本論文は全 5 章から構成されている。

第 1 章では、本論文の研究の背景と目的について記した。

第 2 章では、イジングマシンで組合せ最適化問題の解を得るための操作手順に沿って、組合せ最適化問題をイジングモデルで表現する方法、ハードウェア上の制限、内部アルゴリズムである SA と QA について概説する。また、現在実装されているイジングマシンにおける入力可能なビット幅や問題サイズといったスペックを示す。

第 3 章では、ビット幅制限を緩和する手法について述べる。まず、ビット幅削減手法の先行研究について説明する。その後、SA 実行時にビット幅削減前後のイジングモデルの動的過程が異なり、得られる解が異なることをシミュレーションを用いて示す。動的過程が変化した原因を統計力学的な解析によって推定した後、解析結果をもとにビット幅削減後イジングモデルの動的過程が元のイジングモデルのものと一致するような SA パラメータを提案する。そして、その提案 SA パラメータによる影響をシミュレーションにより評価する。

第 4 章では、量子アニーリングマシンに入力可能な問題サイズ制限を緩和する手法について述べる。まず、問題サイズを削減する手法について先行研究を紹介する。続いて、非量子イジングマシンと量子アニーリングマシンを組み合わせ、二つのイジングマシンの長所を活かしたハイブリッド最適化手法について説明する。ハイブリッド最適化手法の性能を評価するために、非量子イジングマシンとして SA を、量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を使用してシミュレーションを実施する。シミュレーションでは、D-Wave Advantage に入力可能なサイズと入力不可能なサイズの問題に対する解精度を検証する。また、変数固定手法のステップごとの影響を解析するために、ハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性を検証する。さら

に, SA と D-Wave Advantage によるシミュレーションによって明らかとなった性質やハイブリッド最適化手法の潜在的な能力について評価するために, マスター方程式やシュレディンガー方程式を用いた SA と QA によってシミュレーションを実施する.

第 5 章では, 本論文のまとめと展望について述べる.

第 2 章

基本的な事項の説明と記法の紹介

第 1 章で述べたように、イジングマシンで組合せ最適化問題の解を得るために三つの操作手順が必要となる (図 1.1).

手順 1: 組合せ最適化問題の目的関数や制約条件をイジングモデルのエネルギー関数やそれと等価な Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) によって表現する. このように表現されたイジングモデルや QUBO を論理イジングモデルおよび論理 QUBO と呼ぶ.

手順 2: 論理イジングモデルや論理 QUBO をイジングマシンのハードウェア上の制限を満たすように変換し、イジングマシンに入力する. このようにして、変換されたイジングモデルや QUBO を物理イジングモデルや物理 QUBO と呼ぶ.

手順 3: イジングマシンで物理イジングモデルないしは物理 QUBO の低エネルギー状態を探索する.

本章では、上記の各ステップについて、基本的な事項の説明とそれに伴う記法の紹介をする. まず、手順 1 について述べる. 2.1 節では、イジングモデルと QUBO の記法を紹介する. そして、イジングモデルの統計力学的な性質について述べ、基底状態探索の困難性について述べる. また、2.2 節で、組合せ最適化問題をイジングモデルと QUBO で表現する方法について述べる. 次に、手順 2 について述べる. 2.3 節で、論理イジングモデルを物理イジングモデルに変換する必要を生じさせるイジングマシンのハードウェア上の制限について記載する. また、ハードウェア上の制限を緩和する方法と課題について先行研究の内容を説明する. 手順 3 については、2.4 節でイジングマシンが実装している内部アルゴリズムの基礎となる SA と QA のアルゴリズムと記法について紹介する. 最後に、2.5 節で現在実装されているイジングマシンのハードウェアのスペックについて述べる.

2.1 イジングモデルとその性質

本節ではまずイジングモデルの記法を導入する. イジングモデルは、ミクロな要素が多数集まったときに創発されるマクロな性質を取り扱う統計力学における基本的なモデルである [22]. イジングモデルは無向グラフ $G = (V, E)$ 上で定義される. ここで V と E はそれぞれ無向グラフ G における頂点集合、無向辺集合である. イジングモデルはスピンと局所磁場、相互作用によって構成されている. イジングモデルのハミルトニアン

(またはエネルギー関数) $\mathcal{H}$ は、次のように与えられる。

$$\mathcal{H} = - \sum_{i \in V}^N h_i \sigma_i - \sum_{(i,j) \in E} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.1)$$

ここで、 σ_i は頂点 $i \in V$ 上のスピンであり、値は $+1$ または -1 をとる。ここで N はスピン数であり、これは頂点数 $|V|$ と等しい。また、 h_i は頂点 $i \in V$ の局所磁場、 $J_{i,j}$ は辺 $(i,j) \in E$ 上の相互作用を表す。

次に、QUBO の記法を述べる。QUBO は、バイナリ変数 $x_i \in \{0, 1\}$ を用いて次の式で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} Q_{i,j} x_i x_j. \quad (2.2)$$

ここで N は、バイナリ変数の個数である。また、 $x_i \in \{0, 1\}$ であることから、 $x_i^2 = x_i$ となるため、式 (2.2) は次のように書くこともできる。

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N a_i x_i + \sum_{1 \leq i < j \leq N} b_{ij} x_i x_j. \quad (2.3)$$

なお、 $Q_{i,j}$ と a_i と b_{ij} の関係は次の通りである。

$$Q_{i,j} = \begin{cases} a_i & (i = j) \\ b_{ij} & (i < j) \end{cases}. \quad (2.4)$$

イジングモデルのスピン σ_i と QUBO のバイナリ変数 x_i の間には、

$$\sigma_i = 1 - 2x_i, \quad (2.5)$$

という対応関係にあり、変換は互いに可能である。したがって、式 (2.1) で表現されるイジングモデルと、式 (2.3) で表現される QUBO は互いに等価であることがわかる。

続いて、式 (2.1) のイジングモデルの基底状態探索の困難性についてみていく。説明のために、まず正方格子上にスピンと相互作用を配置したイジングモデルを用いる (図 2.1)。スピンの上下左右に隣接されたスピン同士に相互作用があるイジングモデルであり、ここでは局所磁場はないものとする。式 (2.1) において、相互作用の係数 $J_{i,j}$ が正のとき ($J_{i,j} > 0$) を強磁性相互作用、負のとき ($J_{i,j} < 0$) を反強磁性相互作用という。まず、すべての相互作用が強磁性かつ均一である場合 ($J_{i,j} = +J$) を考えると、すべてのスピンが同符号の状態が基底状態となる。図 2.1(a) では、すべてのスピンの $+1$ の場合を図示しているが、すべてのスピンの反転して -1 となってもエネルギーは変化しない。つまり、基底状態が二重に縮退している。なお、もし局所磁場が正の場合 ($h_i > 0$) は、すべてのスピンの $+1$ のときに基底状態となるため縮退はしない。次に、すべての相互作用が反強磁性かつ均一である場合 ($J_{i,j} = -J$) を考えると、図 2.1(b) のように隣り合うスピンの符号が異なる状態のときに基底状態となる。こちらもすべてのスピンを反転させてもエネルギーが変わらないため、二重に縮退している。続いて、すべての相互作用がランダムに分布する場合 ($J_{i,j} = \pm J$) を考える。図 2.1(c) に、相互作用がランダムに分布するイジングモデルとその基底状態の一例を示す。バツ印で示される相互作用においてはエネルギー損失が生じてしまい、すべての相互作用エネルギーが最小になるようなスピン状態は存在しない。このようなとき、フラストレーションが存在するという。フラストレーションが存在するイジングモデルでは、基底状態かそれに近い状態が非常に多数存在することが知られている。例えば、図 2.1(c) の中央のスピンは反転させてもエネルギーは変更しないため、反転させた状態も基底状態である。このような

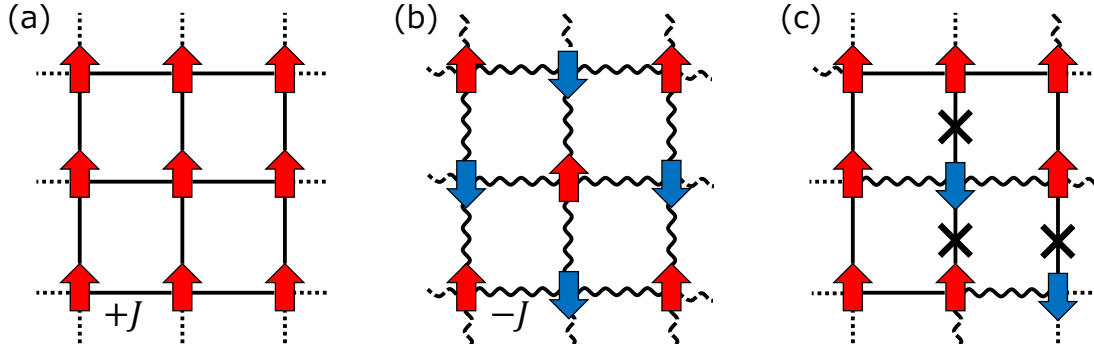


図 2.1: 正方格子イジングモデルの基底状態におけるスピン配置. (a) 均一な強磁性相互作用を有するイジングモデル ($J_{i,j} = +J$). (b) 均一な反強磁性相互作用を有するイジングモデル ($J_{i,j} = -J$). (c) ランダムな相互作用を有するイジングモデル ($J_{i,j} = \pm J$). ランダムに $J_{i,j} = \pm J$ が分布している. バツ印で示した相互作用にエネルギー損失が存在している. 直線と波線で示されるスピン間の相互作用はそれぞれ強磁性相互作用 $J_{i,j} = +J$ と反強磁性相互作用 $J_{i,j} = -J$ である. 矢印はスピンを示し, 赤は $+1$, 青は -1 を示す.

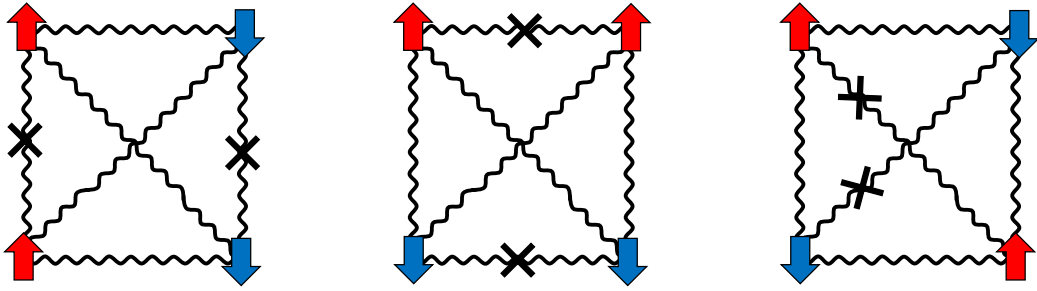


図 2.2: 全結合反強磁性体イジングモデルによるフラストレーションの例. 波線で示されるスピン間の相互作用は反強磁性相互作用 $J_{i,j} = -J$ である. バツ印で示した相互作用にエネルギー損失が存在している. 矢印はスピンを示し, 赤は $+1$, 青は -1 を示す.

状態のスピンは相互作用がランダムに分布するイジングモデルにおいて多数存在する場合がある. このように, 相互作用にランダムネスが存在するランダムイジングモデルでは一般に, フラストレーションが現れる.

次に, すべてのスピン間に反強磁性相互作用があるイジングモデルを用いてフラストレーションについて説明する. ここでは, 局所磁場はないものとする. 図 2.2 の通り, バツ印で示される相互作用においてはエネルギー損失が生じており, フラストレーションが存在することがわかる.

このようにフラストレーションが存在するイジングモデルの基底状態を求めることは非常に難しい問題として知られている.

2.2 イジングモデルによる組合せ最適化問題の表現

組合せ最適化問題は、目的関数を最大あるいは最小にする解を求める問題である。目的関数を最大化させる問題は、負号をつけることで最小化させる問題へ対応させることができる。組合せ最適化問題をイジングモデルで表現するとは、この目的関数の最小解と基底状態が対応し、かつ、制約条件を満たすときにエネルギーが最小となる項を加えたイジングモデルを構築することを指す。これまでに様々な組合せ最適化問題の定式化方法が報告されている [26, 27]。そこで、本節では組合せ最適化問題をイジングモデルで表現する方法について説明する。

組合せ最適化問題は、次の三つに分類することができる。すなわち、制約条件がない場合、等式で表現可能な制約条件（等式制約）がある場合、不等式で表現可能な制約条件（不等式制約）がある場合である。この三つについて例を用いて紹介する。

2.2.1 制約条件がない場合

制約条件がない場合がない場合の組合せ最適化問題の例として数分割問題を扱う。この問題は、NP 完全として知られている [110]。数分割問題は、 N 個の正の数の集合 $S = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ が与えられたとき、この集合を二つの互いに素な部分集合 R と $S - R$ に分けて、 R 内の数の和と $S - R$ 内の数の和の差が最小になるような分割方法を見つけよ、という問題である。ここで部分集合 R と部分集合 $S - R$ が互いに素とは、部分集合 R と部分集合 $S - R$ で共通する要素が無いことを指す。数分割問題の目的関数は次のようになり、目的関数を最小化させる問題となる。

$$\left| \sum_{n_i \in R} n_i - \sum_{n_i \in (S-R)} n_i \right|. \quad (2.6)$$

数分割問題の例として、整数の集合 $S = \{2, 6, 7, 9, 10\}$ を考える。このとき、 $R = \{2, 6, 9\}$ と $S - R = \{7, 10\}$ のように分割すると、 R に含まれる整数の和と $S - R$ に含まれる整数の和の差は最小の 0 となる。次に、整数の集合 $S = \{2, 6, 7, 9\}$ を考えると、 $R = \{2, 9\}$ と $S - R = \{6, 7\}$ と分割すると、二つの部分集合の和の差が最小となる。もし N が小さい、つまり与えられた整数の個数が少ない場合、取りうるすべての整数の組合せを検討することで容易に解くことが可能である。しかし、解の候補数は 2^{N-2} であるため、 N が大きくなるとこの問題を解くことは困難となる。

この数分割問題をイジングモデルで表現する。スピン σ_i を導入し、 n_i を R に属させる場合を $\sigma_i = +1$ 、 $S - R$ に属させる場合を $\sigma_i = -1$ とすることで、次のイジングモデルのハミルトニアンとして定式化できる。

$$\mathcal{H} = \left(\sum_{i=1}^N n_i \sigma_i \right)^2. \quad (2.7)$$

なお、このイジングモデルを展開すると次のようになる。

$$\mathcal{H} = \left(\sum_{i=1}^N n_i \sigma_i \right) \left(\sum_{j=1}^N n_j \sigma_j \right) \quad (2.8)$$

$$= 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} n_i n_j \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N n_i^2 \sigma_i^2. \quad (2.9)$$

右辺第二項の σ_i^2 は 1 であるため、 n_i^2 の総和となり、定数項となる．ここで、式 (2.1) をもとに相互作用 $J_{i,j}$ を導入すると次のようになり、

$$J_{i,j} := n_i n_j, \quad (2.10)$$

式 (2.9) はすべての相互作用が正の値となる反強磁性イジングモデルとなる．また、すべての整数の間に相互作用があるため、図 2.2 のようなフラストレーションのあるイジングモデルとなっており、基底状態の探索は困難である．

2.2.2 等式制約がある場合

等式制約がある条件を分類すると、さらに二つに分けることができる．一つは、そもそもの問題に等式で表現可能な制約条件がある場合である．もう一つは、イジングモデルや QUBO で表現するために、整数値を複数の変数で表現することに起因する制約条件を等式で表現した場合である．それぞれの場合について説明する．

まず、そもそもの問題に等式で表現可能な制約条件がある場合である．ここでは、制約充足問題の例として部分和问题を扱う．部分和问题は、 N 個の数の集合 $S = \{n_1, n_2, \dots, n_N\}$ が与えられたとき、和が M となる部分集合が少なくとも一つ存在するかを問う問題である．目標値 M と等しい部分集合を見つけるという点が等式で表現可能な制約条件となっている．

具体的な部分和问题の例を考える．整数の集合 $S = \{-2, 3, 6, -7, 9\}$ がある時、少なくとも一つの部分集合の和 M が 0 になる部分集合のとり方があるかという問題があった場合、 $R = \{-2, -7, 9\}$ があるため、この問題の答えは「YES」となる．次に、整数の集合 $S = \{2, 6, 7, 9\}$ の少なくとも一つの部分集合の和が 19 になる取り方は存在するかという問題を考えて、答えは「NO」となる．もし N が小さい、つまり与えられた整数の個数が少ない場合、取りうるすべての整数の組合せを検討することで容易に解くことが可能である．しかし、解の候補数は $2^N - 1$ であるため、 N が大きくなるに従い、この問題を解くことは困難となる．

部分和问题をバイナリ変数 x_i を用いて QUBO で表現する．集合 S の一つ一つの要素 n_i を部分集合に含める場合は 1、含めない場合は 0 とすることで、QUBO のハミルトニアンは次のように表現できる．

$$\mathcal{H} = \left(\sum_{i=1}^N n_i x_i - M \right)^2. \quad (2.11)$$

式 (2.11) の $\mathcal{H}$ の最小値を探索したとき、 $\mathcal{H} = 0$ となる少なくとも一つの部分集合が存在する場合は、その部分和问题の答えは「YES」となる．一方、すべての部分集合の候補に対する目的関数が正の値 ($\mathcal{H} > 0$) をとるとき、答えは「NO」となる．ここで、QUBO 形式で定式化されたこのハミルトニアンをイジングモデルに変換する．式 (2.5) を用いると、式 (2.11) は、次のように表現できる．

$$\mathcal{H} = \left[\sum_{i=1}^N n_i \frac{1}{2} (1 - \sigma_i) - M \right]^2. \quad (2.12)$$

これを展開すると、次のようになる。

$$\mathcal{H} = \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N n_i \sigma_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N n_i - M \right)^2 \quad (2.13)$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N n_i n_j \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N n_j - M \right) n_i \sigma_i + \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N n_i - M \right)^2. \quad (2.14)$$

ここで、式 (2.1) をもとに相互局所磁場 h_i を次のように導入する。

$$h_i := \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N n_j - M \right) n_i. \quad (2.15)$$

式 (2.10) と式 (2.15) を使って、式 (2.14) を表現すると、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i + \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N n_j - M \right)^2. \quad (2.16)$$

となる。ここで、右辺第三項は定数である。そのため、式 (2.16) は、ランダムな相互作用や不均一な相互作用を持つハミルトニアンである。

次に、イジングモデルや QUBO で表現するために、整数値を複数の変数で表現することに起因する制約条件を等式で表現した場合について述べる。組合せ最適化問題の例として、巡回セールスマン問題を扱う。この問題は、NP 困難な問題として知られている。巡回セールスマン問題は、以下の四つの条件を満たす経路のうち最短距離を探索せよという問題である。

- 1: N 個の都市がある。
- 2: セールスマンは都市 i から距離 $d_{i,j}$ だけ離れた都市 j に移動する。
- 3: セールスマンは任意の都市に一度ずつ訪問する。
- 4: セールスマンはすべての都市を訪問した後、最初の都市に戻る。

具体的な例として、都市数 $N = 5$ の巡回セールスマン問題を考える。図 2.3(a) は都市の場所と都市間の距離を示しており、この中から条件を満たす最短経路を探索する。図 2.3(b) と (c) はそれぞれ経路長が 31 と 30 となる経路を表す。これはそれぞれ最短距離ではない解と最適解となっている。都市数 N が小さければすべての解の候補を列挙することで最適解を得ることが可能である。しかし、解の候補は $(N-1)!/2$ 通りあるため、都市数 N が増加するほど巡回セールスマン問題の最適解を得ることは困難である。

巡回セールスマン問題の QUBO 表現は、

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B, \quad (2.17)$$

となる。ここで、

$$\mathcal{H}_A = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{1 \leq i < j \leq N} d_{i,j} n_{i,\alpha} n_{j,\alpha+1}, \quad (2.18)$$

$$\mathcal{H}_B = \mu \left[\sum_{\alpha=1}^N \left(\sum_{i=1}^N n_{i,\alpha} - 1 \right)^2 + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{\alpha=1}^N n_{i,\alpha} - 1 \right)^2 \right], \quad (2.19)$$

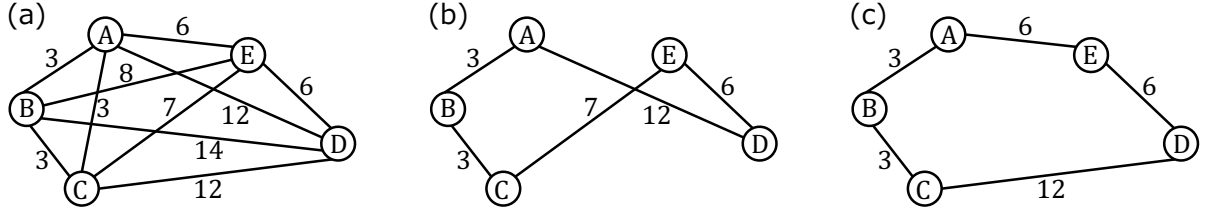


図 2.3: 5 都市の巡回セールスマン問題の例. (a) 都市の場所と都市間の距離. 円は都市, 実線の数字は都市間の距離を示す. (b) 最適解ではない解, (c) 最適解.

となる. μ は正の定数であり, ペナルティ係数と呼ばれる. また, $n_{i,\alpha}$ は 0 または 1 をとるバイナリ変数である. α は都市を巡る順番を, i は都市のインデックスを表しており, セールスマンが α 番目に都市 i を通過する場合, $n_{i,\alpha} = 1$ となり, そうでない場合は 0 となる. 式 (2.18) の $\mathcal{H}_A$ は, 選択された都市間の経路長である. 巡回セールスマン問題は, $\mathcal{H}_A$ を最小にし, かつ上記の四つの条件を満たす都市の順番を求めるという問題である. $\mathcal{H}_B$ (式 (2.19)) の第一項はセールスマンが同時に二つ以上の都市を通過することができないという制約を, 第二項は各都市は一度しか訪れないという制約を加えており, 上記三つ目の条件に該当する. この制約が, 等式で表現可能な制約条件を表している. また, 任意の i に対し, $n_{i,N+1} = n_{i,1}$ とすることで, 四つ目の条件は満たされる.

最小化させる目的の経路長を表す式 (2.18) について, $n_{i,\alpha}$ の代わりに次のイジングスピン ($\sigma_{i,\alpha} = \pm 1$) を導入する.

$$\sigma_{i,\alpha} = 1 - 2n_{i,\alpha}. \quad (2.20)$$

すると, 式 (2.18) は次のように書くことができる.

$$\mathcal{H}_A = \frac{1}{4} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{1 \leq i < j \leq N} d_{i,j} \sigma_{i,\alpha} \sigma_{j,\alpha+1} + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{1 \leq i < j \leq N} d_{i,j} \sigma_{i,\alpha} + \text{const}. \quad (2.21)$$

式 (2.21) の $d_{i,j}$ は変数同士の相互作用とみなすことができる. したがって, すべての都市の間に相互作用がある反強磁性イジングモデルであり, 図 2.2 のように基底状態の探索は困難である.

2.2.3 不等式制約がある場合

不等式制約がある組合せ最適化問題の例としてナップサック問題を扱う. この問題は NP 困難な問題として知られている [110]. ナップサック問題は, α でラベル付けされた N 個のアイテムがあり, それぞれ価値 c_α と重さ w_α が定義されているとき, 重さ W まで収載可能なナップサックに価値の総和が最大となるようにアイテムを選択して入れる, という問題である.

ナップサック問題の具体的な例として, 図 2.4 にあるように重さと価値が定義された 4 つのアイテムから選ぶ状況を考える. ナップサックに収載可能な重さは $W = 50$ とする. このアイテムの中では, アイテム 2 とアイテム 4 をナップサックに入れると, 価値が 900 となり最大となる. アイテム 1 とアイテム 2 をナップサックに入れると, 価値が 1000 となるが重みが 60 になってしまうため入れることができない. もし, アイテム数が少なければすべての解の候補を列挙することで最適解を得ることは可能である. しかし, アイテム数 N に対して 2^N 通りという膨大な解候補が存在する.

アイテム	重さ w_α	価値 c_α
①	20	300
②	40	700
③	30	500
④	10	200

図 2.4: ナップサック問題におけるアイテムの重みと価値の例

ナップサック問題の目的関数をバイナリ変数 x_α を用いて表現する．ナップサックにアイテムを入れる場合は 1, 入れない場合は 0 となるようにし, ナップサックに入れるアイテムの価値の総和を最大にするため,

$$\sum_{\alpha=1}^N c_\alpha x_\alpha, \quad (2.22)$$

と表される．イジングマシンに入力する QUBO として定式化する際は最小化問題とする必要があるため, 式 (2.22) に負号をつける．次に制約条件について考える．ナップサックに入れたアイテムの総重み W は次のように表される．

$$W = \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha. \quad (2.23)$$

この重み W がナップサックに収載可能な重さ W 以下になるという, 不等式で表現可能な制約条件を QUBO を用いて表現する．QUBO で不等式制約を表現するためにバイナリ変数 $y_j \in \{0, 1\} (1 \leq j \leq W)$ を導入する．このバイナリ変数を用いて, $W \leq W$ を満たすときに最小値 0 を取る QUBO は次のように表現される．

$$\mathcal{H}_{\text{constraint}} = \left(1 - \sum_{j=1}^W y_j\right)^2 + \left(\sum_{j=1}^W j y_j - \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha\right)^2. \quad (2.24)$$

式 (2.25) の第一項は, ただ一つの $j (1 \leq j \leq W)$ に対して, $y_j = 1$ となる制約を表現している．そして第二項は, ナップサックに入れたアイテムの総重み W がナップサックに収載可能な重さ W 以下とする制約を表現している．式 (2.25) の $\mathcal{H}_{\text{constraint}} = 0$ となった場合は, $W \leq W$ を満たしたアイテムを選択したことを示している．以上より, ナップサック問題の QUBO 表現は, 正の整数 μ を用いて次のように表される．

$$\mathcal{H} = - \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha + \mu \left[\left(1 - \sum_{j=1}^W y_j\right)^2 + \left(\sum_{j=1}^W j y_j - \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha x_\alpha\right)^2 \right]. \quad (2.25)$$

2.3 イジングマシンのハードウェア制限

前節で述べたように組合せ最適化問題の目的関数や制約条件をイジングモデルとして表現可能である．しかしながら, 表現された論理イジングモデルをそのままイジングマシンで解くことができない場合がある．その理由は, イジングマシンのハードウェア上の制限があり, 論理イジングモデルをそのままイジングマシンに入力することができないからである．したがって, イジングマシンのハードウェア制限を満たすように論理イジングモデルを物理イジングモデルに変換する必要がある．本節では, 物理イジングモデルへの変換が必要とさ

せるハードウェア制約である、(1) ビット幅制限、(2) トポロジー制限、(3) 問題サイズ制限について紹介する。そして、それらの制限を満たした物理イジングモデルへの変換方法に関する先行研究と残された課題について述べる。

2.3.1 ビット幅制限

ビット幅とは、イジングマシンに入力可能なイジングモデルの係数の範囲である。イジングモデルにおいては、式 (2.1) の通り、相互作用 $J_{i,j}$ と局所磁場 h_i が係数となる。2.2 節に示した通り、部分和問題や整数分割問題では集合に含まれる数を、巡回セールスマン問題であれば都市間の距離を係数としているため、基底状態探索のために係数の値はなくてはならない情報である。しかし、ハードウェア上の制限のため、イジングマシンにはビット幅に制限があり、係数を論理イジングモデルのまま入力できないという課題がある。ビット幅は実装されているハードウェアの形式によって異なる。デジタル回路である ASIC や FPGA, GPU によって実装されるイジングマシンのビット幅は、符号ビットの整数範囲で表現される。本論文では、 n ビットのビット幅は $[-(2^{n-1} - 1), 2^{n-1} - 1]$ としている。例えば、2 ビットでは $-1, 0, +1$ の範囲、4 ビットでは $[-7, 7]$ の範囲となる。非量子イジングマシンにおいては論理イジングモデルの係数がビット幅の範囲を超えた場合、マシンに問題を入力することができない。超伝導回路によって実装されている量子アニーリングマシンである D-Wave 2000Q や D-Wave Advantage の係数の取りうる範囲は、理想的には相互作用が $[-1, 1]$ もしくは $[-2, 1]$ 、局所磁場が $[-2, 2]$ の範囲の実数となっている [28]。量子アニーリングマシンにおいても取りうる係数の範囲を超える係数を持つ問題は入力することができない。このように、ビット幅制限によって論理イジングモデルを物理イジングモデルに変換しなければならなくなる。

イジングマシンに入力可能な物理イジングマシンに変換するために、論理イジングモデルの係数のビット幅を削減する操作が必要である。D-Wave マシンを使用するための `dwave-system` パッケージに含まれる `DWaveSampler` クラスでは、`auto_scale` パラメータを使ってビット幅を削減可能である [28]。その方法は、係数を 0.001 の精度で調整可能 [29] であることを利用し、係数の最大値を基準にすべての係数を正規化する方法である。例えば、D-Wave 2000Q に $+1, +2, +40$ の相互作用を入力する場合を考える。係数の最大値 $+40$ を基準に正規化すると、値はそれぞれ 0.025, 0.05, 1 となる。この正規化の作業によって、物理イジングモデルの係数同士の関係は、論理イジングモデルのものと同等になる。しかし、 $+1$ と $+3$ の相互作用を入力する場合のような、0.001 以下の精度での入力が必要なときに論理イジングモデルの係数同士の関係が正確に反映されなくなる。また、D-Wave マシンはアナログデバイスであるため、ノイズの影響を受けやすく、係数はガウス分布に従った制御エラーを生じる [111]。例えば、式 (2.1) において $h_i = 0$, $J_{i,j} = \pm J (J = 1)$ としたイジングモデルを D-Wave Two に入力した際、相互作用はランダムなエラー $R \sim \mathcal{N}(0, \delta J)$ を含む $J_{i,j} = \pm J + R$ となった [112]。ここで、 $\delta J \approx 0.05J$ である。なお、 $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ は、平均 μ 、分散 σ^2 の正規分布を示す。もし、正規化され小さくなってしまった係数が、上記の例のようなノイズと同程度以下のとき、ノイズによって係数が打ち消されてしまうという課題がある。制御エラーの影響を削減する手法について研究が進められているが、完全に排除することはできていない [113, 114]。他のビット幅削減手法として、シフト手法が知られている [74–76]。シフト手法では、係数を整数のままビット幅削減できるため、非量子イジングマシンにも適用可能である。シフト手法によるビット幅削減手順は次の通りである。

ステップ 1: 次の式で d を算出する。

$$d = 2^{(n_{\text{original}} - n_{\text{target}})}. \quad (2.26)$$

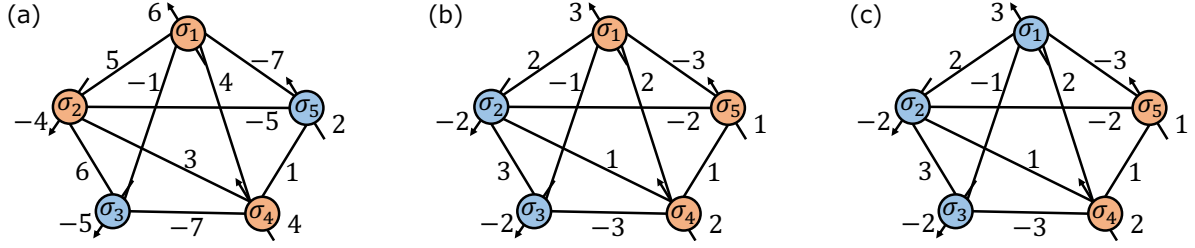


図 2.5: シフト手法によるビット幅削減の例. (a) 元のイジングモデル (4 ビット幅) と基底状態, (b), (c) BWR イジングモデル (3 ビット幅) と二つの基底状態. 実線の矢印, 実線, 円はそれぞれ磁場, 相互作用, スピンを示す. オレンジと青は基底状態におけるスピンの向き +1 と -1 を示す.

ここで, n_{original} は元のイジングモデルのビット幅, n_{target} は削減する目的のビット幅である.

ステップ 2: 元のイジングモデルの局所磁場の係数 h から, 次のようにビット幅が削減されたイジングモデル (Bit-Width Reduced; BWR イジングモデル) の局所磁場の係数 h' を算出する.

$$h' = \begin{cases} \max(\lfloor h/d \rfloor, 1) & (h > 0) \\ \min(\lceil h/d \rceil, -1) & (h < 0) \end{cases} \quad (2.27)$$

ステップ 3: 元のイジングモデルの相互作用の係数 J から, 次のように BWR イジングモデルの相互作用の係数 J' を算出する.

$$J'_{ij} = \begin{cases} \max(\lfloor J_{i,j}/d \rfloor, 1) & (J_{i,j} > 0) \\ \min(\lceil J_{i,j}/d \rceil, -1) & (J_{i,j} < 0) \end{cases} \quad (2.28)$$

ここで, $\lfloor x \rfloor$ は x 以下の最大の整数を返す関数であり, $\lceil x \rceil$ は x 以上の最小の整数を返す関数である. このように, シフト手法はイジングモデルの係数が目標とするビット幅の範囲より大きい場合は, 2 の冪乗で除算する手法である.

図 2.5 にシフト手法によってビット幅削減した例を示す. ここでは, 係数のビット幅は 4 ビットから 3 ビットに削減した. 図 2.5(a) が元のイジングモデル, 図 2.5(b)(c) がシフト手法による BWR イジングモデルである. 元のイジングモデルの基底状態は, $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = (+1, +1, -1, +1, -1)$ となる (図 2.5(a)). 一方, BWR イジングモデルの基底状態は, $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = (+1, -1, -1, +1, +1)$ と $(-1, -1, -1, +1, +1)$ の 2 通りとなる (図 2.5(b), (c)). このように, シフト手法は単純にビット幅を減らすことができるが, BWR イジングモデルの基底状態は元のイジングモデルの基底状態から変化してしまう可能性がある.

ビット幅削減による基底状態の変化について, 巡回セールスマン問題を例に組合せ最適化問題に置き換える. 図 2.3(a) のビット幅を 5 ビットから 4 ビットに削減した場合を考える (図 2.6). その場合, 図 2.6(b) と (c) の経路長はいずれも 14 であり, 最適解である. しかし, 元の問題では図 2.6(b) の経路は最適解ではない (図 2.3(b)). このように, シフト法によるビット幅削減は組合せ最適化問題の正しい結果を得られなくしてしまう可能性が残るという課題がある.

2.3.2 トポロジー制限

ここでいうトポロジーとは, 頂点と辺からなるグラフにおける接続構造のことである. イジングマシンにおいては, スピン間の相互作用のネットワーク構造を指す. イジングマシンに実装されている主なトポロジーと

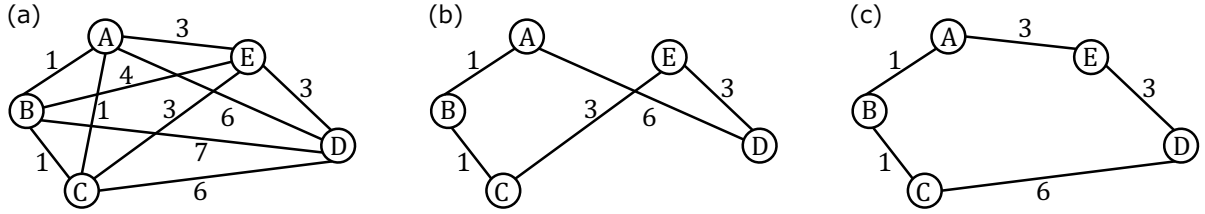


図 2.6: 5 都市の巡回セールスマン問題をシフト法によってビット幅削減した例. (a) 都市の場所と都市間の距離 (4 ビット幅). (b) 4 ビット幅の巡回セールスマン問題の最適解. ただし, 元の問題 (5 ビット幅) では最適解ではない解. (c) 4 ビット幅の巡回セールスマン問題の最適解. 元の問題 (5 ビット幅) においても最適解.

して, 完全グラフ [16, 18, 20, 40, 44–50, 73, 115] や二層の二次元正方格子 [14], キングスグラフ [15, 30–32], キメラグラフ [6, 33, 34, 116], ペガサスグラフ [35] が知られている. 完全グラフでは各々のスピン間が相互に結線されている全結合となっているが, 完全グラフ以外のトポロジーでは相互作用を設定可能なスピンのペアは限定されている疎結合となっていることがわかる (図 2.7). 一方, 論理イジングモデルは全結合を前提に構築されており, 前節で紹介した組合せ最適化問題ように任意のスピン間で相互作用をする場合がある (図 2.3). このように, 論理イジングモデルのグラフ表現がイジングマシンのトポロジーと異なる場合, 論理イジングモデルをイジングマシンに入力することができない. イジングマシンのハードウェア上でも全結合の状態を構築することが望まれるが, すべてのスピンの結線することは回路構成上複雑となり困難であるため, 互いに近傍で結線しやすいスピン間にだけ辺を張ったトポロジーとなっている. このように, トポロジー制約によって論理イジングモデルを物理イジングモデルに変換しなければならなくなる.

トポロジー制限を原因として, 論理イジングモデルをハードウェアトポロジーの部分グラフに入力可能な物理イジングモデルに変換する処理は, グラフ埋め込みと呼ばれる. 任意の問題グラフを任意のハードウェアトポロジーへの埋め込みを探索することは NP 困難であることが知られている [117]. これまでに様々な埋め込み手法が提案されている [34, 35, 77–94]. ここで, グラフ埋め込みの簡単な例を図 2.8 に示す. 論理イジングモデルは 4 つの頂点を持つ全結合グラフ (図 2.8(a)) とし, キメラグラフの 1 ユニットセル (完全 2 部グラフ) に埋め込む場合を考える. 埋め込み方法は, ヒューリスティックに物理イジングモデルを探索する Cai らの方法を使用した [79]. まず, 図 2.8(b) に論理イジングモデルの一つのスピンをユニットセルの一つの頂点に割り当てて埋め込みを試みた場合を示す. この状態では, 相互作用 $J_{1,3}$ と $J_{2,4}$ を表現する辺が存在しないため, 埋め込みは失敗している. そこで, 一つのスピンをユニットセルの二つの頂点に割り当て, その二つの頂点の間に十分に強い相互作用を導入することで同じ値をとるようにする. すると, 図 2.8(c) のように新たに追加されたスピンによって相互作用 $J_{1,3}$ と $J_{2,4}$ を表現することができるようになる. このようなグラフ埋め込みによって, 疎結合のハードウェアトポロジーであっても論理イジングモデルを表現可能である. しかしながら, 埋め込みのために必要なスピン数が増大するという課題がある. 例えば, キメラグラフを持つ D-Wave 2000Q の場合, スピンを表す qubit 数は 2,030 であるが, 64 個のスピンを持つ全結合イジングモデルまでしか入力することができない [118]. また, トポロジーがペガサスグラフであり qubit 数がそれぞれ 5,436 と 5,627 の D-Wave Advantage と D-Wave Advantage 4.1 においては, 入力可能な全結合イジングモデルのスピン数は 119 と 177 となる [36, 118].

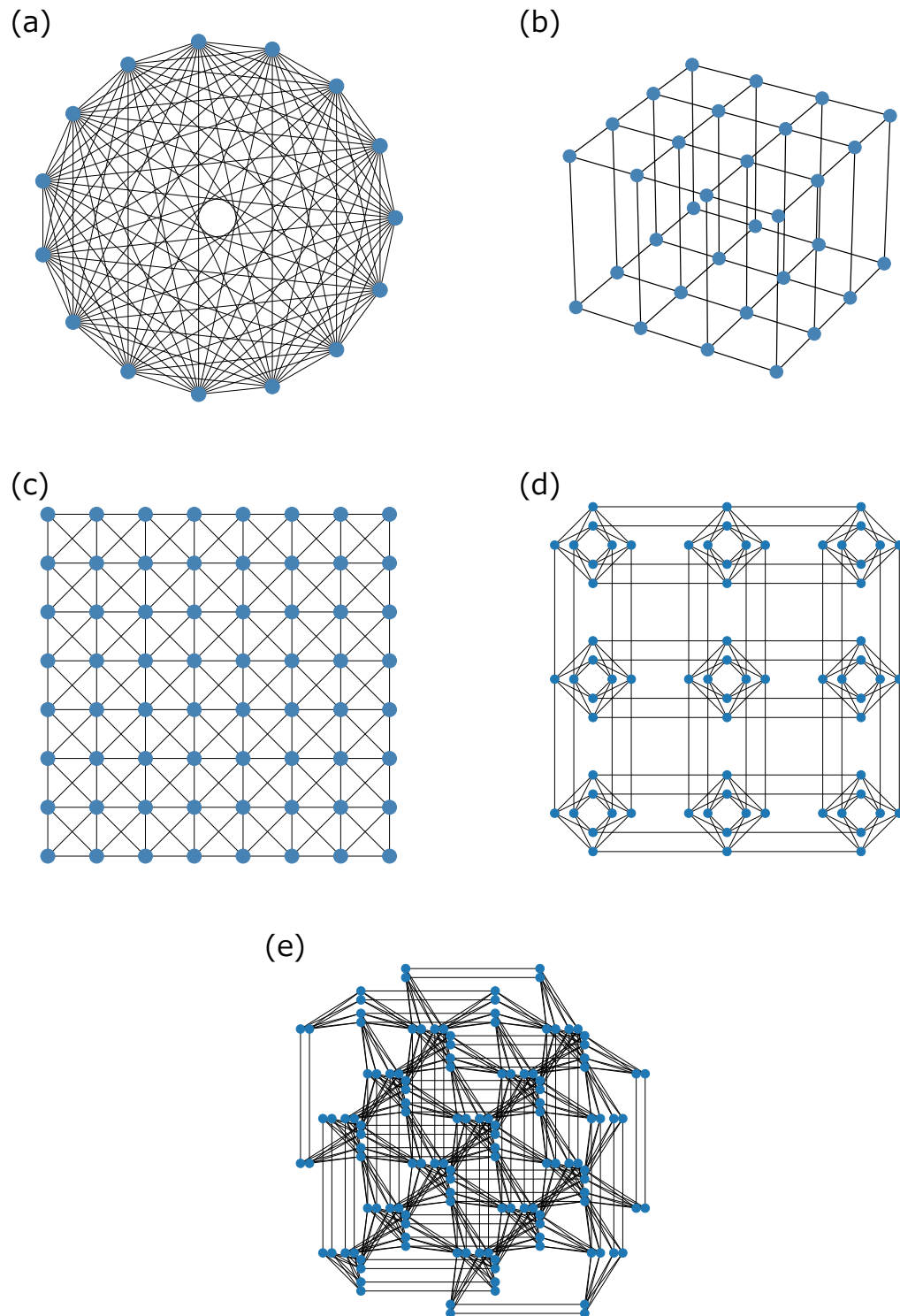


図 2.7: イジングマシンに実装されているトポロジー. (a) 完全グラフ, (b) 二層二次元正方格子, (c) キングスグラフ, (d) キメラグラフ, (e) ペガサスグラフ. 青い丸がスピン, 実線が相互作用を示す.

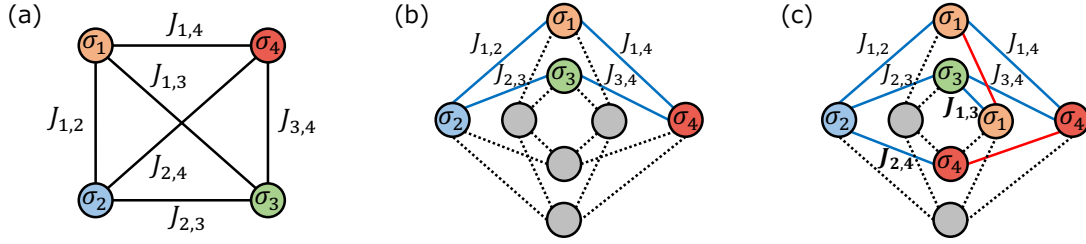


図 2.8: 4 つの頂点を持つ全結合論理イジングモデルをキメラグラフのユニットセルに埋め込む例. (a) 論理イジングモデル, (b) 埋め込みに失敗した例, (c) 埋め込みに成功した例. 赤い実線は埋め込みのために新たに追加したスピンとの相互作用, 青い実線はスピン同士の相互作用, 破線はキメラグラフの辺を示す.

2.3.3 問題サイズ制限

ここでいう問題サイズは、一度にイジングマシンに入力可能な変数の個数を指す。イジングマシンに入力可能な問題サイズを超える大規模な問題は、そのまま取り扱うことができないため、論理イジングモデルから物理イジングモデルに変換する必要がある。入力可能な問題サイズは徐々に拡大している。例として、D-Wave マシンについて考える。D-Wave マシンにおける変数は、量子ビット (qubit) である。初期モデルである D-Wave One ではの QPU に 128 qubits [6] が実装されていたが、続く D-Wave Two では 512 qubits [33], D-Wave 2X では 1,152 qubits [116], D-Wave 2000Q では 2,000 qubits 以上 [34, 118], D-Wave Advantage では 5,000 qubits 以上 [36, 37, 118] が実装されている。また、現在開発中の D-Wave Advantage2 では 7000 qubits [119] 以上が実装される予定である。組合せ最適化問題を解く際に必要な変数の個数は、2.2 節の部分問題や数分割問題においては、集合 S に含まれる数の個数と等しい (式 (2.9) と式 (2.16)) が、巡回セールスマン問題においては、都市数 N に対して $N \times N$ 個の変数が必要となる。すなわち、D-Wave 2000Q においては、都市数 50 の巡回セールスマン問題は入力不可能である。また、トポロジーの関係から入力可能な問題サイズはさらに少なくなる。巡回セールスマン問題では、全結合イジングモデルが構築されるため (式 (2.21)), D-Wave 2000Q には、都市数 8 の巡回セールスマン問題が入力可能な問題の最大となる。

この課題を解決するために、量子アニーラーに入力可能なサイズまで問題を削減したサブ問題を生成後に、量子アニーラーで問題サイズ削減問題を解くという方法が提案されてきた [90, 93, 95–109]。サブ問題を作成するために、まず最適化手法によって一時的な解を得たのち、ある基準に従って一部のスピンまたはバイナリ変数の値を -1 か $+1$, または 0 か 1 に固定することで、問題サイズを削減する変数固定手法が研究されている [98, 99, 104, 105, 108, 109]。前処理として使用される最適化手法には、タブーサーチ [120–123] や分子動力学法 [124], 線形計画法 [125] が使用されている。前処理によって固定する変数が決定した後、サブ問題は下記のように作成される。ここでは、イジングモデルを対象とし、変数固定後のサブ問題をサブイジングモデルと呼ぶ。元のイジングモデルのスピン数を n , サブイジングモデルのスピン数を m とする。また、元のイジングモデルが式 (2.1) によって表される場合、 $S = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}$ をスピンのセットとし、サブイジングモデルのスピンのセットを S' とする。そして、前処理によって得られた一時的な解のスピンの組合せ状態を $\tilde{\sigma}_i = (\tilde{\sigma}_1, \tilde{\sigma}_2, \dots, \tilde{\sigma}_n)$ とする。ここで、 $\tilde{\sigma}_i$ は -1 または 1 である。この S' と $\tilde{\sigma}_i$ からサブイジングモデルのハミル

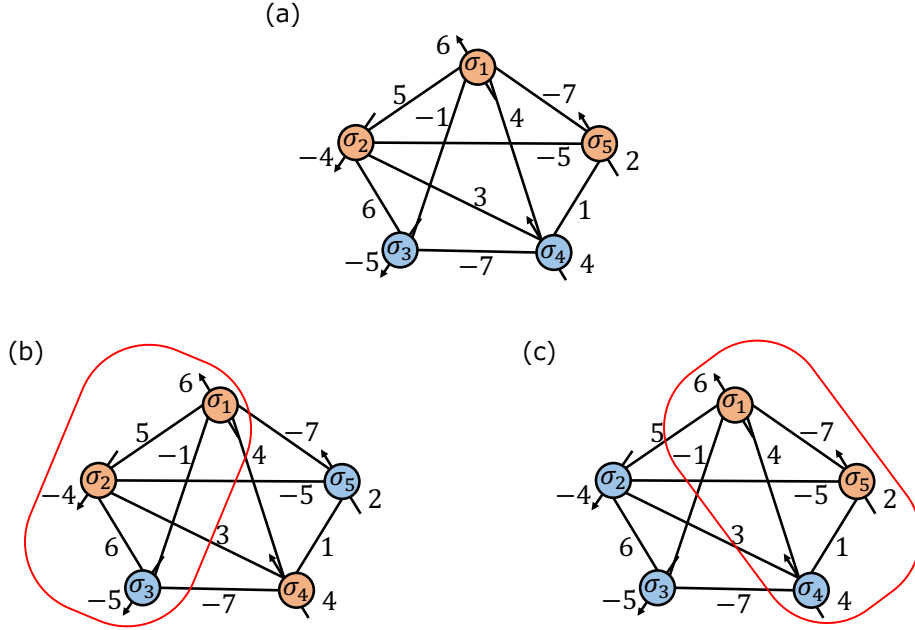


図 2.9: 変数固定手法の例. (a) 一時的な解. (b) 元のイジングモデルの基底状態の向きにスピンを固定した際のサブイジングモデルの基底状態. (c) 元のイジングモデルの基底状態と異なる向きにスピンを固定した際のサブイジングモデルの基底状態. 実線の矢印, 実線, 円はそれぞれ磁場, 相互作用, スピンを示す. オレンジと青はスピンの向き +1 と -1 を示す. 赤枠は変数固定手法で固定したスピンを示す.

トニアンは次のように生成される.

$$\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}} = - \sum_{\substack{i \\ \sigma_i \in S'}} L_i \sigma_i - \sum_{\substack{(i,j) \\ \sigma_i, \sigma_j \in S'}} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + C, \quad (2.29)$$

ここで, L_i と C は,

$$L_i = h_i + \sum_{\substack{j \\ \tilde{\sigma}_j \notin S'}} J_{i,j} \tilde{\sigma}_j, \quad (2.30)$$

$$C = - \sum_{\substack{i \\ \tilde{\sigma}_i \notin S'}} h_i \tilde{\sigma}_i - \sum_{\substack{(i,j) \\ \tilde{\sigma}_i, \tilde{\sigma}_j \notin S'}} J_{i,j} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j, \quad (2.31)$$

となる.

ここで, 変数固定の具体的な例について示す. 図 2.5 と同じイジングモデルについて, 図 2.9(a) のような一時的な解を得たとする.

図 2.5(a) のスピン状態が基底状態であるため, σ_4 と σ_5 が基底状態と異なる値となっている. もし, この σ_4 と σ_5 を除くスピンを一時的な解の値の通り固定し, サブイジングモデルを生成した場合, ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{GS}}$ は,

$$\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{GS}} = -18\sigma_4 + 10\sigma_5 - 1\sigma_4\sigma_5 - 7, \quad (2.32)$$

表 2.1: 式 (2.32) におけるスピンの全状態と対応するハミルトニアン

σ_4	σ_5	$\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{GS}}$
+1	+1	-16
+1	-1	-34
-1	+1	22
-1	-1	0

表 2.2: 式 (2.33) におけるスピンの全状態と対応するハミルトニアン

σ_2	σ_3	$\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{NGS}}$
+1	+1	8
+1	-1	22
-1	+1	6
-1	-1	-4

となる．式 (2.32) におけるスピンの全状態と対応するハミルトニアンを表 2.1 に示す．サブイジングモデルの基底状態は， $(\sigma_4, \sigma_5) = (+1, -1)$ となり，サブイジングモデルの基底状態が元のイジングモデルの基底状態と一致している．

一方，一時的な解において元のイジングモデルの基底状態とは異なる向きとなった σ_4 と σ_5 と，基底状態と同じ向きとなった σ_1 を固定し，サブイジングモデルを生成した場合，ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{NGS}}$ は，

$$\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}^{\text{NGS}} = 7\sigma_2 - \sigma_3 - 6\sigma_2\sigma_3 + 8, \quad (2.33)$$

となる．サブイジングモデルの基底状態は， $(\sigma_2, \sigma_3) = (-1, -1)$ となる（表 2.2）が，その状態は元のイジングモデルの基底状態とは異なる．

元の問題の基底状態と異なる向きの変数を抽出し，生成したサブ問題の基底状態を得ることが理想であるが，事前に元の問題の基底状態を把握することはできない．そこで，基底状態と同じ向きの変数を抽出するための方法として，様々な前処理方法が探索されている．

また，サブ問題を作成するために，確率伝播法 [126] やラグランジュ緩和 [127, 128] を用いた方法 [96] や分割統治法 [129] を用いた方法 [95]，グラフ分割手法を用いた方法 [93, 101, 102, 106] が報告されてり，それぞれの先行研究でサブ問題の解を量子アニーリングマシンで得ていた．また，従来よりも多くの変数を入力可能な埋め込み手法を提案し，より大きな問題サイズのサブ問題を生成する手法も報告されている [90, 103]．他には，線形制約を持つ組合せ最適化問題に対して，制約部分の変数を固定する手法も提案されている [130]．

2.4 シミュレーテッドアニーリングと量子アニーリング

現在実装されているイジングマシンの内部アルゴリズムのうち，基本的なものはシミュレーテッドアニーリング (Simulated Annealing: SA) と量子アニーリング (Quantum Annealing: QA) である．本節では，その二つのアルゴリズムについて示す．

シミュレーテッドアニーリング (SA) は、イジングモデルの状態遷移を誘起するために、温度の概念を擬似的に導入し、徐々に温度を下げる操作によって確率的に低エネルギー状態を探索する手法である [10–13]。イジングモデルのスピン状態を $\{\sigma_i\}$ 、その際のエネルギーを $\mathcal{H}(\{\sigma_i\})$ としたときに、温度 T における平衡状態の確率分布 $P_T^{\text{eq}}(\{\sigma_i\})$ は、

$$P_T^{\text{eq}}(\{\sigma_i\}) = \frac{\exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}{T}\right]}{\sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}{T}\right]}, \quad (2.34)$$

となる。ここでは、物理定数であるボルツマン定数 k_B を 1 としている。初期の温度 T を十分高温に保ち、十分に緩やかに温度を下げていくことで、各温度における平衡状態を保つことができ、最終的に温度 0 における平衡状態を得ることで、低エネルギー状態を探索する。

SA を実装する方法には様々な方法がある。ここでは、まずマルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた SA について示す。マルコフ連鎖とは、離散的な時間で状態が確率的に遷移する系において、現在の状態が直前の状態によってのみ決まるという確率過程のことをいう。マルコフ連鎖モンテカルロ法とは、マルコフ連鎖の状態遷移を用いて任意の確率分布に従う乱数を生成し、数値計算をする方法のことである。SA では、式 (2.34) の確率分布に従って状態遷移させることを目標としている。目的の確率分布に従って乱数を生成するために、エルゴード条件とつり合い条件を満たす遷移確率に従って、状態遷移を繰り返す必要がある。代表的な遷移分布はメトロポリス法 [131, 132] と熱浴法 [133] である。遷移前のスピン状態を $\{\sigma_i\}$ 、遷移後のスピン状態を $\{\sigma_j\}$ 、遷移確率を $w_{(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\})}$ とした時、メトロポリス法は、

$$w_{(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\})} = \begin{cases} 1 & (\mathcal{H}(\{\sigma_j\}) \leq \mathcal{H}(\{\sigma_i\})) \\ \exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_j\}) - \mathcal{H}(\{\sigma_i\})}{T}\right] & (\mathcal{H}(\{\sigma_j\}) > \mathcal{H}(\{\sigma_i\})) \end{cases}, \quad (2.35)$$

と表され、熱浴法は

$$w_{(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\})} = \frac{\exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_j\})}{T}\right]}{\exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}{T}\right] + \exp\left[-\frac{\mathcal{H}(\{\sigma_j\})}{T}\right]} = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta\mathcal{H}}{T}\right)}, \quad (2.36)$$

と表される。ここで、 $\Delta\mathcal{H}$ は $\mathcal{H}(\{\sigma_j\}) - \mathcal{H}(\{\sigma_i\})$ によって定義される。状態遷移を一度に一つのスピンだけを反転させるシングルスピンフリップによって実施することで、上記の遷移確率はエルゴード条件とつり合い条件を満たす。

式 (2.1) によって与えられるスピン数 N のイジングモデルにおいて、マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた SA では、次の手順で最適解を探索する (図 2.10)。

- ステップ 1: ランダムな初期スピン状態を準備する。
- ステップ 2: ハミルトニアンにおいて十分に高い初期温度を設定する。
- ステップ 3: N 個のスピンから一つをランダムに選択する。
- ステップ 4: 遷移確率に従って状態を遷移させる。本研究では、熱浴法を用いる。
- ステップ 5: ステップ 3–4 を “インナーループ” 回繰り返す。インナーループはスピンの数 N に設定され、これを一つのモンテカルロステップ (MCS) と呼ぶ。
- ステップ 6: 温度 T を減少させてステップ 3 に戻る。

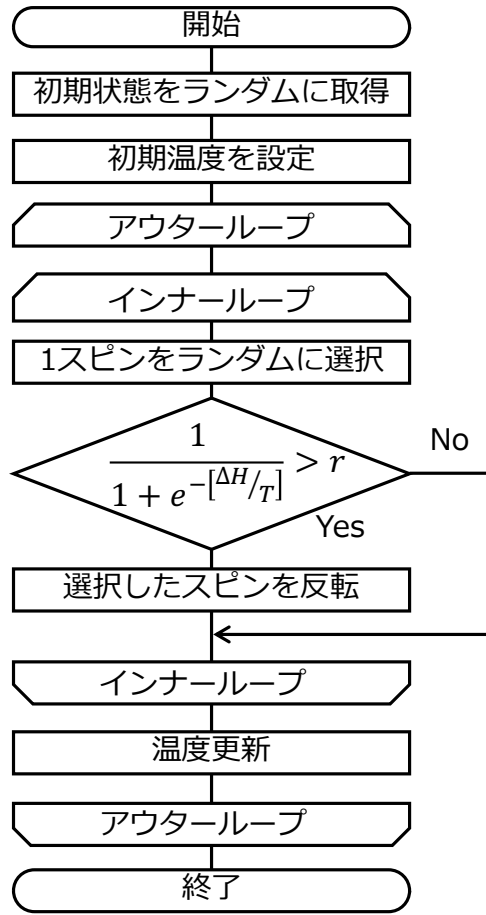


図 2.10: SA のアルゴリズム. 図中の r は 0 以上 1 未満でランダムに生成された数.

ステップ 7: ステップ 6 を “アウトターループ” 回繰り返す.

温度 T は, 設定した温度スケジュールによって減少させる. アウターループ t 回 (時刻 t) における温度を $T(t)$, スピン数 N に比例する正の定数を Δ としたときに,

$$T(t) \leq \frac{\Delta}{\ln(t+2)}, \quad (2.37)$$

といったスケジュールで温度を低下させると $t \rightarrow \infty$ の極限で基底状態が確実に得られることが S. Geman と D. Geman によって証明された [134]. これは, Geman–Geman の定理と呼ばれる. ただし, 実際に SA を実行する場合は, 温度低下に長い時間を有する Geman–Geman の定理のような理想的な温度スケジュールは設定しない. 現実的な時間で設定された温度スケジュールで得られる解は, 基底状態ではない可能性があることに注意する. また, 温度の低下に伴い状態が確率高く出現する状態のエネルギーが徐々に下がっていく様子が見られるため, SA において動的性質は重要である.

続いて, SA を微分方程式によって実装した方法について示す. SA は次のマスター方程式によって記述さ

れる。

$$\frac{dP(\{\sigma_j\}, t)}{dt} = \sum_i \mathcal{L}_{j,i} P(\{\sigma_i\}, t). \quad (2.38)$$

ここで、 $P(\{\sigma_i\}, t)$ は時刻 t におけるスピン状態 $\{\sigma_i\}$ の確率を表している。また、式 (2.38) では、スピン状態 $\{\sigma_i\}$ から $\{\sigma_j\}$ へ遷移する条件を考えている。シングルスピンフリップを実施させるため、確率遷移行列 $\mathcal{L}_{j,i}$ の要素は次のように記述される。

$$\mathcal{L}_{j,i} = \begin{cases} \left(1 + \exp\left[\frac{\Delta\mathcal{H}}{T(t)}\right]\right)^{-1} & (1 \text{ スピン違い}) \\ -\sum_{k \neq i} \mathcal{L}_{k,i} & (i = j) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}. \quad (2.39)$$

1 スピン違いの条件において、 $\mathcal{H}(\{\sigma_i\})$ は状態 $\{\sigma_i\}$ のエネルギーであり、遷移確率は熱浴法に基づき設定した。また、 $T(t)$ は時刻 t における温度である。

この微分方程式であるマスター方程式を用いることで、SA のダイナミクスが厳密に得られる。

次に、イジングマシンの内部アルゴリズムとして使用されているメタヒューリスティクスの二つ目である、量子アニーリング (QA) について示す。QA は SA に着想を得て提案された手法である。SA は組合せ最適化問題を表現したイジングモデルに対し、温度ゆらぎを用い、熱ゆらぎを徐々に弱めるという操作を行っていた。QA ではその温度ゆらぎの代わりに量子ゆらぎを導入し、量子ゆらぎを徐々に弱めるという操作によって最適な組合せを探索する。

イジングモデルにおける量子効果として、横磁場を用いた QA について説明する。この場合、量子アニーリングの動作は、次のような時間 t に依存するハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}(t)$ で表現される [7]。

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \Gamma(t)\hat{\mathcal{H}}_q, \quad (2.40)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\sum_{i \in V} h_i \hat{\sigma}_i^z - \sum_{(i,j) \in E} J_{i,j} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z, \quad (2.41)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x. \quad (2.42)$$

ここで、 $\hat{\sigma}^z$ と $\hat{\sigma}^x$ は以下で定義されるパウリ行列である。

$$\hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

式 (2.40) の $\hat{\mathcal{H}}_0$ は組合せ最適化問題を表現するものであり、式 (2.1) のスピン変数 σ_i をパウリ行列 $\hat{\sigma}_i^z$ に置き換えたものである。したがって、 $\hat{\mathcal{H}}_0$ の基底状態が、対応する組合せ最適化問題の最適解に対応する。パウリ行列 $\hat{\sigma}^z$ の固有値 (+1), (-1) に属する固有ベクトルはそれぞれ $|\uparrow\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ と $|\downarrow\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ であり、これらの値はスピン変数 σ_i の取る値である (+1) と (-1) に対応する。一方、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ は、量子ゆらぎを導入するため

に追加されたハミルトニアンである。 $\Gamma(t)$ が大きいとき、量子効果が強い。言い換えると、 $\Gamma(t)$ は量子揺らぎの大きさを表す。

SA では十分に高い温度から徐々に温度を下げていくことで、温度 0 におけるハミルトニアンの基底状態を探索する。同様に、QA では量子ゆらぎ 0 の地点の安定状態を探索する。QA では、初期状態で大きな量子ゆらぎ $\Gamma(0)$ を選び、系が $\hat{H}_q$ だけで記述されるようにする。量子ゆらぎが大きい状態においては、 $\hat{H}_q$ の基底状態は、すべての状態についてほぼ等しい確率振幅を持つ状態として表される。ここで、 $\Gamma(t) \rightarrow \infty$ の極限では、次のように表される。

$$|\rightarrow\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle). \quad (2.45)$$

この状態は、 $\hat{\sigma}^x$ の固有値 (+1) に属する固有ベクトルであり、 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ が等確率で重ね合わされた状態を表している。 $|\rightarrow\rangle$ を用いて $\hat{H}_q$ の基底状態は、次のように表すことができる。

$$|\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle := |\rightarrow\rangle \otimes |\rightarrow\rangle \otimes \cdots \otimes |\rightarrow\rangle. \quad (2.46)$$

次に、 $\Gamma(t)$ を徐々に弱め、 $\Gamma(t) = 0$ となる時刻 t における $\hat{H}_0$ の基底状態を得る。このように、QA は自明な $\hat{H}_q$ の基底状態から、非自明な $\hat{H}_0$ の基底状態を得るを試みる。

式 (2.40) の代わりに、

$$\hat{H}(t) = \frac{t}{\tau} \hat{H}_0 + \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) \hat{H}_q, \quad (2.47)$$

と定式化する方法もある [8, 9]。式 (2.47) の τ は計算時間であり、初期状態 $t = 0$ で $\hat{H}(0) = \hat{H}_q$ 、終了状態 $t = \tau$ で $\hat{H}(\tau) = \hat{H}_0$ となる。

量子力学によれば、 $\hat{H}(t)$ を時間発展させた際の状態の変化はシュレディンガー方程式：

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (2.48)$$

に従う。ここで、 $\hbar$ はディラック定数、 $|\Psi(t)\rangle$ は波動関数である。

SA では、Geman–Geman の定理により十分に緩やかな理想的な温度スケジュールを設定することで基底状態を得ることができる。QA においては、 $\hat{H}_q$ の基底状態を初期条件とし、量子力学に従って時間発展させた際に、各時刻において $\hat{H}(t)$ が基底状態を連続的に（断熱的に）たどることができれば、確実に $\hat{H}_0$ の基底状態を得ることができる。時間発展中に基底状態と励起状態のエネルギー準位が接近する場合があります、その差が近いほど励起確率が高くなるため、量子揺らぎを緩やかに制御する必要がある。QA において、断熱的に $\hat{H}(t)$ の基底状態をたどる条件として断熱条件 [135] が知られており、次のように表される。

$$\frac{\max \left| \langle \Psi_1(t) | \frac{d\hat{H}(t)}{dt} | \Psi_0(t) \rangle \right|}{\min \Delta E(t)^2} \ll 1. \quad (2.49)$$

ここで、 $|\Psi_0(t)\rangle$ および $|\Psi_1(t)\rangle$ は、それぞれ各瞬間におけるハミルトニアンの基底状態と第一励起状態の固有ベクトルを表す。また、 $\Delta E(t)$ はエネルギーギャップであり、 $|\Psi_0(t)\rangle$ の固有値を $E_0(t)$ 、 $|\Psi_1(t)\rangle$ の固有値を $E_1(t)$ としたときに、 $\Delta E(t) := E_1(t) - E_0(t)$ である。時間発展に伴う基底状態と第一励起状態のエネルギー固有値の変化とエネルギーギャップのイメージについて、図 2.11 に示した。

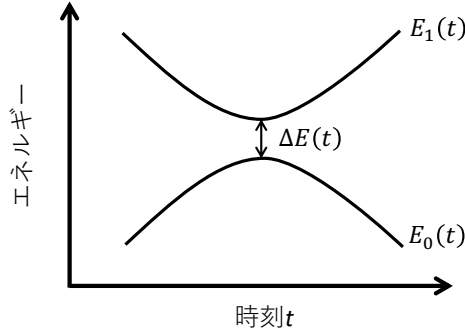


図 2.11: 時刻 t におけるエネルギーの変化. 図中の $\Delta E(t)$ はエネルギーギャップの最小値を示す.

2.5 実装されているイジングマシンのスペック

前節までに、イジングマシンのハードウェア上の制限や実装されている内部アルゴリズムについて基本的な事項を紹介した. 今節では、現在実装されているイジングマシンの具体的なスペックについて紹介する. スペックの一覧は表 2.3 に示す.

まず、デジタル回路である ASIC や FPGA, GPU によって実装されているイジングマシンについて紹介する.

Complementary Metal-Oxide-Semiconductor (CMOS) アニーリングマシンは、20,480 スピンが二層の二次正方格子上に配置されたマシンとして公開された [14]. また、Internet of Things (IoT) のエッジデバイス向けに用途を想定した、名刺サイズの CMOS アニーリングマシンが実装された [31]. トポロジーとしては、二次元正方格子に対角線が追加されたキングスグラフが採用された [136]. 次に、FPGA によって実装された 4,096 スピンの CMOS アニーリングマシンが実装された [15]. ここまで紹介した CMOS アニーリングマシンは内部アルゴリズムとして SA が実装されているが、経路積分量子モンテカルロ法に基づくシミュレーテッド量子アニーリング (Simulated Quantum Annealing: SQA) [41–43] を内部アルゴリズムとする CMOS アニーリングが実装された [30]. また、完全グラフのトポロジーを実装した CMOS アニーリングマシンも実装されている [18]. この CMOS アニーリングマシンは、Momentum Annealing (MA) という SA の変数更新を並列に行うアルゴリズムを内部アルゴリズムとしている. MA は、全結合問題を完全二部グラフ上の繋がりを持つ問題に変換し、図 2.12(b) でいう $\sigma_1^L, \dots, \sigma_6^L$ といった繋がりのないスピン同士を同時に変換するというアルゴリズムである. スピン σ_i^L と σ_i^R の相互作用を適切に設定することで良質な解探索が可能である. この CMOS アニーリングマシンでは、最大 8 ビット幅のイジングモデルを入力し、解を得ていた.

デジタルアニーラは、FPGA や ASIC によって実装された完全グラフをトポロジーとするイジングマシンである [16, 17, 20]. 2 世代のデジタルアニーラが報告されており、スピン数はそれぞれ、1,024 と 8,192 であり、ビット幅は符号付き固定小数点で 16 ビット、符号付き整数でそれぞれ 26 ビットと 64 ビットである. 内部アルゴリズムは、SA をもとにした Digital Annealer's algorithm (DA) と Parallel Tempering (PT) 法、あるいはレプリカ交換モンテカルロ法 [137–140] をもとにした Parallel Tempering Digital Annealer's algorithm (PTDA) が実装されている [19].

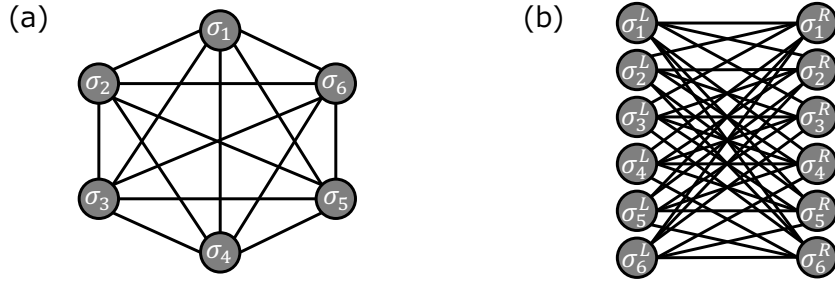


図 2.12: MA における完全二部グラフへの変換の例. (a)6 つの頂点を持つ全結合イジングモデル. (b) 完全二部グラフ. グレーの円はスピン, 黒の実線は相互作用を示す.

シミュレーテッド分岐 (Simulated Bifurcation: SB) マシンは, 並列計算に適した SB アルゴリズムを FPGA や GPU で実装したマシンである [44, 45, 47]. SB アルゴリズムは, 量子コンピュータである Quantum bifurcation Machine (QbM) [141, 142] の理論から生まれた量子インスパイアの古典アルゴリズムである. また, ballistic SB (bSB) と discrete SB (dSB) と呼ばれる二つの新たな SB アルゴリズムを内部アルゴリズムとした SB マシンが実装され, 元の SB アルゴリズムよりも高速, 高精度に解が得られることを示した [46]. ビット幅は, 単精度浮動小数点で 32 ビット [44–46] である.

Fixstars Amplify Annealing Engine (AE) は, GPU に実装されており, 260,000 以上のスピンを入力可能である [73]. また, SA のスピン更新を並行して行うような stochastic cellular automata annealing (SCA) を内部アルゴリズムとした STochAsTic Cellular automata Annealer (STATICA) が実装されている [21]. SCA は, Probabilistic Cellular Automata (PCA) の遷移確率をギブス分布に従って設定することにより提案された並列スピン更新によるイジングモデルのサンプリング法 [143] をもとに, 擬似温度を使ってアニーリングさせる手法である.

次に, 縮退光パラメトリック発振器 (degenerate optical parametric oscillator: DOPO) によって実装された coherent Ising machine (CIM) について紹介する [48–50]. CIM は, DOPO の光パルスの位相をスピンと見立てている. スピン間の相互作用にあたる光パルス間の相互作用は, 測定・フィードバック方式によって実装している. 測定・フィードバック方式では, 光パルスから一部を取り出して位相を測定し, その測定結果とイジングモデルの結合行列をもとに FPGA で計算し, その結果を再び光パルスへフィードバックすることで相互作用を実装するという方式である. この方式を使い, 全結合問題を扱い可能な最大 100,000 ビットの CIM が実装されている. 相互作用で入力可能な値は $\{-1, 0, 1\}$ となっている [49, 50].

最後に, 超伝導回路によって実装された量子アニーリングマシンについて紹介する. D-Wave Systems 社によって実装された D-Wave マシンは, 超伝導量子ビットによって QA の実装を目指した量子アニーリングマシンである [6, 33, 34, 37, 116]. 2011 年に発表された D-Wave One から世代を経るごとに, 入力可能な量子ビット数が増加している. また, トポロジーもキメラグラフ [6, 33, 116] からペガサスグラフ [35] へ変化しており, 今後発売予定の D-Wave Advantage2 ではゼファグラフ [119, 144] へと変化予定である. トポロジーの変化に伴って, 量子ビット同士の接続数は増加し, より多くのスピンが入力可能となっている. 入力可能な係数の範囲は, 理想的には相互作用が $[-1, 1]$ もしくは $[-2, 1]$, 局所磁場が $[-2, 2]$ となっており, 係数は 0.001 の精度で調整可能 [29] である.

他に, 素因数分解に特化した量子アニーリングマシンが実装されている [39]. 素因数分解に固有の Application Specific Annealing Computation (ASAC) アーキテクチャを採用して, 6 量子ビットを操作可能

である。

表 2.3: 実装されているイジングマシンの特徴

イジングマシン	ビット数	トポロジー	符号付き整数ビット幅	内部アルゴリズム	ハードウェア	文献
CMOS アニールンマシン	20,480	二層二次元正格子	2 ビット	SA	ASIC	[14]
CMOS アニールンマシン	61,952	キングスグラフ	3 ビット	SA	-	[31]
CMOS アニールンマシン	4,096	キングスグラフ	2 ビット	SA	FPGA	[15]
CMOS アニールンマシン	2,304	キングスグラフ	8 ビット	SQA	FPGA	[30]
CMOS アニールンマシン	100,000	完全グラフ	10 ビット	MA	GPU	[18]
デジタルアニラ	1,024	完全グラフ	26 ビット	DA/PTDA	FPGA	[16, 17, 19]
デジタルアニラ	8,192	完全グラフ	64 ビット	DA/PTDA	ASIC	[19, 20]
SB マシン	100,000	完全グラフ	-	SB	GPU	[44]
SB マシン	4,096	完全グラフ	-	SB	FPGA	[45]
SB マシン	100,000	完全グラフ	-	bSB/dSB	GPU	[46]
SB マシン	16,384	完全グラフ	-	SB	FPGA	[47]
Fixstars amplify AE	>262,144	完全グラフ	32/64 ビット	-	GPU	[73]
STATICA	512	完全グラフ	-	SCA	ASIC	[47]
コヒーレントイジングマシン	100	完全グラフ	2 ビット	-	パルスレーザと FPGA	[48]
コヒーレントイジングマシン	2,048	完全グラフ	2 ビット	-	パルスレーザと FPGA	[49]
コヒーレントイジングマシン	100,000	完全グラフ	2 ビット	-	パルスレーザと FPGA	[50]
D-Wave One	129	キメラグラフ	-	QA	超伝導回路	[6]
D-Wave Two	512	キメラグラフ	-	QA	超伝導回路	[33]
D-Wave 2X	1,152	キメラグラフ	-	QA	超伝導回路	[116]
D-Wave 2000Q	>2,000	キメラグラフ	-	QA	超伝導回路	[34, 118]
D-Wave Advantage	>5,000	ペガサスグラフ	-	QA	超伝導回路	[35-37, 118]
超伝導量子アニールンマシン	6	-	-	QA	超伝導回路	[39]

-: 項目に該当する情報なし

第 3 章

ビット幅削減後イジングモデルの動的過程

本章では、イジングマシンに入力可能なビット幅制限を緩和する手法について示す。まず、3.1 節では、ビット幅制限を緩和するために提案されてきたビット幅削減手法について説明し、それらの手法をイジングマシンに適用する際の課題について整理する。先行研究では、補助スピンを追加するビット幅削減手法によってビット幅削減されたイジングモデル (BWR(Bit-Width Reduced) イジングモデル) の基底状態がビット幅削減前のイジングモデル (元のイジングモデル) の基底状態と一致するという静的な特徴について解析されていた [74] もの、同じアルゴリズムで解く検討は行っていなかった。そこで 3.2 節で、同じパラメータで SA を実施した際の元のイジングモデルと BWR イジングモデルの解を比較した。その結果、二つのイジングモデル間で異なる解が得られ、その要因として動的過程の違いが影響していることが示された。3.3 節では、BWR イジングモデルの動的過程が元のイジングモデルから変化した理由を統計力学的に解析するために、補助スピン追加手法に改良を加えた提案ビット幅削減手法を示した。補助スピン追加手法と提案ビット幅削減手法の間で係数の割り当ては異なるが、実質的な静的特性は同じである。シミュレーションによって提案ビット幅削減手法を用いた BWR イジングモデルの動的過程が、元のイジングモデルのものと異なることを示した。この動的過程の違いについて考察するため、3.4 節で BWR イジングモデルを統計力学的に解析し、BWR イジングモデル特有の二つの特徴、すなわち有効温度とエントロピー緩和遅延が存在することを明らかにした。BWR イジングモデルの動的過程を元のイジングモデルのものと近づけるために、3.4 節の解析結果をもとに、3.5 節での BWR イジングモデル用の SA パラメータを提案した。そして、3.6 節で提案 SA パラメータの効果を検証した。3.7 節では効果検証結果の考察を、3.8 節ではまとめと今後の展望について記載した。

3.1 ビット幅削減手法の先行研究と課題

2 節で示した通り、ビット幅とはイジングマシンに入力可能なイジングモデルの係数の範囲である。イジングマシンのビット幅の範囲を超えるイジングモデルは入力不可能であるため、範囲に収まるようビット幅を削減する手法が開発された。係数を小数で入力可能な量子アニーリングマシンでは、係数の最大値を基準にすべての係数を正規化する方法 (auto_scale) [28] が用いられており、整数として入力する非量子イジングマシンでは、ビット幅に収まるまですべての係数を 2 の冪乗で除算する手法 (シフト法) [74–76] が知られている。しかし、いずれの方法においても元のイジングモデルと BWR イジングモデルの基底状態が変化する場合があるという課題があった。

この課題を解決するために、ビット幅削減前後によって基底状態が変化しないビット幅削減手法が提案された [74]。先行研究によって提案された手法の特徴は、新たな補助スピンを元のイジングモデルに追加する点に

ある．そのため，ここでは“補助スピン追加手法”と呼ぶ．補助スピン追加手法によるビット幅削減手順を下記に示す．なお，元のイジングモデルのスピンをシステムスピン，ビット幅削減手法によって追加されたスピンを補助スピンとしている．

まず，局所磁場のビット幅削減の手順について示す．

ステップ 1: 新たな補助スピンを追加する．

ステップ 2: 元のイジングモデルの局所磁場 h を次のように分割し，補助スピンの局所磁場 h' を算出する．

$$h' = \begin{cases} \lfloor h/2 \rfloor & (h > 0) \\ \lceil h/2 \rceil & (h < 0) \end{cases} \quad (3.1)$$

ステップ 3: システムスピンの新たな局所磁場 h'' を $h'' = h - h'$ に従って算出する．

ステップ 4: システムスピンと補助スピンの相互作用を $|h'|$ とする．

次に，相互作用のビット幅削減の手順について示す．

ステップ 1: 新たな補助スピンを追加する．

ステップ 2: 元のイジングモデルの相互作用 J を次のように分割し，一つのシステムスピンと補助スピンの相互作用 J' を算出する．

$$J' = \begin{cases} \lfloor J/2 \rfloor & (J > 0) \\ \lceil J/2 \rceil & (J < 0) \end{cases} \quad (3.2)$$

ステップ 3: システムスピンの新たな相互作用 J'' を $J'' = J - J'$ に従って算出する．

ステップ 4: 補助スピンとの相互作用がないシステムスピンと補助スピンの間に相互作用を付与し， $|J'|$ とする．

図 3.1 に補助スピン追加手法によってビット幅削減される例を示す．こちらでも係数のビット幅は 4 ビットから 3 ビットに削減している．図 3.1(a) が元のイジングモデル，図 3.1(b) が補助スピン追加手法による BWR イジングモデルである．元のイジングモデルの基底状態は， $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (+1, +1, -1)$ ，BWR イジングモデルの基底状態は， $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, s_1, s_2, s_3, s_4, s_5, s_6, s_7) = (+1, +1, -1, +1, -1, +1, +1, -1, -1, -1)$ となる (図 3.1(a),(b))．システムスピンに着目すると元のイジングモデルと BWR イジングモデルの基底状態は同じ値を示す．このように，先行研究によって提案された補助スピン追加手法を用いた BWR イジングモデルの基底状態は，元のイジングモデルの基底状態と変わらないことが理論的に確かめられている [74]．

先行研究では，非量子イジングマシンであるデジタルアニーラ [19, 20] を用いて BWR イジングモデルの解を探索した [74]．その結果，全探索によって得られた元のイジングモデルの基底状態とデジタルアニーラによって得られた解が一致した．

3.2 SA による BWR イジングモデルの求解

前節では，元のイジングモデルと BWR イジングモデルの基底状態が一致することを報告した先行研究 [74] について述べた．しかしながら，元のイジングモデルと BWR イジングモデルを同じアルゴリズムで解く検討は行っていなかった．

非量子イジングマシンに実装されている内部アルゴリズムの基本となるアルゴリズムである SA においては，イジングモデルの係数やスピンの数を考慮してパラメータを設定する．イジングモデルの係数を考慮す

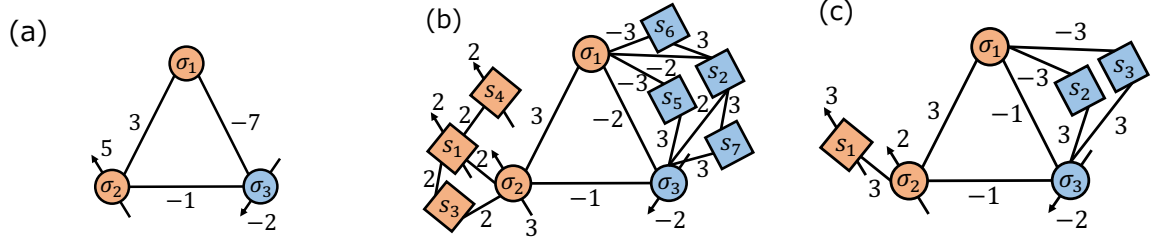


図 3.1: 補助スピン追加手法と提案手法によるビット幅削減の例. 実線の矢印, 実線, 丸はそれぞれ磁場, 相互作用, スピンを示している. オレンジと青は基底状態におけるスピンの向き $+1$ と -1 を示す. (a) 元のイジングモデル (4 ビット幅) と基底状態. (b) 補助スピン追加手法による BWR イジングモデル (3 ビット幅) と基底状態. (c) 提案手法による BWR イジングモデル (3 ビット幅) と基底状態. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

るパラメータは温度設定である. SA においては, 初期段階において多くの状態へ遷移することが望ましく, 最終段階においては容易に遷移しないことが望ましい. 熱浴法における遷移確率は, 式 (2.36) に示されるように, $1/[1 + \exp(-\Delta\mathcal{H}/T)]$ となる. この時, T は温度, $\Delta\mathcal{H}$ は遷移前のスピン状態におけるエネルギーを $\mathcal{H}(\{\sigma_i\})$, 遷移後のスピン状態におけるエネルギーを $\mathcal{H}(\{\sigma_j\})$ とした時に, $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{\sigma_j\}) - \mathcal{H}(\{\sigma_i\})$ である. 多くの状態に遷移させるためには, $\Delta\mathcal{H}$ に対して T を大きくすることが, 遷移を抑えるためには T を $\Delta\mathcal{H}$ に対して小さくすることが必要となる. シングルスピンフリップによって状態遷移を起こしているため, フリップさせるスピンにかかる磁場と相互作用によって $\Delta\mathcal{H}$ が算出される. イジングモデルのスピンにかかる係数は, イジングモデルから判断できるため, 初期温度と最終温度を設定可能である. また, イジングモデルのスピン数を考慮するパラメータは, インナーループである. 2.4 節で記載したように, マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた SA におけるインナーループはスピンの数 N に設定され, これを一つのモンテカルロステップ (MCS) と呼ぶ.

元のイジングモデルと BWR イジングモデルの SA パラメータを設定する際, 二つのイジングモデルのスピンにかかる相互作用と局所磁場は変化しないため, 温度設定は同じで良いと考えられる. また, インナーループは元のイジングモデルと BWR イジングモデルのそれぞれの MCS を設定すれば良いと考えられる. 元のイジングモデルと BWR イジングモデルに対して同じ考え方で設定したパラメータを用いて SA を実施した際に, 近い値を得ることができれば, 実使用の際にパラメータ設定を考慮する必要はなくなる.

そこで, 上記の考え方で設定したパラメータを用いた SA を元のイジングモデルと BWR イジングモデルに実施した. 用いたイジングモデルは, 周期的境界条件を持つ正方形格子 $L \times L$ のイジングモデルとした (図 3.2). このシミュレーションでは, $L = 30$ とし, 磁場と相互作用の係数は, 等確率で $[-2, 2]$ の整数値を付与した. 相互作用のために 0 は除外されたが, 磁場には含まれている. このシミュレーションでは, 係数のビット幅は 3 ビットから 2 ビットに削減した.

表 3.1 に SA のパラメータを示す. スピンにかかる四つの相互作用と一つの局所磁場の絶対値が最大の 2 となるスピンが存在すると仮定すると, このイジングモデルの最大の $\Delta\mathcal{H}$ は 20 と言える. ここでは, 初期温度 T_{initial} を 20 とした. 温度スケジュールは, 各アウターループでのべき乗減衰に設定されており, $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ によって与えられる. ここで, r は減衰率, t は t 番目のアウターループである. アウター

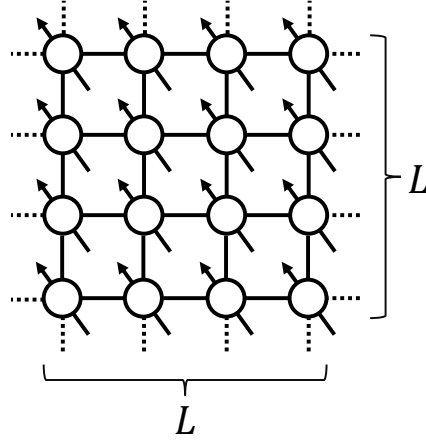


図 3.2: $L = 4$ の正方格子イジングモデルの例. 丸がスピン, 矢印が局所磁場, 実線は図上で接続するスピン同士の相互作用であり, 破線は図上で接続していないスピン同士の相互作用である. 正方格子の上側のスピンは下側のスピンと, 左側のスピンは右側のスピンと破線を介して接続している.

表 3.1: SA パラメータ.

パラメータ	値
初期状態	ランダム
初期温度 (T_{initial})	20
減衰率 (r)	0.96
アウターループ	100
インナーループ	イジングモデルのスピン数 (1 MCS)

ループと減衰率 r はそれぞれ 100 ($t = 0 - 99$) と 0.96 に設定している. これらの値を使用すると, SA の最終温度は 0.351 となる. スピンにかかる四つの相互作用と一つの局所磁場の絶対値がそれぞれ最小の 1 と 0 となるスピンが存在すると仮定すると, このイジングモデルの最小の $\Delta\mathcal{H}$ は 8 である. そのため, 最終温度は十分に低いと言える. インナーループは, イジングモデルのスピン数 (1 MCS) に設定した.

元のイジングモデルと BWR イジングモデルに対して 10 回 SA を実施した. 二つのイジングモデルのシステムスピンに着目し, エネルギーを算出したのち, エネルギーをシステムスピンの数 (すなわち, L^2) で割ることで 1 スピンあたりのエネルギー (エネルギー密度) を算出した. 元のイジングモデルの最終的に得られた解のエネルギー密度の平均値と標準偏差は, それぞれ -2.55 と 0.0104 となった. 一方, BWR イジングモデルの最終的に得られた解のエネルギー密度の平均値と標準偏差は, それぞれ -2.49 と 0.0195 となり, 二つのイジングモデルによって異なる解が得られた. この理由を考察するために, SA 実行時の二つのイジングモデルのエネルギー密度の動的過程に着目した. 図 3.3 に元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程を示す. アウターループごとのデータは, SA の 10 回のシミュレーションから得られたエネルギー密度の平均と標準偏差から得られた. この結果から, BWR イジングモデルの動的過程は元のイジングモデルのものと異なることが明らかとなった.

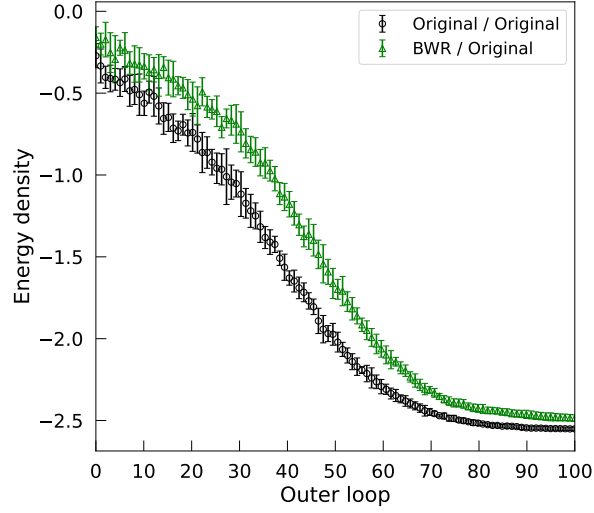


図 3.3: 正方格子イジングモデルにおける元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程の比較. BWR イジングモデル (2 ビット), および元のイジングモデル (3 ビット) は, それぞれ緑の三角, および黒い丸で示す. 各プロットは 10 回の SA 結果の平均である. エラーバーは標準偏差である.

3.3 BWR イジングモデルの動的過程

3.2 節で元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程が異なることが示された. BWR イジングモデルの動的過程を元のイジングモデルに近づけることは, SA 実施時における BWR イジングモデルの最終的な解を元のイジングモデルに近づけることに繋がることが期待される. そこで, BWR イジングモデルの動的過程が異なる理由について解析した.

ここで, BWR イジングモデルの動的過程について統計力学的に解析するために, 補助スピン追加手法に改良を加えた. 図 3.1(c) は, 本研究で提案する手法によるビット幅削減プロセスを示している.

下記では, 提案手法によるビット幅削減手順を説明する. ここでは, 目標とする n ビット幅の係数の上限と下限を, それぞれ $c_n^{\text{upper}} (= 2^{n-1} - 1)$ と $c_n^{\text{lower}} (= -(2^{n-1} - 1))$ としている. また, 補助スピンの数を N_a とする.

まず, 局所磁場のビット幅削減の手順について説明する. ここで, 元のイジングモデルのスピン σ_1 の局所磁場を h とする (図 3.4(a), 左). また, BWR イジングモデルの補助スピンを s_i とする (図 3.4(a), 右). 元のイジングモデルの h を n ビットに削減する手法は次の通りである.

ステップ 1: 次の条件を満たす h'' をシステムスピン σ_1 の新しい局所磁場とする.

$$h'' = \begin{cases} h - N_a \times c_n^{\text{upper}}, & 0 < h'' \leq c_n^{\text{upper}} \quad (h > 0) \\ h - N_a \times c_n^{\text{lower}}, & c_n^{\text{lower}} \leq h'' < 0 \quad (h < 0) \end{cases}. \quad (3.3)$$

ステップ 2: 補助スピン s_i を N_a 個追加する. そして, すべての補助スピン s_i ($i = 1, 2, \dots, N_a$) の局所磁場

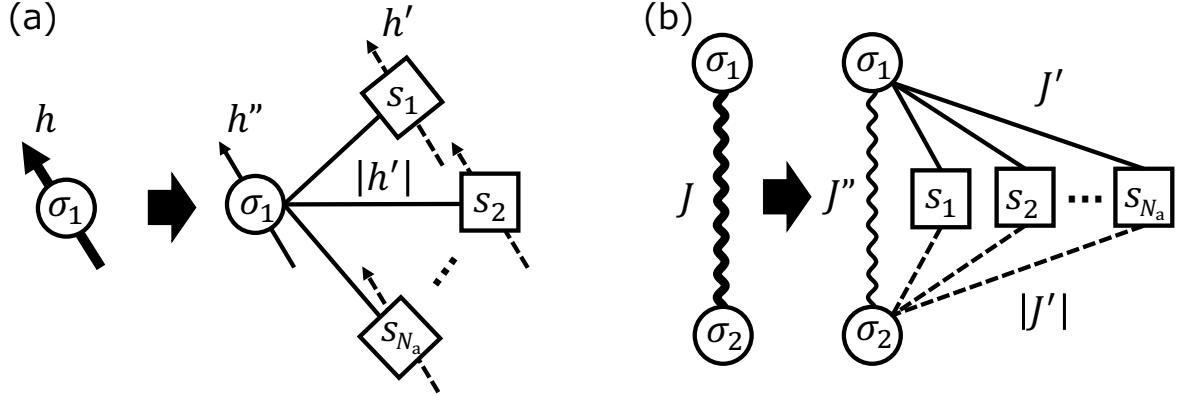


図 3.4: 提案方法を使用したビット幅削減のプロセス. 矢印, 線, 丸, 四角はそれぞれ局所磁場, 相互作用, システムスピン, 補助スピンを示す. (a) 磁場のビット幅削減プロセス. 太い実線, 点線, 細い実線の矢印はそれぞれ h , h' , h'' を示す. システムスピンと補助スピンの間の線は $|h'|$ を示す. (b) 相互作用のビット幅削減プロセス. 太い波線, 実線, 点線, 細い波線はそれぞれ J , J' , $|J'|$, J'' を示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

を下記に従い h' とする.

$$h' = \begin{cases} c_n^{\text{upper}} & (h > 0) \\ c_n^{\text{lower}} & (h < 0) \end{cases}. \quad (3.4)$$

ステップ 3: システムスピン σ_1 とすべての補助スピン s_i の相互作用を $|h'|$ とする.

続いて, 相互作用のビット幅を削減する手順である (図 3.4(b)) 二つのシステムスピン σ_1 と σ_2 の間に相互作用 J があると仮定する. 元のイジングモデルの J を n ビットに削減する手順は次の通りである.

ステップ 1: σ_1 と σ_2 の新しい相互作用を次の条件を満たす J'' とする.

$$J'' = \begin{cases} J - N_a \times c_n^{\text{upper}}, & 0 < J'' \leq c_n^{\text{upper}} & (J > 0) \\ J - N_a \times c_n^{\text{lower}}, & c_n^{\text{lower}} \leq J'' < 0 & (J < 0) \end{cases}. \quad (3.5)$$

ステップ 2: 補助スピン s_i を N_a 個追加する. そして, システムスピン σ_1 とすべての補助スピン s_i ($i = 1, 2, \dots, N_a$) の間の相互作用を下記に従い J' とする.

$$J' = \begin{cases} c_n^{\text{upper}} & (J > 0) \\ c_n^{\text{lower}} & (J < 0) \end{cases}. \quad (3.6)$$

ステップ 3: システムスピン σ_2 とすべての補助スピン s_i の相互作用を $|J'|$ とする.

図 3.1 に提案手法によりビット幅を削減した BWR イジングモデルの例を示している. こちらも, これまでの手法と同様, 係数のビット幅は 4 ビットから 3 ビットに削減されている. 元のイジングモデルの基底状態は $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (+1, +1, -1)$ である. 同様に, BWR イジングモデルの基底状態は $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, s_1, s_2, s_3) = (+1, +1, -1, +1, -1, -1)$ である, システムスピンに注目すると, 元のイジングモデルと BWR イジングモデルの基底状態は明らかに一致している. 提案手法においても補助スピン追加手法のときと同様, BWR イ

表 3.2: SA パラメータ.

パラメータ	値
初期状態	ランダム
初期温度 (T_{initial})	50
減衰率 (r)	0.97
アウターループ	100
インナーループ	イジングモデルのスピン数 (1 MCS)

ジングモデルと元のイジングモデルの基底状態は一致する．補助スピン追加手法と提案方法の間で係数の割り当ては異なるが，実質的な静的特性は同じである (図 3.1(b),(c)).

この提案手法を用いて，SA 実施時における元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程が異なることを示す． $L \times L$ の正方格子イジングモデルに対し，このシミュレーションでは， $L = 30, 40, 50$ を設定し，磁場と相互作用の係数を 7 に設定した．すなわち，式 (2.1) において，すべての i に対して $h_i = 7$ 、正方格子上的すべての最近接ペア i, j に対して $J_{i,j} = 7$ となっている．このイジングモデルの特性はよく知られており，基底状態はすべてのスピンの $+1$ を取り，スピンあたりの内部エネルギー（すなわち，エネルギー密度， H/L^2 ）は -21 となる．このシミュレーションでは，係数のビット幅は 4 ビットから 3 ビットまたは 2 ビットに削減した．

表 3.2 に SA のパラメータを示す．温度スケジュールは，各アウターループでのべき乗減衰に設定されており， $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ によって与えられる．ここで， r は減衰率， t は t 番目のアウターループである．アウターループと減衰率 r はそれぞれ 100 ($t = 0 - 99$) と 0.97 に設定している．これらの値を使用すると，SA の最終温度は 2.451 となり，元のイジングモデルのエネルギー上で十分に低いと言える．

図 3.5 に実験結果を示す．データは，SA の 10 回のシミュレーションから得られたエネルギー密度の平均と標準偏差から得られた．各 BWR イジングモデルは最終的に基底状態に達するものの，動的過程は元のイジングモデルとは大きく異なることが明らかとなった．元のイジングモデルではエネルギー密度が減少するアウターループのステップであっても BWR イジングモデルでは減少しなかった．

3.4 BWR イジングモデルの統計力学的解析

元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程の違いを調査するために，有効温度とエントロピー緩和遅延という統計力学の観点から BWR イジングモデルを分析した．

3.4.1 有効温度

統計力学における既存の研究において，BWR イジングモデル (図 3.4(b)) に似た構造を持つイジングモデルについて解析していた [145–147]．そこでは補助スピンの有無によって，システムスピン σ_1 と σ_2 の間の相関関数 $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle$ の動的過程が異なることを示していた [145]．ここで， $\langle \cdot \rangle$ は期待値を示す．そこで，上記の解析によって動的過程が変化した理由を解析できると仮説を立て，BWR イジングモデルを分析した．

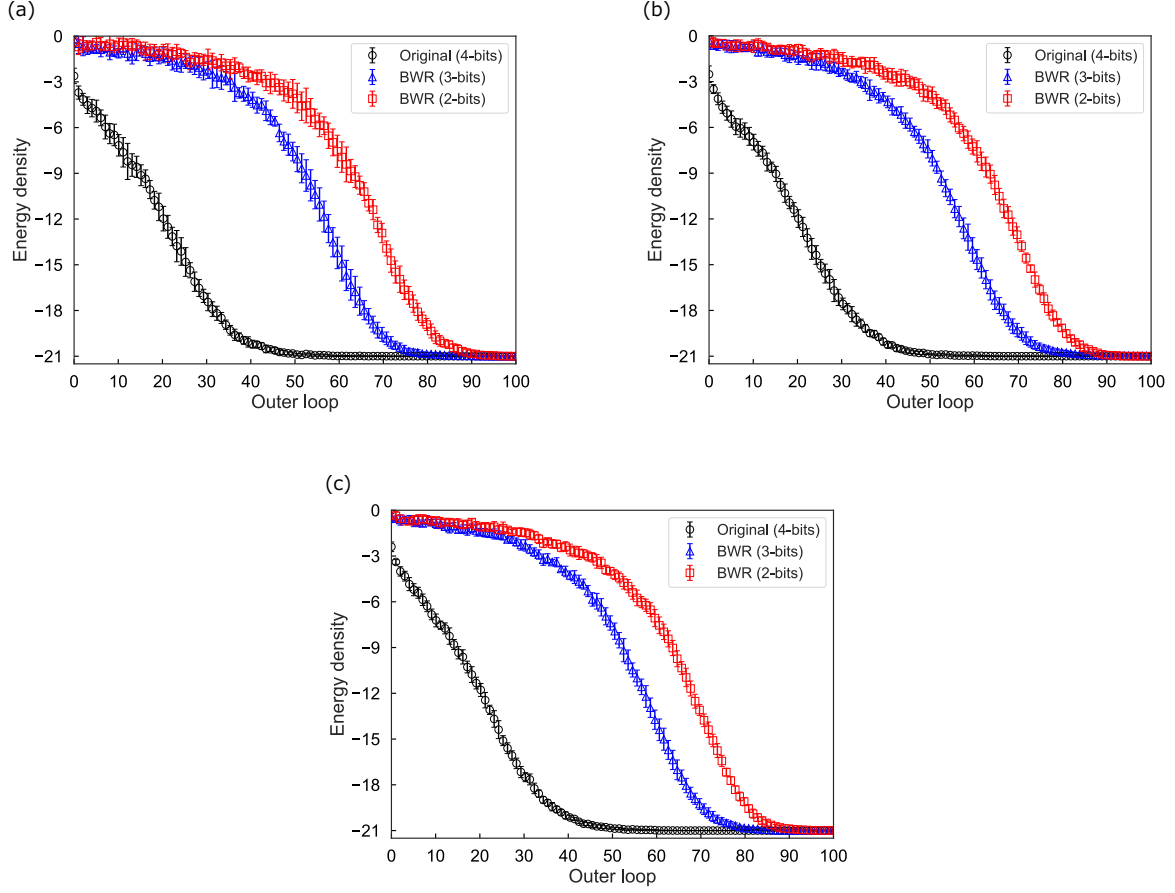


図 3.5: (a) $L = 30$, (b) $L = 40$, (c) $L = 50$ の正方格子イジングモデルにおける元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程の比較. BWR イジングモデル (2 ビット), BWR イジングモデル (3 ビット), および元のイジングモデル (4 ビット) は, それぞれ赤い四角, 青い三角, および黒い丸で示す. 各プロットは 10 回の SA 結果の平均である. エラーバーは標準偏差である. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka. 見やすさのため図の大きさを一部改変.

局所磁場

まず, 補助スピン N_a を追加し, 局所磁場のビット幅を縮小する場合を考える (図 3.4(a)).

解析のために, 元のイジングモデルのシステムスピンの期待値 $\langle \sigma_1 \rangle$ と BWR イジングモデルの期待値が一致するようにする. ここで, 元のイジングモデルの期待値 $\langle \sigma_1 \rangle_{\text{original}}$ は,

$$\langle \sigma_1 \rangle_{\text{original}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sigma_1 \times P(\sigma_1) = \frac{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sigma_1 e^{L\sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{L\sigma_1}}, \quad (3.7)$$

で与えられる. ここで $L = h/T$ であり, $P(\sigma_1)$ は温度 T における平衡確率分布である. 平衡確率分布 $P(\sigma_1)$

は

$$P(\sigma_1) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{-\beta\mathcal{H}}}, \quad (3.8)$$

によって与えられる．ここで、 $\beta = 1/T$ である．

一方、BWR イジングモデルの期待値 $\langle \sigma_1 \rangle_{\text{BWR}}$ も同様に

$$\langle \sigma_1 \rangle_{\text{BWR}} = \frac{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sigma_1 e^{L_{\text{eff}} \sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{L_{\text{eff}} \sigma_1}}, \quad (3.9)$$

で与えられる．ここで $L_{\text{eff}} = h/T_{\text{eff}}$ であり、 L_{eff} を有効磁場、 T_{eff} を有効温度と呼ぶ．式 (3.7) と式 (3.9) を一致させるために、BWR イジングモデルの補助スピンの部分和を実行し、 σ_1 の周辺確率を得る．したがって、温度 T における有効磁場 L_{eff} は、補助スピン s_i に関する部分和を実行した次の式の通り定義される．

$$\sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta\mathcal{H}} = A(T) e^{L_{\text{eff}} \sigma_1}, \quad (3.10)$$

ここで、 $A(T)$ は T の解析関数である．

$h > 0$ のとき、図 3.4(a) の右側に示される BWR イジングモデルのハミルトニアンは以下のように与えられる．

$$\mathcal{H} = -h''\sigma_1 - h'(1 + \sigma_1) \sum_{i=1}^{N_a} s_i. \quad (3.11)$$

そして、BWR イジングモデルのシステムスピンの有効磁場は以下のように得られる．

$$L_{\text{eff}} = \frac{h''}{T} + \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2h'}{T} \right) \right]. \quad (3.12)$$

有効温度 $T_{\text{eff}} = h/L_{\text{eff}}$ は、以下のように与えられる．

$$T_{\text{eff}} = \frac{h}{\frac{h''}{T} + \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2h'}{T} \right) \right]}. \quad (3.13)$$

局所磁場 $h < 0$ のとき、図 3.4(a) の右に示されるハミルトニアンは以下のように与えられる．

$$\mathcal{H} = -h''\sigma_1 - h'(1 - \sigma_1) \sum_{i=1}^{N_a} s_i. \quad (3.14)$$

そして有効磁場は下記のように得られる．

$$L_{\text{eff}} = \frac{h''}{T} - \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2h'}{T} \right) \right]. \quad (3.15)$$

有効温度は次の通りである．

$$T_{\text{eff}} = \frac{h}{\frac{h''}{T} - \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2h'}{T} \right) \right]}. \quad (3.16)$$

相互作用

次に, N_a 個の補助スピンを追加し, 相互作用のビット幅を縮小する場合を考える (図 3.4(b)). 元のイジングモデルの期待値 $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{\text{original}}$ および BWR イジングモデル $\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{\text{BWR}}$ は,

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{\text{original}} = \frac{\sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_1 \sigma_2 e^{K \sigma_1 \sigma_2}}{\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{K \sigma_1 \sigma_2}}, \quad (3.17)$$

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_{\text{BWR}} = \frac{\sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_1 \sigma_2 e^{K_{\text{eff}} \sigma_1 \sigma_2}}{\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{K_{\text{eff}} \sigma_1 \sigma_2}}, \quad (3.18)$$

によって与えられる. ここで, $K = J/T$ および $K_{\text{eff}} = J/T_{\text{eff}}$ であり, K_{eff} を有効相互作用と呼ぶ. 式 (3.17) と式 (3.18) を一致させるために, 有効相互作用 K_{eff} は, 補助スピン s_i をトレースするため, 温度 T における有効相互作用 K_{eff} は次の式のように定義される.

$$\sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}} = A(T) e^{K_{\text{eff}} \sigma_1 \sigma_2}. \quad (3.19)$$

$J > 0$ のとき, 図 3.4(b) の右側に示される BWR イジングモデルのハミルトニアンは次のように与えられる.

$$\mathcal{H} = -J'' \sigma_1 \sigma_2 - J' \left(\sum_{i=1}^{N_a} s_i \right) (\sigma_1 + \sigma_2). \quad (3.20)$$

そして, σ_1 と σ_2 の間にある有効相互作用は下記のように与えられる.

$$K_{\text{eff}} = \frac{J''}{T} + \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2J'}{T} \right) \right]. \quad (3.21)$$

有効温度 $T_{\text{eff}} = J/K_{\text{eff}}$ は, 以下のように与えられる.

$$T_{\text{eff}} = \frac{J}{\frac{J''}{T} + \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2J'}{T} \right) \right]}. \quad (3.22)$$

相互作用 $J < 0$ のとき, 図 3.4(b) の右に示されるハミルトニアンは次のように与えられる.

$$\mathcal{H} = -J'' \sigma_1 \sigma_2 - J' \left(\sum_{i=1}^{N_a} s_i \right) (\sigma_1 - \sigma_2). \quad (3.23)$$

そして, 有効相互作用は次のように得られる.

$$K_{\text{eff}} = \frac{J''}{T} - \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2J'}{T} \right) \right]. \quad (3.24)$$

有効温度は次の通りである.

$$T_{\text{eff}} = \frac{J}{\frac{J''}{T} - \frac{N_a}{2} \log \left[\cosh \left(\frac{2J'}{T} \right) \right]}. \quad (3.25)$$

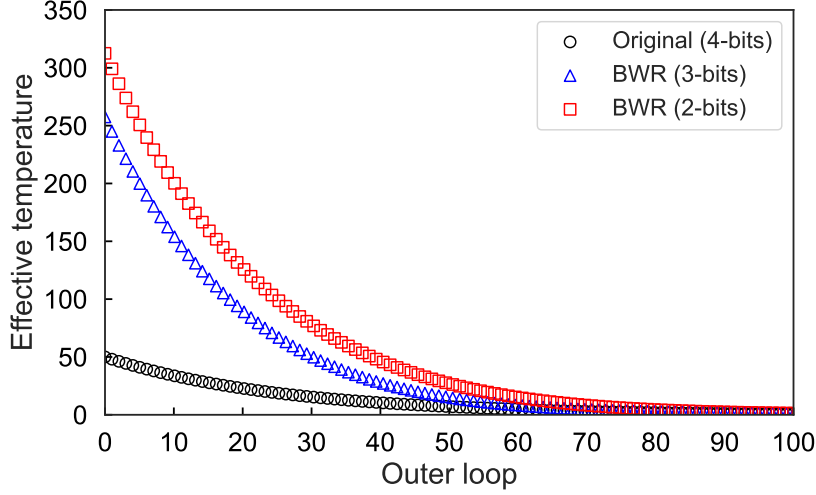


図 3.6: 元のイジングモデル (J または $h = 7$) および BWR イジングモデルの有効温度スケジュール. 赤い四角, 青い三角, および黒い丸はそれぞれ, BWR イジングモデル (2-bit), BWR イジングモデル (3-bit), および元のイジングモデル (4-bit) を示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

式 (3.13), (3.16), (3.22), および (3.25) によれば, 有効温度 T_{eff} は, イジングモデルに追加された温度 T とは異なる. 図 3.6 は, 3.3 節で SA に使用された温度 T と T によって定められた BWR イジングモデルの T_{eff} を比較している. イジングモデルの係数は $J = h = 7$ と設定されているので, ビット幅を 3 ビットに縮小した際の T_{eff} を算出するために $N_a = 2$, $J'' = 1$, および $J' = 3$ を設定した. 係数のビット幅を 2 ビットに縮小する際には, $N_a = 6$ および $J'' = J' = 1$ を設定した. 図 3.6 より, T_{eff} の温度スケジュールは, T の温度よりも高い温度から急速に減少することが示された. これは, 温度 T と T_{eff} との間の差異が動的過程に影響を与えることを示唆している.

3.4.2 エントロピー緩和遅延

先行研究で, 補助スピンを持つフラストレーション系の格子内で緩和遅延が発生することが報告された [146]. この現象は「エントロピー緩和遅延」と呼ばれ, 補助スピンの自由度分布に起因する. 補助スピンの付与された格子系は, 提案方法によりビット幅削減をした BWR イジングモデルと類似の構造である. したがって, 我々は BWR イジングモデルにエントロピー緩和遅延が現れ, この現象が動的過程に影響を与えると仮定し, 先行研究 [146] に従って, システムスピンの局所構成が固定された場合の状態の数を解析した.

まず, 元の相互作用が正の場合を分析した (図 3.7). 図 3.7(a) および 3.7(b) はそれぞれ “平行状態” (例: $(\sigma_1, \sigma_2) = (+, +)$) および “反平行状態” (例: $(\sigma_1, \sigma_2) = (+, -)$) のシステムスピンを示している. 元の相互作用が正の場合, $+$ の内部磁場を表す補助スピンの数を m とする. 平行状態と逆平行状態のエネルギーは次のように与えられる.

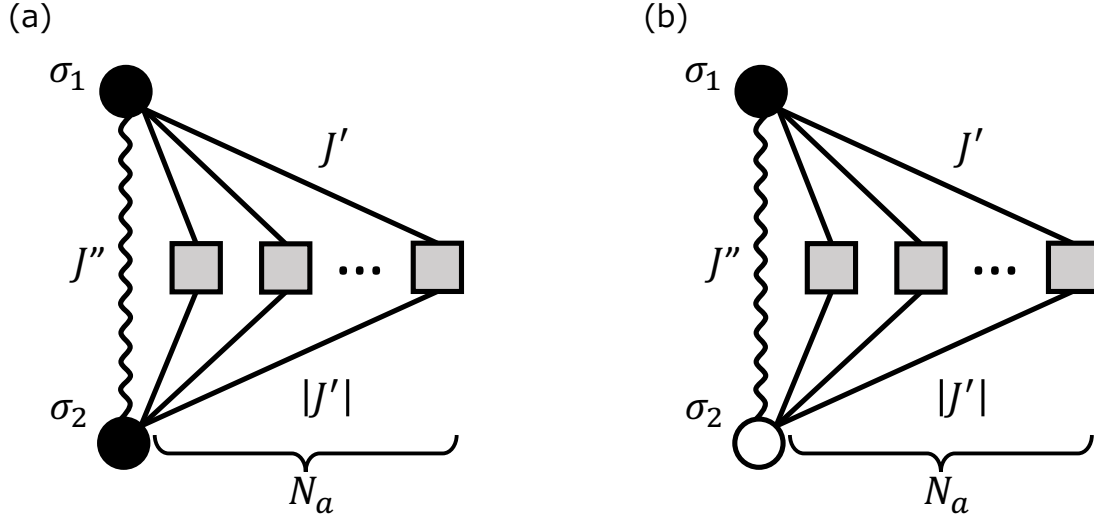


図 3.7: 元の相互作用が正のときの (a) 平行状態および (b) 反平行状態のシステムスピケース. 黒, 白, グレーのシンボルはそれぞれ $+$, $-$, そして無秩序なスピンを示す. 丸と四角はそれぞれシステムおよび補助スピンを示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

$$E_{++}^{(N_a)}(m) = (2N_a - 4m)J' - J'', \quad (3.26)$$

$$E_{+-}^{(N_a)}(m) = J''. \quad (3.27)$$

次に, 温度 T における補助スピンの確率分布を考える. 平行状態および反平行状態では, N_a 個の補助スピン中の m 個の上向きスピンのそれぞれの確率は次のように与えられる.

$$Q_{++}^{(N_a)}(m) = \frac{\exp(-2\beta J' N_a)}{(2 \cosh 2\beta J')^{N_a}} \binom{N_a}{m} \exp(4\beta J' m), \quad (3.28)$$

$$Q_{+-}^{(N_a)}(m) = \binom{N_a}{m} \left(\frac{1}{2}\right)^{N_a}. \quad (3.29)$$

次に, 元の相互作用が負の場合を分析した. 図 3.8(a) および 3.8(b) はそれぞれ “平行状態” (例: $(\sigma_1, \sigma_2) = (-, -)$) と “反平行状態” (例: $(\sigma_1, \sigma_2) = (+, -)$) を示している. 元の相互作用が負の場合に $+$ の内部磁場を表す補助スピンの数を n とする. 平行状態および反平行状態のエネルギーは次のように与えられる.

$$E_{--}^{(N_a)}(n) = -J'', \quad (3.30)$$

$$E_{+-}^{(N_a)}(n) = (2N_a - 4n)J' + J''. \quad (3.31)$$

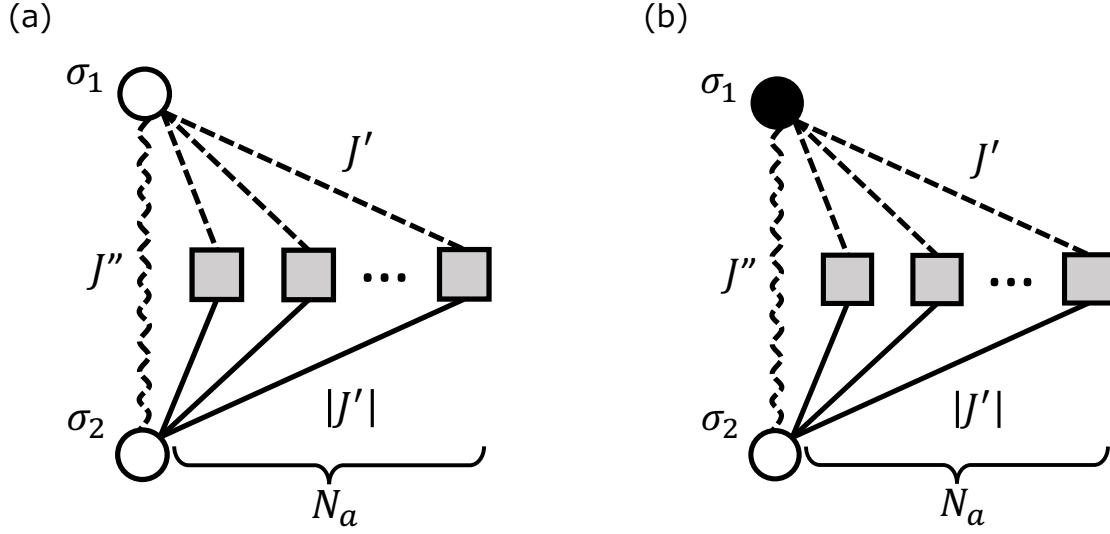


図 3.8: 元の相互作用が負のときの (a) 平行状態および (b) 反平行状態のシステムスピン空間. 黒, 白, および灰色の記号は $+$, $-$, および無秩序なスピンを示し, 実線と点線はそれぞれ正および負を示す. 丸と四角はそれぞれシステムスピンと補助スピンを示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

平行状態および反平行状態の N_a 個の補助スピンの中で n 個の上向きスピンのそれぞれの確率は, 次のように与えられる.

$$R_{--}^{(N_a)}(n) = \binom{N_a}{n} \left(\frac{1}{2}\right)^{N_a}, \quad (3.32)$$

$$R_{+-}^{(N_a)}(n) = \frac{\exp(-2\beta J' N_a)}{(2 \cosh 2\beta J')^{N_a}} \binom{N_a}{n} \exp(4\beta J' n). \quad (3.33)$$

$Q_{+-}^{(N_a)}(m)$ と $R_{--}^{(N_a)}(n)$ は温度に依存しないため, これらの方程式は単純な二項分布であり同等である. 対照的に, $Q_{++}^{(N_a)}(m)$ と $R_{+-}^{(N_a)}(n)$ は温度に依存する. これらは高温においてエントロピー効果のために $N_a/2$ で最大となり, 低温でほぼ N_a および 0 で最大となる.

BWR イジングモデル上のシステムスピンの遷移確率を推定するために, 先行研究 [146] に従い, 図 3.9 に示される中央スピンのフリップ確率を計算する. 中央スピン, または“自由スピン”は, 二つのアップスピンと二つのダウンスピンに囲まれている. $N_a = 0$ の場合, 熱浴法 [133] の自由スピンのフリップ確率は $1/2$ である. しかし, 提案された方法で補助スピンの追加されると ($N_a > 0$), 周囲の補助スピンの分布のためにフリップ確率は $1/2$ 未満となる.

図 3.9(a) は, 元の相互作用が正である場合を示している. 自由スピンの内部磁場は,

$$h(n_1, n_2) = 2J'(2N_a - n_1 - n_2), \quad (3.34)$$

によって与えられる. ここで, n_1 および n_2 はそれぞれ平行状態と反平行状態の $+$ 内部磁場を示す補助スピ

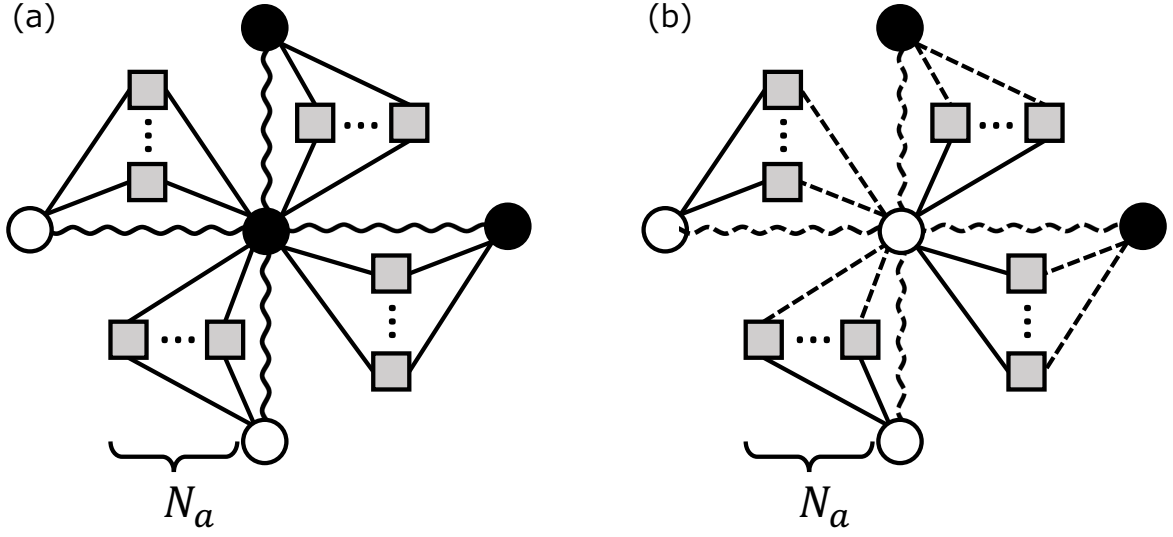


図 3.9: 元の相互作用が (a) 正および (b) 負の場合の中央スピン (自由スピン) のフリップ確率を分析するためのモデル. 黒, 白, および灰色のシンボルはそれぞれ $+$, $-$, および無秩序なスピンを示し, 丸と四角はそれぞれシステムスピンと補助スピンを示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

ンの数である. 熱浴法において, 自由スピンのフリップ確率 P_{flip} は以下のように与えられる.

$$P_{\text{flip}} = \sum_{(n_1, n_2)} Q_{++}^{(2N_a)}(n_1) Q_{+-}^{(2N_a)}(n_2) \times \frac{1}{1 + \exp[-2\beta h(n_1, n_2)]}. \quad (3.35)$$

$$P_{\text{flip}} = \frac{\exp(-4\beta J' N_a)}{(4 \cosh 2\beta J')^{2N_a}} \sum_{(n_1, n_2)} \binom{2N_a}{n_1} \binom{2N_a}{n_2} \times \frac{\exp(4\beta J' n_1)}{1 + \exp[-4\beta J'(2N_a - n_1 - n_2)]}. \quad (3.36)$$

同様に, 元の相互作用が負の場合 (図 3.9(b)), 自由スピンの内部磁場は,

$$h(n_3, n_4) = -2J'(n_3 - n_4), \quad (3.37)$$

によって与えられる. ここで, n_3 および n_4 はそれぞれ反平行状態と平行状態の $+$ 内部磁場を示す補助スピンの数である. 熱浴法において, P_{flip} は以下のように与えられる.

$$P_{\text{flip}} = \sum_{(n_3, n_4)} R_{+-}^{(2N_a)}(n_3) R_{--}^{(2N_a)}(n_4) \times \frac{1}{1 + \exp[-2\beta h(n_3, n_4)]}, \quad (3.38)$$

$$P_{\text{flip}} = \frac{\exp(-4\beta J' N_a)}{(4 \cosh 2\beta J')^{2N_a}} \sum_{(n_3, n_4)} \binom{2N_a}{n_3} \binom{2N_a}{n_4} \times \frac{\exp(4\beta J' n_3)}{1 + \exp[4\beta J'(n_3 - n_4)]}. \quad (3.39)$$

ここで, P_{flip} は, 式 (3.36) および (3.39), 任意のシステムスピンの組合せにおいて同じである.

図 3.10 は, 3.3 節で用いた元のイジングモデルと BWR イジングモデルの自由スピンのフリップ確率を比較した結果である. 高温で補助スピンの数 N_a に関して確率は一定であるが低温で大きく変化する. 低温では

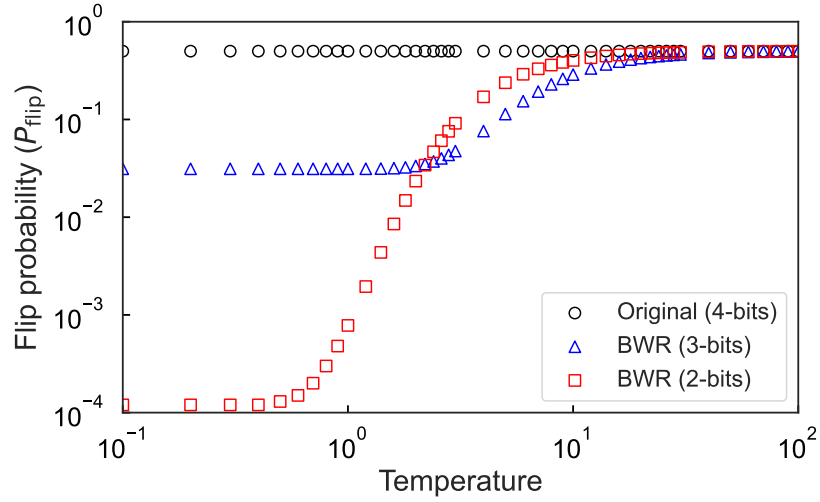


図 3.10: 各温度における元のイジングモデル ($J = 7$) と BWR イジングモデルの自由スピンのフリップ確率. 赤い四角, 青い三角, 黒い丸はそれぞれ BWR イジングモデル (2 ビット), BWR イジングモデル (3 ビット), 元のイジングモデル (4 ビット) を示す. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

P_{flip} に上限があることに注意する. これはエネルギーではなく, エントロピー効果による緩和遅延が原因である. 上限の値は次のように表される.

$$\lim_{T \rightarrow 0} P_{\text{flip}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} \right)^{N_a}. \quad (3.40)$$

低温で元のイジングモデルと BWR イジングモデル間のフリップ確率には違いがあり, これは前節の SA のパラメータで考慮されていなかった. この違いは動的過程の違いに影響を与える可能性がある. なお, 磁場の補助スピンではエントロピー緩和遅延は発生しない.

3.5 提案 SA パラメータ

3.4 節では, 提案方法によってビット幅削減をした BWR イジングモデルを統計力学的に解析した. その結果, BWR イジングモデルには有効温度とエントロピー緩和遅延という二つの特性的な性質があることが明らかとなった. これらの特性は, 補助スピンを追加したことに起因するため元のイジングモデルには存在しない. この解析結果を受け, 3.3 節では, 統計力学的な性質が変わるにもかかわらず, ビット幅の削減前後で同じ SA のパラメータで SA が実行されたため, 元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的なプロセスが異なると推測された. そこで, 3.5 節では, BWR イジングモデルの特性を考慮した SA パラメータを提案し, 提案 SA パラメータを実験的に評価する.

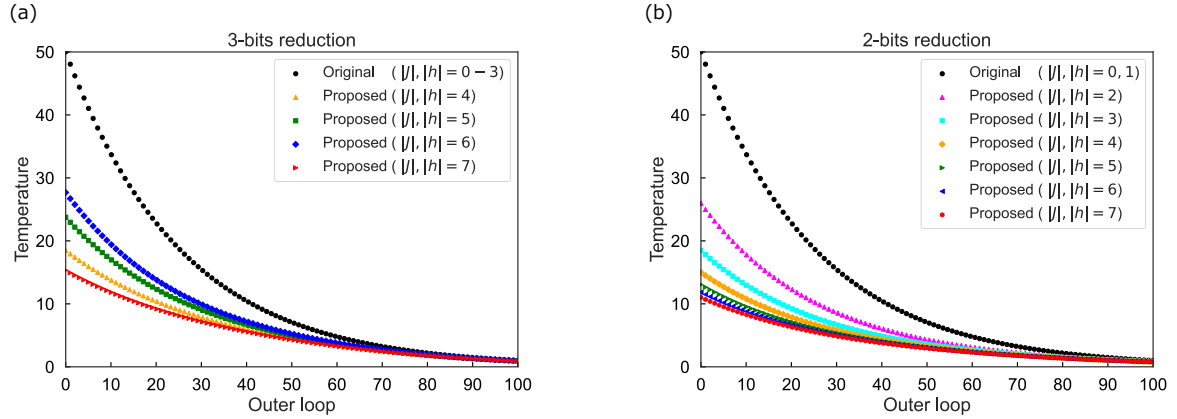


図 3.11: 複数の磁場または相互作用における (a)3 ビット幅削減および (b)2 ビット幅削減 BWR イジングモデルの提案温度スケジュール. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

3.5.1 パラメータ変更方法

パラメータ変更に向け、まず、有効温度 T_{eff} が元の温度スケジュールの温度 T に近づくよう式 (3.13), (3.16), (3.22) または (3.25) を使用して新たな温度スケジュールを作成する。図 3.11 は、3.3 節で使用された元の温度スケジュールと、係数の絶対値 0–7 を 3 ビットまたは 2 ビットに削減したときの提案された温度スケジュールを示している。

次に、フリップ確率に基づいてインナーループを変更する。BWR イジングモデルのフリップ確率を元のイジングモデルに近づけるために、有効緩和時間 τ_{eff} を定義する。先行研究 [146] によれば、 τ_{eff} は

$$\tau_{\text{eff}} = P_{\text{flip}}^{-1}, \quad (3.41)$$

として与えられる。

図 3.12 は、温度 T と元のイジングモデルまたは BWR イジングモデルの τ_{eff} の関係を示している。係数 0–7 の絶対値を 3 ビットまたは 2 ビットに削減している。有効緩和時間 τ_{eff} は、式 (3.36) または (3.39), および (3.41) によって計算することができる。元のイジングモデルの τ_{eff} は、図 3.9 で示されるシステムの定義から 2 である。

パラメータを変更するためのアルゴリズムは以下のとおりである。

ステップ 1: T_{eff} が元のものに近くなるように温度スケジュールを設定する。

ステップ 2: BWR イジングモデルの τ_{eff} が元のイジングモデルのそれに近くなるようにインナーループを設定する。 τ_{eff} はステップ 1 で決定された各温度で得られる。元のインナーループは $\tau_{\text{eff}} = 2$ に対応しているため、提案されたインナーループは $1 \text{ MCS} \times \tau_{\text{eff}} / 2$ に設定される。

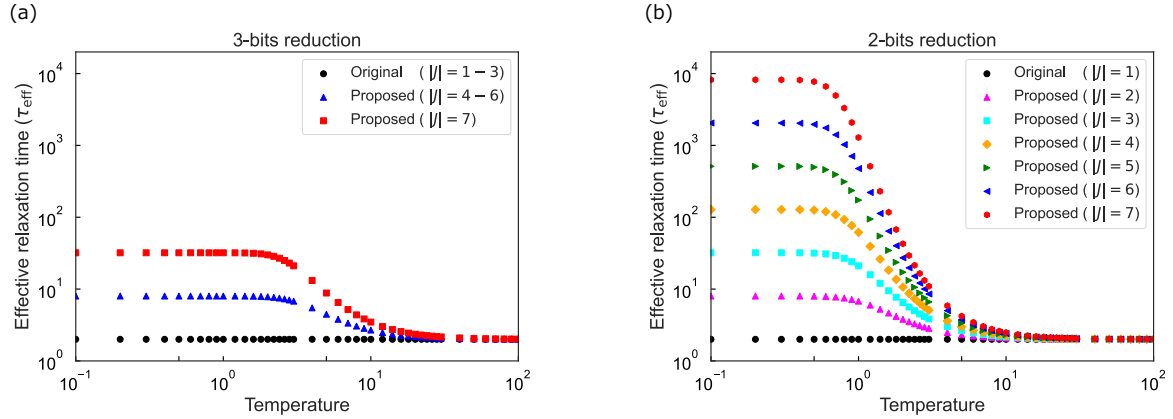


図 3.12: 複数の相互作用における (a)3 ビット幅削減または (b)2 ビット幅削減 BWR イジングモデルの有効緩和時間 τ_{eff} . Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

3.5.2 シミュレーションによる評価

提案 SA パラメータの有効性を評価するために、3.3 節で使用されたイジングモデルのエネルギー密度の動的過程を実験的に調査した。表 3.2 に記述されている SA パラメータを使用して元のイジングモデルの SA を実行した。BWR イジングモデルの場合、SA パラメータは表 3.2 から温度スケジュールとインナーループが変更された。係数は 3 ビットまたは 2 ビットに削減した。図 3.13 から、今回シミュレーションしたいいずれの大きさのイジングモデルに対しても、提案 SA パラメータによる BWR イジングモデルの動的過程は、元のイジングモデルの動的過程と類似している。

3.6 ランダムイジングモデルに対する効果の検証

3.5 節では、特性のよく知られたすべての係数が同じ正の値のイジングモデルを用いて、提案 SA パラメータの効果を検証した。そこで、ランダムかつ正負を含む係数を持つイジングモデルに対して提案 SA パラメータの適用可能性を評価した。

まず、3.2 節で使用したイジングモデルに対して検証した。磁場と相互作用の係数は、等確率で $[-2, 2]$ の整数値を付与しており、 $L = 30$ の正方格子である。相互作用のために 0 は除外されたが、磁場には含まれている。係数のビット幅は 3 ビットから 2 ビットに削減した。SA の元のパラメータは、表 3.1 に記載の通りである。図 3.14 に元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程を示す。この結果から、提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルの動的過程は元のイジングモデルのものに近づくことが示された。

続いて、係数を大きくしたイジングモデルについて検証した。磁場と相互作用の係数の値は、等確率で $[-7, 7]$ の整数値とした。相互作用のために 0 は除外されたが、磁場には含まれている。イジングモデルは正方格子とし、 $L = 30, 40, 50$ とした。このシミュレーションでは、元のイジングモデルのビット幅を 4 ビットから 3 ビットまたは 2 ビットに削減した。

本シミュレーションで使用した SA パラメータは表 3.2 の通りであるが、減衰率が異なる。減衰率 r は、最

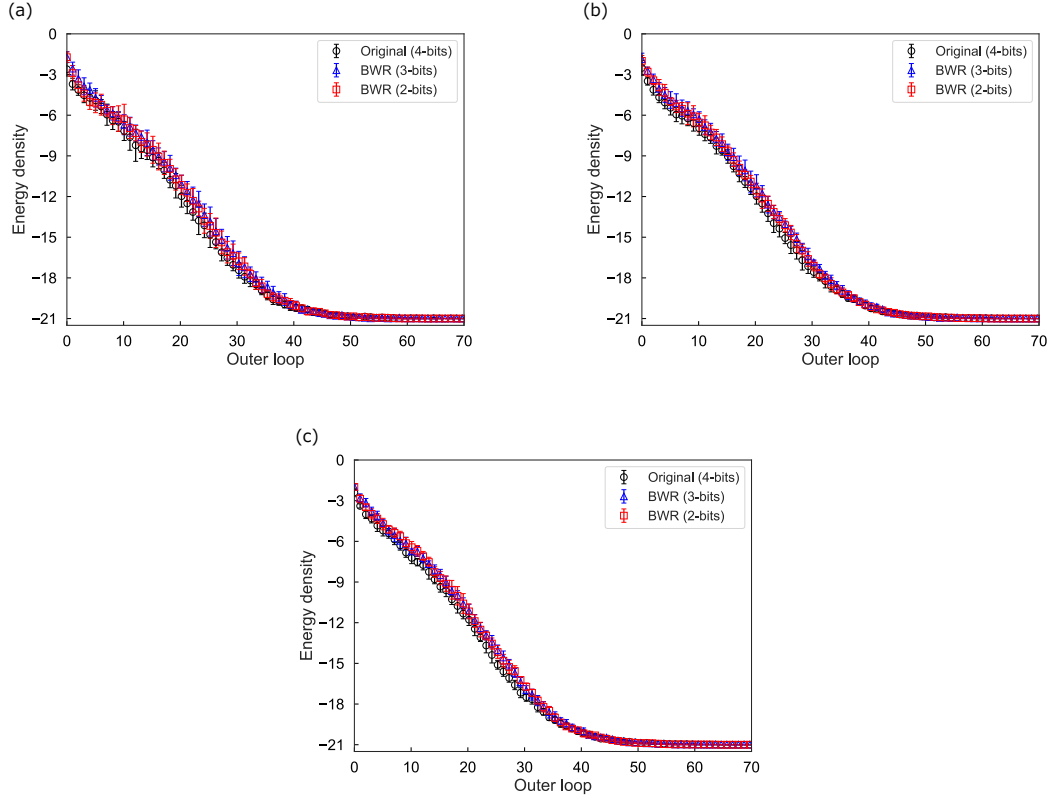


図 3.13: 提案 SA パラメータによる BWR イジングモデルと元の SA パラメータによる元のイジングモデルの動的過程の比較. (a) $L = 30$, (b) $L = 40$, (c) $L = 50$ の正方格子イジングモデル. BWR イジングモデル (2 ビット), BWR イジングモデル (3 ビット), および元のイジングモデル (4 ビット) は, それぞれ赤い四角, 青い三角, および黒い丸で示されている. 各プロットは 10 回の SA 結果の平均である. エラーバーは標準偏差である. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875].Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka. 見やすさのため図の大きさを一部改変.

終温度が 1 に等しくなるように設定され, $r = 0.9612$ となった. 他に異なる種類の温度スケジュールを使用した結果については, 付録 A に記載した.

また, このシミュレーションでは提案 SA パラメータに変更する際に参照する有効温度とエントロピー緩和遅延のそれぞれの効果について検証するために, 下記に示す四種類の SA パラメータで SA を実行した.

- 元の SA パラメータ
元の SA パラメータから変更していないもの.
- 修正温度スケジュール (Temperature Schedule: TS)SA パラメータ
係数の最大絶対値 (すなわち, $|J|, |h| = 7$) に基づいて温度スケジュールのみが変更されたもの. 最大絶対値に基づいた変更された温度スケジュールは, 最低温度から最も緩やかに温度が下がることを示す (図 3.11).
- 修正インナーループ (Inner Loop: IL)SA パラメータ

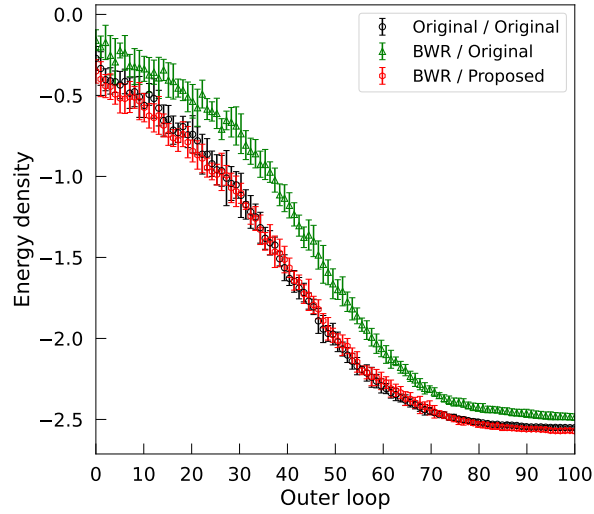


図 3.14: 正方格子イジングモデルにおける元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程の比較. 黒い丸は元のイジングモデルを示し, 緑の三角形と赤い六角形はそれぞれ, 元の SA パラメータと提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルの動的過程を示す. 各プロットは 10 回の SA 結果の平均である. エラーバーは標準偏差である.

係数の最大絶対値に基づいてインナーループのみが変更されたもの. 最大絶対値に基づいた効果的な緩和時間 τ_{eff} は, 最も長い効果的な緩和時間を示す (図 3.12).

- 提案 SA パラメータ

温度スケジュールとインナーループの両方を変更したもの.

図 3.15 は, 各 SA パラメータセットに対しての元のイジングモデルおよび BWR イジングモデルの動的過程を示す. シミュレーションは, 10 回の SA のエネルギー密度の平均値と標準偏差を表す. 温度スケジュールを変更すること (TS SA パラメータ) で, BWR イジングモデルのエネルギー密度はアウトーループの最初の段階で元のイジングモデルの動的過程に近づく. 有効緩和時間をインナーループに適用すること (IL SA パラメータ) で, アウターループの後半で BWR イジングモデルのエネルギー密度が高い値で終了することを防ぐ. そして, BWR イジングモデルに提案 SA パラメータを用いると BWR イジングモデルの動的過程は, 元のイジングモデルの動的過程とほぼ同じとなった. ただし, 3 ビットに削減するとアウトーループの初期段階で差が表れた. これらの特徴は問題サイズに依存しなかった.

次に, 複数の問題インスタンスに対する提案 SA パラメータの効果を評価した. 評価に用いたイジングモデルのシステムスピンの数は $L = 10, 20, 30, 40, 50$ に設定した. 係数および SA パラメータは上記のとおりである. 図 3.16 は, 異なるインスタンスのエネルギー密度を比較している. 図 3.16(a) および 3.16(c) は, 元の SA パラメータを用いて元のイジングモデルと BWR イジングモデルを SA した際の計算終了後のエネルギー密度を比較している. すべての点是对角線の上にプロットされており, 元の SA パラメータを使用する場合, BWR イジングモデルが元のイジングモデルに比べて解の精度が劣ることを示している. 図 3.16(b) および 3.16(d) は, 元の SA パラメータで元のイジングモデルを, 提案 SA パラメータで BWR イジングモデルを SA した際の計算終了時のエネルギー密度を比較している. すべての点是对角線の下またはその上にプロットされており, 提案 SA パラメータを使用する場合, BWR イジングモデルを用いて得られる解は元のイジング

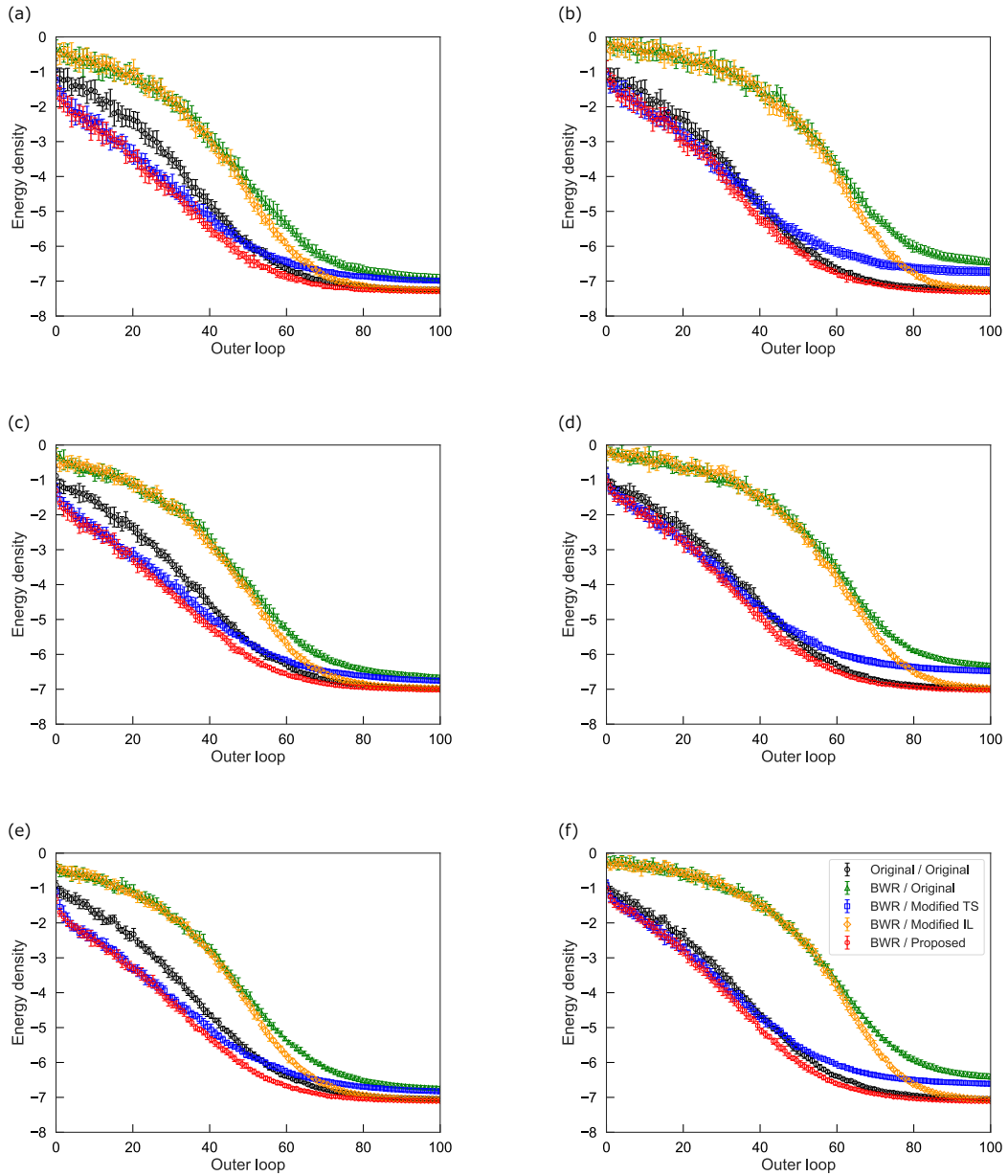


図 3.15: ランダムイジングモデルにおける元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程の比較. $L = 30$ における (a)3 ビット幅と (b)2 ビット幅削減, $L = 40$ における (c)3 ビット幅と (d)2 ビット幅削減, $L = 50$ における (e)3 ビット幅と (f)2 ビット幅削減を示す. 黒い丸は元のイジングモデルを示し, 緑の三角形, 青い四角形, オレンジのダイヤモンド, および赤い六角形はそれぞれ, 元の SA パラメータ, 温度スケジュールの修正のみ, インナーループの修正のみ, および提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルの動的過程を示す. 各プロットは 10 回の実行の平均であり, エラーバーは標準偏差である. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875].Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka. 見やすさのため図の大きさを一部改変.

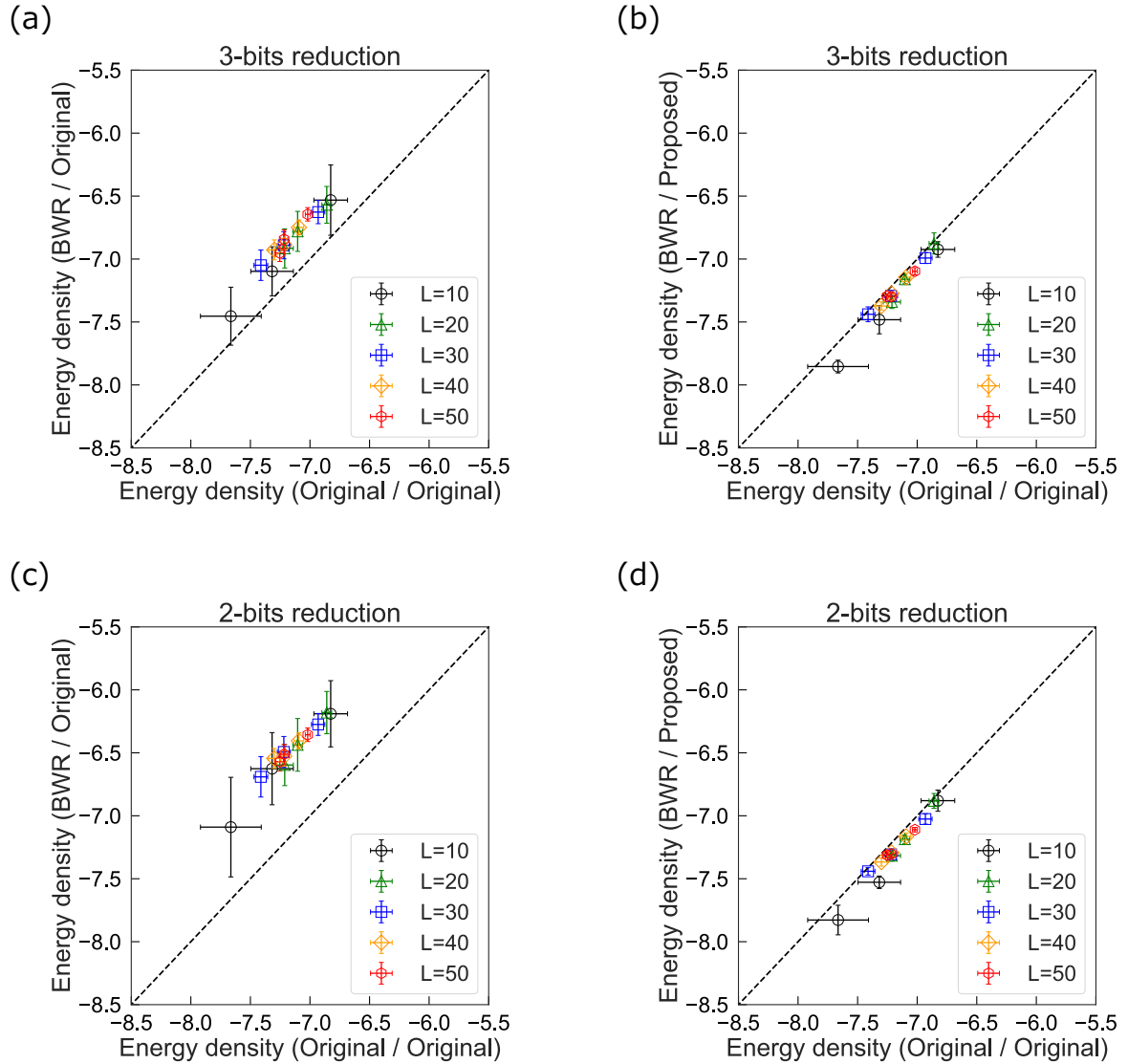


図 3.16: 複数のイジングモデルの SA 終了時のエネルギー密度の比較. ビット幅が (a)3 ビットまたは (c)2 ビットに削減されたときの元の SA パラメータを用いた元のイジングモデルと BWR イジングモデルのエネルギー密度の比較、またはビット幅が (b)3 ビットまたは (d)2 ビットに削減されたときの提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルと元の SA パラメータを用いた元のイジングモデルのエネルギー密度の比較である. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875].Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

モデルを用いて得られる解と同等またはそれ以上であることを示している. これらの結果は, 少なくともこの研究で検討した範囲でいずれのイジングモデルにおいても同様の結果を示している. これらの結果は, 提案 SA パラメータが正方格子システムのスピンスイズに対してロバスト性を持っていることを示唆している.

3.7 考察

提案 SA パラメータによる BWR イジングモデルの動的過程は、3 ビットに削減された際、元のイジングモデルと同程度であったが、アウターループの初期の繰り返しの段階では異なっていた (図 3.15)。この差は、SA パラメータを修正するための基準として使用される係数に起因していると考えられる。3.6 節では、提案 SA パラメータへ変換するために元のイジングモデルの係数の最大絶対値を基準として使用した。しかし、係数の最大絶対値 7 に基づく温度スケジュールと他の係数 (すなわち、 $|J|, |h| = 6$ から 4) に基づく温度スケジュールとの間には、各アウターループで温度に差がある (図 3.11)。特に、アウターループの繰り返しの初期段階において、係数の最大絶対値 $|7|$ に基づく温度スケジュールにおいては、他の係数に基づく温度スケジュールよりも低い温度を示す。また、3.6 節で使用されたイジングモデルの係数は一様にランダムに生成したため、多くの係数の絶対値は $|7|$ ではない。したがって、一定の割合を占める $|J|, |h| = 6$ から 4 の係数にとっては、提案 SA 温度スケジュールの温度は過度に低く設定されている。結果として、BWR イジングモデルの動的過程はアウターループの繰り返しの初期段階で元のイジングモデルと異なると考えられる。

提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルの解の精度は、元のイジングモデルの解よりもわずかに優れている (図 3.16(b) および 3.16(c))。こちらでも、SA パラメータを修正するための基準として使用される係数に起因している。低温における有効緩和時間 τ_{eff} は、他の係数に基づくものよりも係数の最大絶対値 $|7|$ に基づくものの方が大きい (図 3.12)。また、温度スケジュールは、他の係数に基づくものより、係数の最大絶対値 $|7|$ に基づくものの方がより低温から徐々に低下する (図 3.11)。そのため、 $|7|$ 以外の係数にとっては、過度に提案 SA パラメータの影響が及ぼされるため、多くの係数に対して、各温度で熱平衡に達する確率が高く、解の精度が向上していると考えられる。また、元の温度スケジュールがエネルギーの低い解を得られないスケジュールになっていたことも要因の一つである。

3.8 本章のまとめ

ビット幅制限を緩和する補助スピン追加手法が知られていたが、同じアルゴリズムで解く検討は行っていなかった。そこで、同じパラメータを用いた SA を元のイジングモデルと BWR イジングモデルに対して実施した。その結果、得られる解が異なることが示され、その理由が解を得るための動的過程が二つのイジングモデルで異なることにありと示唆された。そこで、ビット幅削減前後で動的過程が異なる理由を、統計力学の観点から分析した。分析した結果、補助スピンの追加を伴う BWR イジングモデルには、元のイジングモデルには存在しない二つの特徴的な性質、すなわち有効温度とエントロピー緩和遅延があることを明らかにした。そこで、分析結果をもとに BWR イジングモデルの動的過程が元のイジングモデルのものと一致するような SA パラメータを提案した。提案 SA パラメータの効果を評価した結果、BWR イジングモデルと元のイジングモデルの動的過程が近づくことが示された。ビット幅制限のあるイジングマシンでイジングモデルを効果的に解くために、補助スピン追加手法と提案 SA パラメータが有効に活用されることが期待される。

第 4 章

イジングマシンの特徴を活かしたハイブリッド最適化手法

本章ではイジングマシンに入力可能な問題サイズ制限を緩和する手法について示す．まず，4.1 節では，量子アニーリングマシンに入力不可能な大規模問題を量子アニーリングマシンで解くために検討されてきた手法について説明する．次に，4.2 節で，本研究で提案する非量子イジングマシンと量子アニーリングマシンの長所を活かしたハイブリッド最適化手法について説明する．4.3 節では，ハイブリッド最適化手法の性能を評価するために利用した，量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を，非量子イジングマシンとして SA を用いたシミュレーションの条件について説明する．その後，4.4 節で D-Wave Advantage に入力可能なイジングモデルに対する性能評価とパラメータ依存性の検証を行った．また，4.5 節で D-Wave Advantage に入力不可能なイジングモデルに対する性能評価と，前処理精度及びサブイジングモデルサイズ依存性の検証を行った．SA と D-Wave Advantage を用いたハイブリッド最適化手法の評価結果とパラメータ依存性検証から，サブイジングモデルサイズ依存性が解精度において重要な役割を果たす可能性が見出された．そこで，4.6 節でマスター方程式を用いた SA およびシュレディンガー方程式を用いた QA による考察を行った．最後に，4.7 節でまとめと今後の展望について記載した．

4.1 大規模問題緩和手法の先行研究

2.5 節に記載した通り，イジングマシンの中でも量子アニーリングマシンである D-Wave マシンは入力可能な問題サイズが小さく，ハードウェア上の制限を超える大規模な問題をそのまま取り扱うことができない．この課題を解決するために，2.3.3 項に記載のように，量子アニーリングマシンに入力可能なサイズまで問題を削減した後に，量子アニーリングマシンで問題サイズ削減後のサブ問題を解くという方法が提案されてきた．本節では変数固定により問題サイズ削減を行う手法について検討した先行研究を紹介する．

まず，D-Wave Systems 社が提案した qbsolv と呼ばれる手法である [98]．qbsolv は，タブーサーチというメタヒューリスティクスによって元の問題の一時的な解を探索し，その後 impact 値という指標で問題サイズの小さいサブ問題を生成するというアルゴリズムである．impact 値は，一時的な解において，ある変数を反転させた前後のエネルギーの差を表す． i 番目のスピンの impact 値を e_i とすると，式 (2.29) を用いて次のように表される．

$$e_i = |\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}(\sigma_i) - \mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}(-\sigma_i)|. \quad (4.1)$$

ここで、 $\mathcal{H}_{\text{sub-Ising model}}(\sigma_i)$ は、 σ_i のみを値が可変なスピンとしたサブイジングモデルのハミルトニアンである。この impact 値が大きいほど、その変数の一時的な解における状態がよりエネルギーの低い状態と一致していると推測できる。qbsolv では、impact 値が小さい方からサブイジングモデルとして入力可能な数のスピン n をサブイジングモデルのスピンとして取得し、残りのスピンは一時的な解の値に固定する。そして、生成したサブ問題を量子アニーリングマシンで解く。サブ問題を解くことによって一時的な解よりもエネルギーの低い解が得られた場合は、一時的な解から新しい解へ更新し、その更新した解をもとに再度タブーサーチを行い、最適解を探索する。そして、解が一定回数更新されなくなった場合に計算を終了する。

次に、古典力学に基づくシミュレーション法である分子動力学法を用いて変数固定をする手法も提案されている [104]。Hybrid quantum annealing (HQA) と呼ばれるこの手法では、D-Wave 2000Q に入力不可能な大規模問題をまず分子動力学法を用いて解く。その後、一定の基準で変数を固定し、D-Wave 2000Q に入力可能なサイズのサブイジングモデルを生成する。先行研究では、MAX-CUT 問題とランダムイジングスピンガラスの基底状態探索問題に対して、HQA の性能を評価した。

また、“sample persistence” というアプローチで変数固定をし、サブ問題を生成する方法も提案されている [99, 100]。この手法は、sample persistence variable reduction (SPVAR) アルゴリズムと呼ばれている [99]。SPVAR アルゴリズムについて図 4.1 に示す。SPVAR アルゴリズムでは、まず最適化手法を用いて、元の問題を複数回解き、複数個の状態の解を取得する。Sample persistence では、独立して取得された解の間で同じ値を持つ変数が持続的に固定されるスピンの候補であると仮定し、残りのスピンは解くことが難しいスピンのグループと考える。そのため、複数の解で一致するスピンを固定し、それ以外のスピンをサブ問題の変数とする。この手法では、複数の解でどの程度一致したときに変数を固定するかを定めた *fixing_threshold* というパラメータや、複数の解のうちどの程度エネルギーが低い解をサブ問題生成に利用するかを定めた *elite_threshold* というパラメータを用いて解精度の検証を行っている。先行研究では、元の問題とサブ問題は同じメタヒューリスティクス手法やソルバーを用いており、D-Wave 2X や D-Wave 2000Q, SA, SQA, PT が用いられている。

さらに、変数固定したサブ問題を D-Wave マシンで解く手法を繰り返し実行する手法が提案された [105]。固定する変数の選択方法は次に示すように、sample persistence の考え方を活用している。この先行研究では QUBO 形式の組合せ最適化問題を対象としている。固定するバイナリ変数 x_i を選択するためにまず、 N_S 個の元の問題の解が取得されている状態を考える。それらの N_S 個の解に対して r_i を求める。その r_i の値は、以下のように与えられる。

$$r_i = \left| \sum_{k=1}^{N_S} x_{i,k} - \frac{N_S}{2} \right|. \quad (4.2)$$

ここで、 $x_{i,k}$ は k 番目の解の i 番目のバイナリ変数である。もし N_S が偶数 (奇数) であるならば、 r_i の最小値は 0 (0.5) であり、 r_i の最小値を最も不安定なスピンとみなす。一方、 r_i の最大値は $N_S/2$ であり、 N_S 個の解のすべて変数が同じ向きを示しているため、安定なスピンとみなす。本手法では、より不安定な変数を取得するため r_i が小さい順に、設定されたサブ QUBO のバイナリ変数の個数 m だけ固定しない変数を選択する。残りの固定する変数の値は、 N_S 個の解の中からランダムに選ばれた一つの解の変数の値とし、式 (2.29) のようにサブ QUBO を作成する。本先行研究で提案されたアルゴリズムは次の通りである。

ステップ 1: タブーサーチを用いて N_I 個の解を取得し、解プールを形成する。

ステップ 2: 解プールから N_S 個の解をランダムに選択する。選択された N_S 個の解を用いて、任意の変数における r_i を計算する。本手法では、より不安定な変数を取得するため r_i が小さい順に、設定されたサ

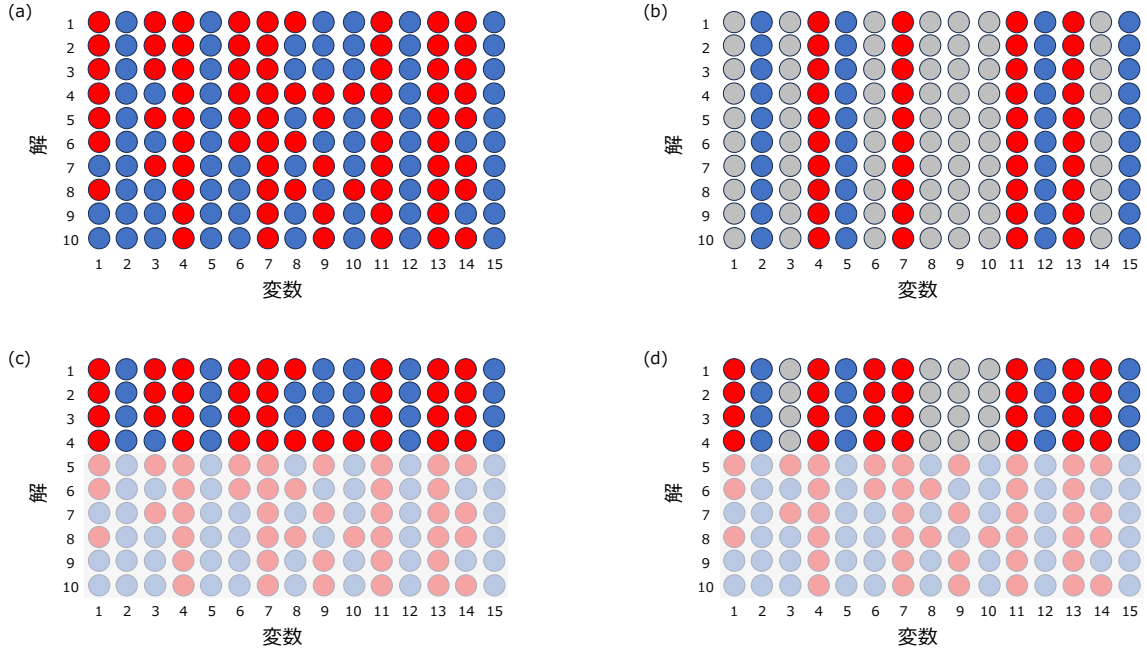


図 4.1: SPVAR アルゴリズムの例. 青, 赤, 灰色の円はそれぞれ -1 , $+1$ を示す変数, サブ問題の変数を示す. (a) サンプリングされた 15 個の変数を持つ問題に対する 10 個の解をエネルギーが低い順に上から配置している. (b) 10 個の解すべてで値が一致する変数を, 一致した値で固定し, それ以外の変数をサブ問題の変数とする. (c) $elite_threshold$ が 0.4 となっており, 10 個の解のうち, エネルギーの低い 40% が選択されている. (d) エネルギーの低い 40% の中で一致した変数を固定し, それ以外の変数をサブ問題の変数とする.

ブ QUBO の変数の個数 m だけ固定しない変数を選択する. 残りの固定する変数の値は, N_S 個の解の中からランダムに選ばれた一つの解の変数の値とし, サブ QUBO を作成する.

ステップ 3: 量子アニーリングマシンを用いてサブ QUBO の最適解を探索する.

ステップ 4: ステップ 2 とステップ 3 を N_E 回繰り返し, 得られた解を解プールに追加する.

ステップ 5: ステップ 4 で形成された解プールの中でエネルギーの低い順に N_I 個の解を選択し, 新たな解プールを形成する. 新たな解プールの中で最もエネルギーの低い解を X_{best} とする.

ステップ 6: 解プールに含まれる解が収束するまでステップ 1 からステップ 5 までを繰り返す. 収束条件は, 解プールに含まれる解の平均ハミング距離がサブ QUBO の変数の個数 m を下回ることにする. 最終的な X_{best} が提案手法によって得られた解となる.

本先行研究では, 二次割当問題を対象に性能を評価している. 従来の二つの変数固定手法 (サブ問題の変数をランダムに設定するランダム手法と qbsolv [98]) の間で精度を比較したところ, 提案手法は高精度の解を得られることが確認された.

このように, 量子アニーリングマシンの問題サイズ制限を解消するための手法がいくつか提案され, 性能が評価されている. しかし, 変数固定手法の前処理や, 変数固定方法, 繰り返しといったステップの重要性に関する議論は少ない. また, 前処理段階において非量子イジングマシンを使用して量子アニーリングマシンの性能を向上させるハイブリッド最適化手法を明確に調査した研究は報告されていない. 非量子イジングマシンの一部は, 図 1.2(b) のイジングマシン 1 のように, トポロジー制限と問題サイズ制限が弱く, 多くの変数を入

力可能である高集積性という特徴がある．そこで本研究では、非量子イジングマシンの高集積性と量子アニーリングマシンの高速性という利点を組み合わせたハイブリッド最適化手法を構築し、性能を評価した．また、前処理、変数固定法、繰り返しといった各ステップの影響について、ハイブリッド最適化手法におけるさまざまなパラメータの依存性を評価することで分析を行った．さらに、ハイブリッド最適化手法のサブイジングモデルサイズ依存性の解析とハイブリッド最適化手法の性能向上に向けた考察を行った．

4.2 ハイブリッド最適化手法

本節では先行研究 [105] で提案された手法を参照し、構築したハイブリッド最適化手法を詳しく説明する．ハイブリッド最適化手法のアルゴリズムは次の通りである．

- ステップ 1:** 非量子イジングマシンを用いて N_I 個の解を取得し、解プールを形成する．非量子イジングマシンは確率的な振る舞いを示すため、異なるスピン状態の解が得られる可能性がある．また、解プールには重複した解が含まれる場合がある．このステップで、解プールの中で最もエネルギーが低い解を一時的に最良の解 X_{best} として選択する．
- ステップ 2:** 解プールから N_S 個の解をランダムに選択する．選択された N_S には重複した解が含まれる可能性がある．選択された N_S 個の解を用いて、任意のスピンにおける d_i を計算する． d_i については後述する． d_i が小さい順に設定されたサブイジングモデルのスピン個数 m だけ固定しないスピンを選択する．残りの固定するスピンの値は、 N_S 個の解の中からランダムに選ばれた一つの解のスピン値とし、サブイジングモデルを作成する．
- ステップ 3:** 量子アニーリングマシンを用いてサブイジングモデルの最適解を探索する．
- ステップ 4:** ステップ 2 とステップ 3 を N_E 回繰り返し、得られた解を解プールに追加する．
- ステップ 5:** ステップ 4 で形成された解プールの中でエネルギーの低い順に N_I 個の解を選択し、新たな解プールを形成する．新たな解プールの中で最もエネルギーの低い解を X_{best} とする．
- ステップ 6:** 解プールに含まれる解が収束するまでステップ 2 からステップ 5 までを繰り返す．繰り返しは、 X_{best} が N_L 回連続して同じ状態となるまで継続する．最終的な X_{best} がハイブリッド最適化手法によって得られた解となる．

ステップ 2 で述べた、固定スピンを選択するために計算する d_i は、次のように与えられる．

$$d_i = \left| \sum_{k=1}^{N_S} \sigma_{i,k} \right|. \quad (4.3)$$

ここで、 $\sigma_{i,k}$ は k 番目の解の i 番目のスピンである．もし N_S が偶数 (奇数) であるならば、 d_i の最小値は $0(1)$ であり、 d_i の最小値は最も不安定なスピンとみなす．一方、 d_i の最大値は N_S であり、安定なスピンとみなす．本手法では、より不安定なスピンを取得するために、最も小さい d_i の順にサブイジングモデルの m 個のスピンを選択する．

また、ステップ 1 を Sampling step、ステップ 2 を Conversion step、ステップ 3 を Execution step、ステップ 4 とステップ 5 を Evaluation step と呼ぶ．また、Evaluation step から解プールの作成に戻ることをループと呼び、図 4.2 は、ハイブリッド最適化手法を 4 つのステップで構成したフローを示している．

ここで、ハイブリッド最適化手法と先行研究 [105] の相違点について示す．大きな相違点は次の 3 点である．1 点目は、変数固定法である．先行研究で提示されたアルゴリズムは、変数の値が 0 または 1 のいずれか

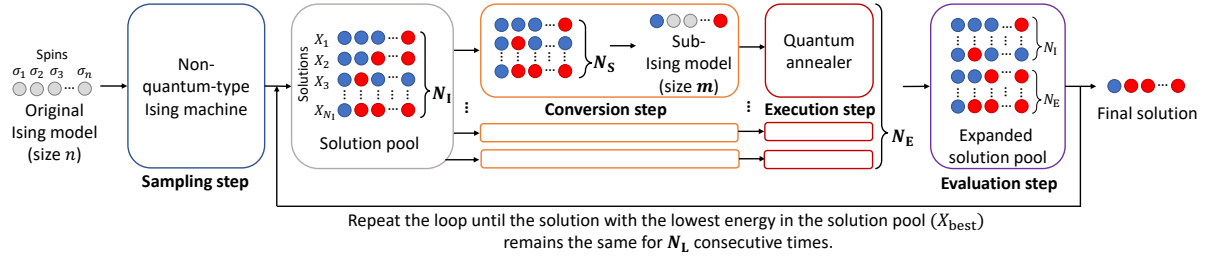


図 4.2: ハイブリッド最適化手法のフロー. 灰色, 青, 赤の実線の色はスピンの決定していない値, -1 , $+1$ を示す. 黒の矢印は流れを示す. サブイジングモデルのサイズ (m), N_I , N_S , N_E , N_L はハイブリッド最適化手法のパラメータである. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

を取る QUBO を対象としている. 一方, 本研究ではイジングモデルに適した固定スピン決定アルゴリズムを開発したため, 変数固定のアプローチを変更している. そのため, 固定する変数を選択する手段が異なっている. 2 点目は, ループの開始部分である. 先行研究では, Evaluation step の後, 新しく得られた解プールに含まれる解をもとにタブーサーチを実施していた. しかし本研究では, 非量子イジングマシンを用いて解プールを取得することを想定している. 非量子イジングマシンの内部アルゴリズムの基本となっている SA においては, 多くの場合設定される条件では初期温度が十分高いため解プールに含まれる解の状態に影響されることがなく解を得ることが可能となってしまう. したがって, 先行研究のアルゴリズムと同じループの開始場所にして, 非量子イジングマシンで解を得た場合, 解プールの解の情報は失われてしまう. そのため, 本研究ではループ開始場所を Sampling step の後に設定するように調整した. 相違点の 3 点目は, 終了条件である. 先行研究では, 終了条件を解プール内の解の平均ハミング距離がサブ問題サイズ以下になったときに設定していた. 本研究では, この終了条件の変更がハイブリッド最適化手法の解精度にどのような影響を与えるかを調査する. そこで, パラメータの効果を明確にするために, X_{best} が N_L 回連続で変化しない場合を終了条件として設定した.

4.3 シミュレーションの設定

本研究では, ハイブリッド最適化手法の効果を示すために, 完全グラフとして構築される全結合ランダムイジングモデルを使用した. 全結合イジングモデルを選択した理由は, 完全グラフ上でスピンの固定された場合, すべてのサブイジングモデルのスピンの均一な辺密度を示すからである. 他のイジングモデルでは, 固定するスピンによってサブイジングモデルのグラフ構造が異なる. D-Wave Advantage が持つトポロジーの問題から, 入力するイジングモデルのグラフ構造が異なると, トポロジーを考慮した評価が必要になり, ハイブリッド最適化手法の性能を一貫して評価するのが難しくなるため, 全結合イジングモデルを採用した.

また, イジングモデルの局所磁場の係数を $h_i \neq 0$ とした. もし局所磁場の係数が $h_i = 0$ の場合, イジングモデルはすべての状態に対して二重の縮退を示す. その時, 解プールに含まれる解の中で一致しているスピンを固定するハイブリッド最適化手法では, サブイジングモデルの生成が困難となる. 縮退への対策として, 先行研究 [99, 100] ではランダムに選ばれたスピンを -1 または $+1$ のどちらかに設定することを提案している. しかし, 本研究では局所磁場の係数を $h_i \neq 0$ とすることで, 自明な縮退を取り除いた. 局所磁場と相互作用の係数は, 平均が 0 で標準偏差が 1 のガウス分布に従ってランダムに選んだ. この時, 相互作用と局所磁場の

両方で 0 は除外した。

本研究では、非量子イジングマシンとして SA、量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を使用してシミュレーションを行った。ほとんどの非量子イジングマシンは、その内部アルゴリズムの基礎として SA を採用している [14, 15, 19, 30]。SA では、初期状態をランダムに設定し、初期温度 T_{initial} は $\lceil 2v_{\text{max}} \rceil$ とした。ここで、 v_{max} は $v_i = \left| h_i + \sum_{(i,j) \in E} J_{i,j} \right|$ によって定義される v_i の中での最大値であり、これは元のイジングモデルの i 番目のスピンの磁場と相互作用の合計の絶対値である。ここで、 E は無向グラフ G における無向辺集合である。温度スケジュールは、 $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ で与えられる冪関数による減衰と設定した。アウターループはシミュレーション毎に設定された。減衰率は、最終温度が元のイジングモデルのエネルギースケール上で十分に低い 0.1 と等しくなるように設定した。インナーループは、元のイジングモデルのサイズである 160 に設定した。

D-Wave Advantage を使用する場合、100 回計算した中での最良解を選択した。D-Wave Advantage の他のパラメータはデフォルト値 [28] に設定した。すなわち、アニーリング時間は $20 \mu\text{s}$ に設定され、イジングモデルの係数は局所磁場が範囲 $[-2, 2]$ 、相互作用が範囲 $[-1, 1]$ になるようにリスケールされる。

4.4 D-Wave Advantage に入力可能な問題サイズに対する評価

本節では、D-Wave Advantage に入力可能な問題サイズのイジングモデルに対する性能の評価を実施する。

D-Wave Advantage の性能を比較するために、元のイジングモデルのスピンの数は、D-Wave Advantage に埋め込むことができる最大数に設定した。本研究で使用された D-Wave Advantage には 5,627 個の量子ビットとペガサスグラフのトポロジーがあり、マイナー埋め込みを使用することにより、理想的には 177 スピンの完全グラフを埋め込むことが可能である [36]。しかし、いくつかの量子ビットは欠陥のため使用できない。異なる問題サイズのイジングモデルを D-Wave Advantage を用いて複数回計算した結果、安定して入力でき計算可能なサイズとして 160 スピンが元のイジングモデルのサイズとして適切であると、設定した。

ハイブリッド最適化手法の性能を評価のために、まず複数のオリジナルイジングモデル（イジングモデル A, B, C, D）を対象とした。表 4.1 は、ハイブリッド最適化手法のアウターループ、サブイジングモデルのサイズ (m)、 N_I , N_S , N_E , および N_L のパラメータをまとめたものである。D-Wave Advantage および前処理 SA 単体の結果は、解精度の比較のために用意した。D-Wave Advantage のパラメータはハイブリッド最適化手法の一部として使用される場合も、独立して使用される場合においても、一貫して 4.3 節で説明した条件を使用した。図 4.3 は、D-Wave Advantage (DW), 前処理 SA (SA), およびハイブリッド最適化手法 (HM) によって得られた解のエネルギー密度を示している。SA のデータは、各解プールから得られた X_{best} を前処理として使用し、エネルギー密度はスピン当たりの内部エネルギー（すなわち、 H/n ）である。図 4.3 には、ハイブリッド最適化手法終了までに費やされたループの数も示している。ループの数は、Evaluation step から解プールの作成に戻る回数を表す。例として、 $N_L = 3$ で X_{best} が全く更新されなかった場合ループの数は 2 となる。これらのデータは、10 回のシミュレーションの平均と標準偏差から得られる。図 4.3 より、ハイブリッド最適化手法は DW または SA のいずれよりも高い解精度を示した。

次に、図 4.3 のイジングモデル A を対象に、ハイブリッド最適化手法におけるパラメータ依存性を評価した。まず、前処理の解精度依存性を評価した。前処理の解精度依存性について検討した理由は、実際にイジングモデルを解く際に特定の問題に適切な SA パラメータを設定するのが難しく、SA の精度が保証されていないためである [11, 12, 148]。本実験では四つの異なる前処理を使用した。すなわち、ランダムスピン状態 (Random), アウターループを 10, 50, または 100 に設定した SA である。ハイブリッド最適化法のパラメー

表 4.1: SA およびハイブリッド最適化手法のパラメータ. N_I は Sampling step で取得される解の数, N_S は Conversion step でサブイジングモデルを生成するための元のイジングモデルの解の数, N_E は Conversion step と Execution step の繰り返しの通じて新たに得られる解の数, N_L はハイブリッド最適化手法を終了するための同じ X_{best} の繰り返しの数である. これらのパラメータは 4.2 節および図 4.2 で説明されている.

最適化方法	パラメータ	値
SA	アウターループ	10
	サブイジングモデル サイズ (m)	80
ハイブリッド最適化 方法	N_I	20
	N_S	10
	N_E	20
	N_L	3

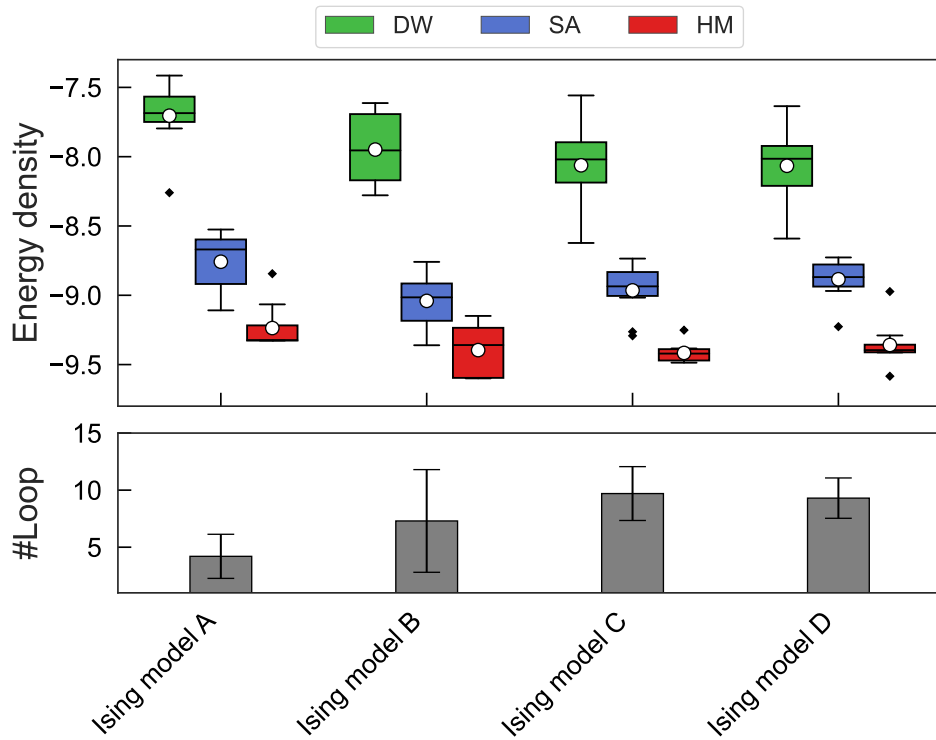


図 4.3: (上部) 複数のオリジナルイジングモデルでの異なるソルバーによるエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均である. 上部および下部のバーはそれぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 黒いダイヤモンドは外れ値を示す. (下部) ハイブリッド最適化手法によるループの数. エラーバーは 10 回のシミュレーションでの標準偏差である. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

タは、表 4.1 に記載されているものと同じである。図 4.4 は、異なる前処理でのエネルギー密度とループ数を示している。この結果より、前処理の解精度に関係なくハイブリッド最適化手法は前処理の解から改善されることが示された。また、非常に低い解精度（例：Random）の前処理に対してもハイブリッド最適化手法によって解精度が向上した。ただし、前処理の解精度が低い場合、解を改善するためにはより多くのループ数が必要であることが分かった。一方、解精度が高いアウターループが 100 の場合では、SA と HM はほぼ同じエネルギー密度を示した。これは、10 回シミュレーションを実施したうちのいくつかにおいて、SA の精度が高く、元のイジングモデルの最適解に近い値が出たためであると考えられる。

また、図 4.4 の結果と SA およびハイブリッド手法の結果から、計算時間を評価した。基準となる解（基準解）をある確率で得るために必要な計算時間を求める評価指標は time-to-target (TTT) と呼ばれ、イジングマシンやアルゴリズムの評価に使用される [5, 46, 149–152]。TTT は次のように求められる。まず、あるアルゴリズムによって基準解を得る確率を p_s とする。 R 回求解を繰り返したとき、すべてで基準解が得られない確率は、 $(1 - p_s)^R$ となる。そのため、少なくとも 1 回基準解を得る確率 p_d は次のようになる。

$$p_d = 1 - (1 - p_s)^R. \quad (4.4)$$

これを R について解くと、

$$R = \frac{\ln(1 - p_d)}{\ln(1 - p_s)}, \quad (4.5)$$

となる。 p_s と p_d が与えられたとき、この R 回求解することで、少なくとも 1 回は基準解が得られる。この回数 R にアルゴリズムの計算時間をかけることで、TTT が求められる。図 4.4 の結果をもとに TTT を計算するため、SA およびハイブリッド最適化手法によって得られた解の中で、最もエネルギーが低く、複数のシミュレーション条件においても得られた解を基準解として、 p_s を設定した。前処理がランダム、または SA のアウターループが 10, 50, 100 の際のハイブリッド最適化手法による p_s は、それぞれ 0.2, 0.5, 0.6, 0.3 であった（図 4.4）。前処理単体の p_s は、1000 回シミュレーションを行うことで求めた。アウターループが 50 と 100 の SA における p_s は、0.001 と 0.016 となった。ランダムに初期解を得る条件とアウターループが 10 の条件では基準解を得ることはできなかった。計算時間算出には CPU が Intel Core i7 (2.3 GHz)、メモリが 32 GB の計算機を用いた。ランダムに初期解を得る動作や SA、解プール作成、Conversion step、Evaluation step の計算時間は 10 回計算した結果の平均値とした。また、Execution step は 20 回計算した結果の平均値とした。計算時間を測定した結果、ランダムに初期解を得る方法と、アウターループが 10, 50, 100 の条件の SA の計算時間の平均は、それぞれ 0.78, 1.2, 1.7, 2.6 秒となった。Conversion step と Evaluation step、Execution step の計算時間は平均で、それぞれ 0.13, 0.022, 1.0 秒となった。Execution step における D-Wave Advantage のアニーリング時間は $20 \mu s$ であり、100 回計算した中の最適解を選択しているため、想定される計算時間は 2 ms である。しかし、インターネット接続による遅延、問題の初期化時間、計算結果の呼び出し時間など計算以外の時間がかかる [153] ため 1.0 秒となったと言える。これらの計算時間と、図 4.4 のループ数の平均値を用いることで、ハイブリッド最適化手法の計算時間を算出した。SA とハイブリッド最適化手法の計算時間と p_s が与えられたため、90% の確率で基準解を得る ($p_d = 90$) までの TTT を算出した結果、アウターループが 50 と 100 の SA の TTT は 4000 秒と 360 秒、前処理がランダムおよびアウターループが 10, 50, 100 の SA のときのハイブリッド最適化手法の TTT は、それぞれ 920, 270, 150, 410 秒であった。この結果から、アウターループを 100 にして計算時間の長い SA 単体で解を得るよりも、アウターループを少なくして計算時間の短い SA で前処理をしたのち、D-Wave Advantage で解を繰り返し得るというハイブリッド最適化手法で解を得た方が基準解を得るまでの時間が短くなることが示された。

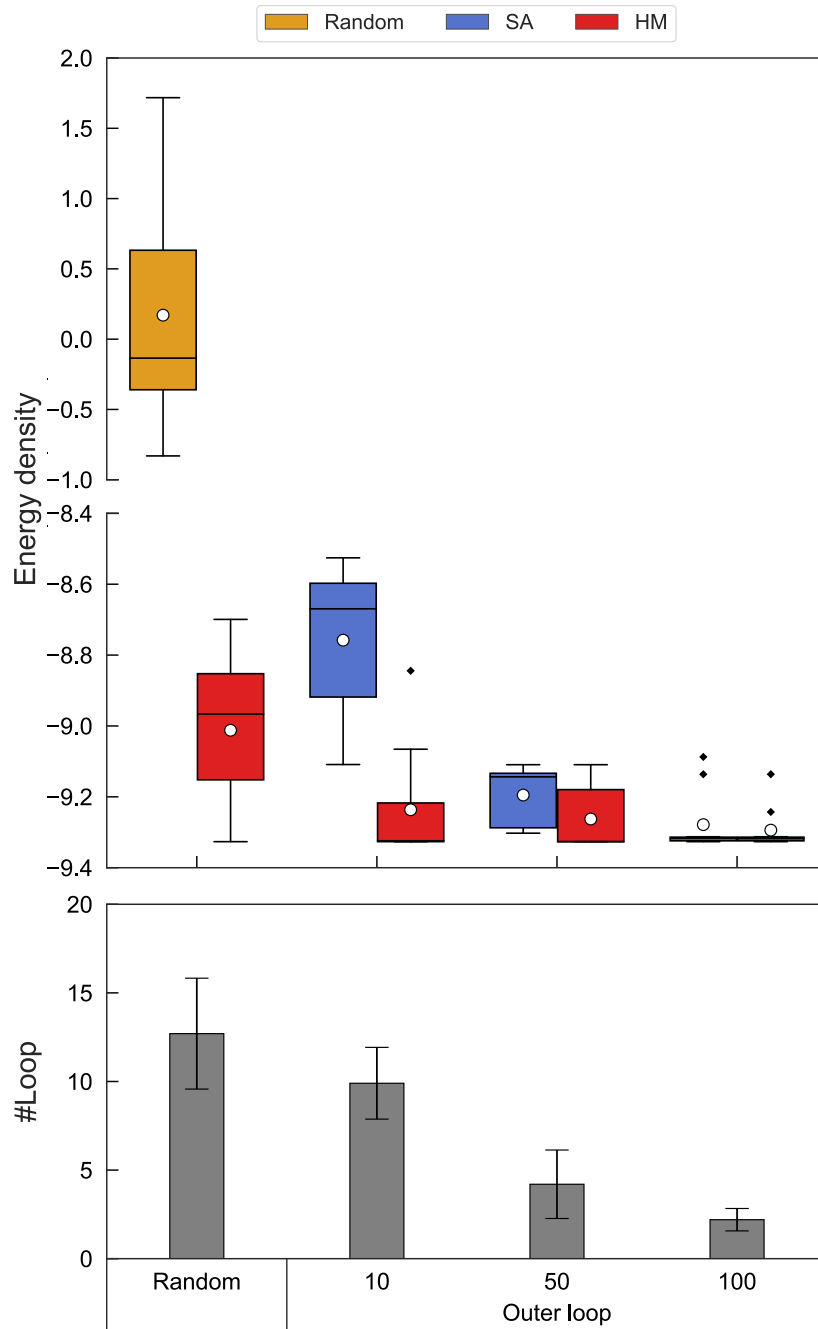


図 4.4: 異なる解精度を持つ前処理におけるハイブリッド最適化手法の性能. (上部) 前処理とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均である. 上部および下部のバーはそれぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 黒い菱形は外れ値を示す. エネルギー密度のスケールは省略された部分の上部と下部で異なる. (下部) ハイブリッド最適化手法によるループ数. エラーバーは 10 回のシミュレーションでの標準偏差である. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

次に、解精度へのパラメータの影響を評価するために異なるパラメータの組合せでハイブリッド最適化手法を実行した。図 4.5 は、 N_L を 1 から 5 に設定し、アウターループを 50 に設定した場合のエネルギー密度とループ数を示している。他のすべてのパラメータは表 4.1 に記載のものと同じである。前処理 SA によって得られた解プールのセットは N_L のすべての条件に対して同じである。さらに図 4.5 は、ハイブリッド最適化手法の 10 回のシミュレーションの中で前処理 SA の X_{best} が改善された割合を示している。図 4.5 より、解は $N_L \geq 2$ の場合に改善が認められた。ただし、箱ひげ図のトップバーや外れ値に対応する、10 個の前処理 SA 結果のうち最も高いエネルギーの解は改善されなかった。これは、ハイブリッド最適化手法によって改善されない、前処理によって得られた解ループが存在することを示唆している。 N_L が増加するにつれ、10 回のシミュレーションの中で前処理 SA の値から改善された解の割合とループ数の両方が増加した。ループ数が増加した理由として二つの理由が考えられる。一つ目の理由は、 N_L が単純に増加したために、ハイブリッド最適化手法を終了するために必要なループ数が必要だからである。二つ目の理由は、 N_L が増加することで解が改善するため、ループ数が増加するからである。

図 4.6 は、 N_E および N_S のいくつかのセットを持つエネルギー密度とループ数を示している。 N_S および N_E のすべての条件の前処理 SA によって得られた解プールのセットは同じであり、アウターループは 50 に設定されている。他のすべてのパラメータは、表 4.1 に記載されているものと同じである。図 4.6 より、 N_E が 5 の場合よりも 10 または 20 の場合に、ハイブリッド最適化手法は解をより良く改善した。これは、 N_E が増加することで、ループごとに生成される解の数が増えるため、一度のループ中に解の改善の可能性が高くなるためと考えられる。さらに、 N_E が同じ場合、 N_S の効果はそれほど顕著ではないことが示された。ループ数は、 N_E が 10 と 20 のとき増加したが、これはハイブリッド最適化手法によって解が改善されたためであると考えられる。

最後に、サブイジングモデルサイズ依存性を評価するために、異なるサブイジングモデルサイズでハイブリッド最適化手法を実行した。図 4.7 は、サブイジングモデルサイズ (m) が 16, 40, 80, 120, 144 のエネルギー密度とループ数を示している。前処理 SA によって得られた解プールのセットは、すべてのサブイジングモデルサイズに対して同じである。アウターループは 50 に設定した。他のすべてのパラメータは、表 4.1 で記載のものと同じである。元のイジングモデルサイズ ($n = 160$) に対して極端に小さいまたは大きなスピン数（例えば、サブイジングモデルサイズが 16 または 144）でサブイジングモデルを構築すると、ハイブリッド最適化手法による解の改善はあまり観察されなかった（図 4.7）。サブイジングモデルサイズが小さい場合、固定されたスピンの数が多く、サブイジングモデルによって得られる解の自由度は少なくなったと考えられる。対照的に、サブイジングモデルのサイズが大きい場合、D-Wave Advantage の解精度の影響がより顕著になったと考えられる。問題サイズが 160 の元のイジングモデルに対する D-Wave Advantage の解精度が低いという結果（図 4.3）から、サブイジングモデルサイズが増加すると、解精度が低下し、解は改善されないと考えられる。これらの結果はハイブリッド最適化手法の解精度がサブイジングモデルサイズに依存することを示唆している。

4.5 D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズに対する評価

前節では問題サイズを D-Wave Advantage に入力可能な 160 スピンを元のイジングモデルサイズとして、ハイブリッド最適化手法の性能を評価した。そこで本節では、D-Wave Advantage に入力不可能なスピン数を持つイジングモデルを使用した。D-Wave Advantage に入力不可能なスピン数として、240, 360, 480, 640 を選定した。イジングモデルは、一つのスピン数に対して一つ用意した。

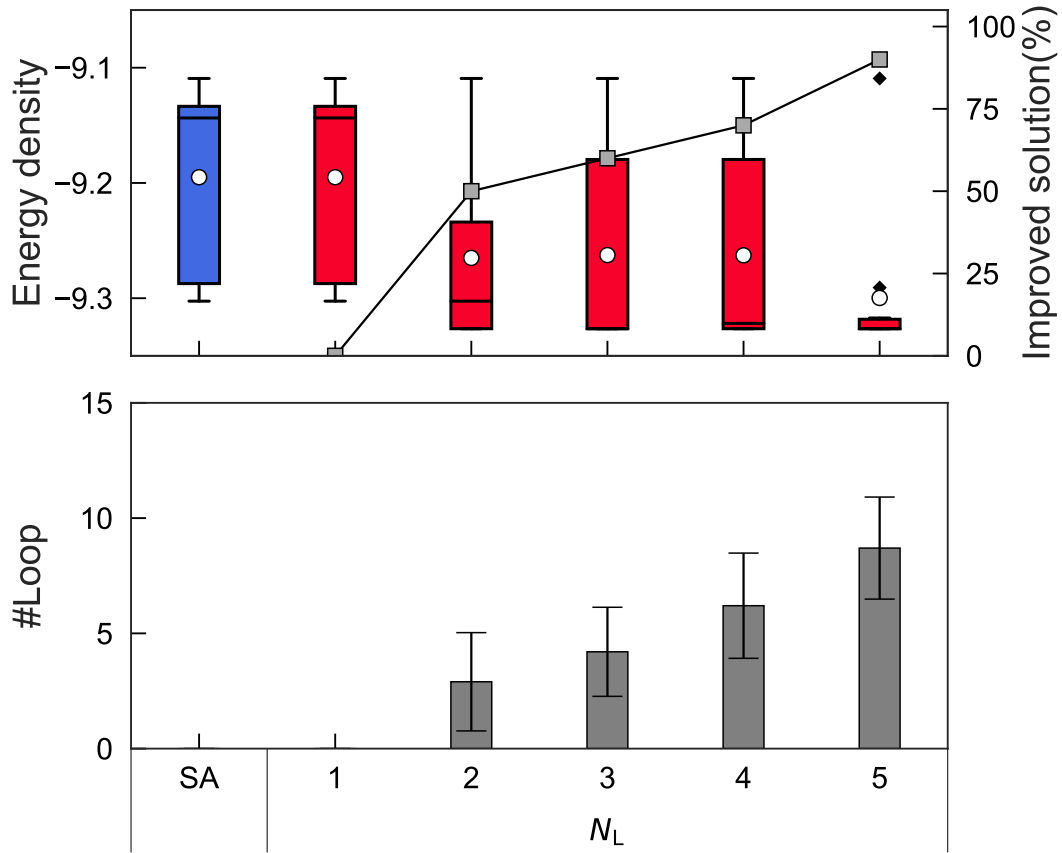


図 4.5: 異なる N_L を持つハイブリッド最適化手法の性能. (上部) 前処理 SA とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均である. 上部および下部のバーはそれぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 黒い菱形は外れ値を示す. 灰色の四角は, ハイブリッド最適化手法の 10 回のシミュレーションで前処理 SA から改善された解の割合を示す. (下部) ハイブリッド最適化手法によるループ数. エラーバーは 10 回のシミュレーションでの標準偏差である. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

性能評価のため, まず, D-Wave Advantage に入力不可能な問題にハイブリッド最適化手法を適用した際に, 前処理によって得られた解から解が改善されるか検証した. また, 同時に前処理の解精度依存性についても検証した. その理由は, 問題規模が大きくなることで実際の組合せ最適化問題を解く場合にパラメータ設定が困難となり, 前処理 SA による解精度にバラツキが出ると考えられるからである. 前処理の精度は, 4.4 節と同様に, アウターループを 10, 50, または 100 に設定することで調節している. ハイブリッド最適化手法のパラメータについては, 表 4.1 に記載の通りである. 初期温度は 4.4 節で記載の方法に倣って設定した. 具体的には, 問題サイズが 240, 360, 480, 640 の元のイジングモデルに対して, それぞれ, 82.0, 110.0, 152.0, 158.0 としている. 図 4.8 は, 前処理 SA とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度を示している. この結果から, D-Wave Advantage に入力不可能ないずれのサイズのイジングモデルであってもハイブリッド最適化手法によって解が改善されることが認められた. 一方, 前処理の解精度が高くなると, ハイブリッド最適化手法による解の改善はあまり見られなかった.

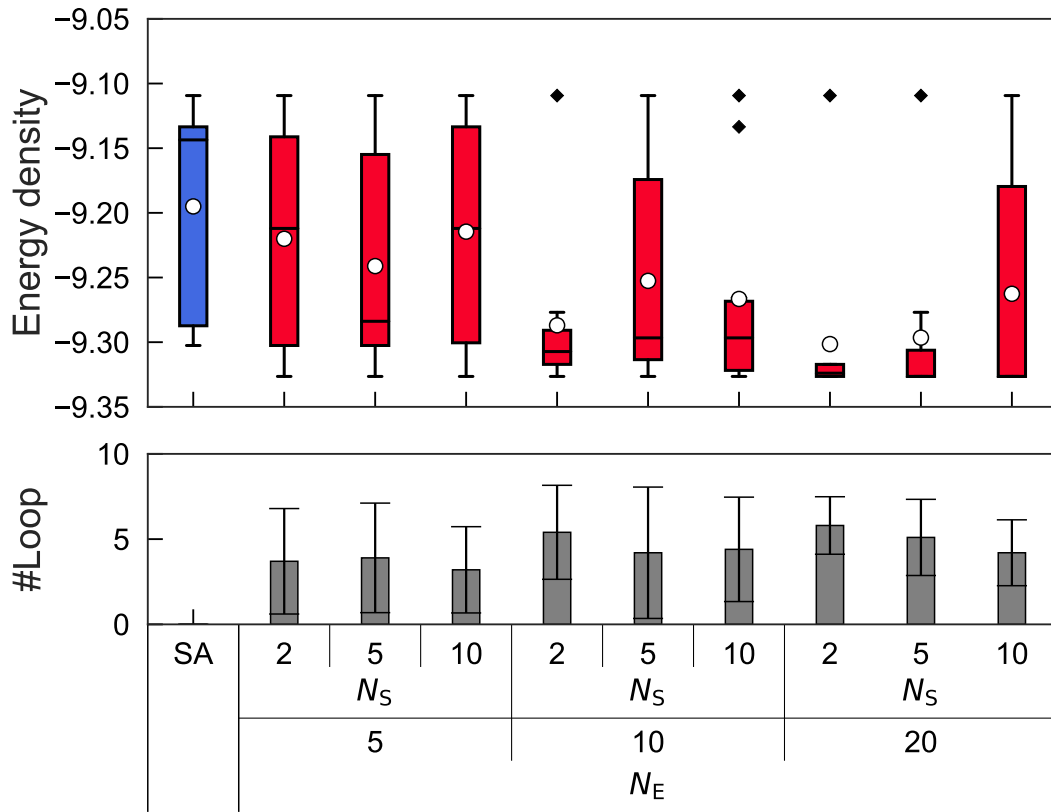


図 4.6: 異なる N_E および N_S のセットを持つハイブリッド最適化手法の性能評価. (上部) 前処理 SA とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均を示す. 上部および下部のバーは, それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 黒い菱形は外れ値を示す. (下部) ハイブリッド最適化手法によるループ数. エラーバーは標準偏差を示す. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

次に, サブイジングモデルサイズの依存性を評価した. D-Wave Advantage に入力可能な問題サイズの上限として 160 と設定しているため, 評価したサブイジングモデルサイズは 40, 80, 120, 160 である. 前処理 SA によって得られた解プールのセットは, すべてのサブイジングモデルサイズの条件において同じである. アウターループを 50 に設定し, 他のすべてのパラメータは, 表 4.1 に記載の通りに設定した. サブイジングモデルサイズを変更した際の前処理 SA とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度を図 4.9 に示した. 結果から, サブイジングモデルサイズが主に 80 または 120 のときに, 解の改善が認められた. 元のイジングモデルサイズが 160 のときは, サブイジングモデルサイズが 40 または 80 のときに主に解の改善が認められていた (図 4.7). 本節では, 元のイジングモデルサイズがより大きくなっており, 元のイジングモデルの解に影響を与えるためにはサブイジングモデルサイズがより大きい必要が出たと考えられる.

なお, D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズに対するハイブリッド最適化手法のその他のパラメータ依存性については, 付録 B に記載した.

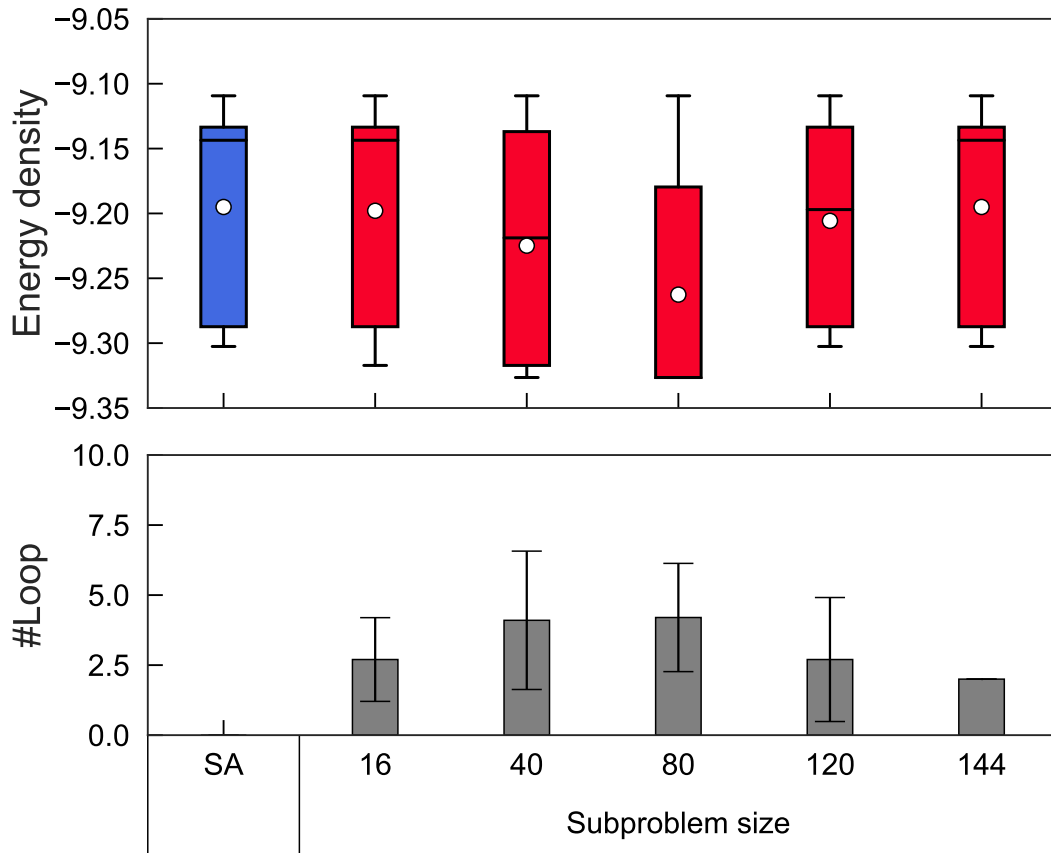


図 4.7: 異なるサブイジングモデルサイズを持つハイブリッド最適化手法の性能. (上部) 前処理 SA とハイブリッド最適化手法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均. 上部および下部のバーは, それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. (下部) ハイブリッド最適化手法によるループ数. エラーバーは標準偏差を示す. Reprinted figure from © [2023] The Physical Society of Japan (J. Phys. Soc. Jpn. [92], [124002].)

4.6 ハイブリッド最適化手法の解析

4.4 と 4.5 節にて, シミュレーションによる SA と D-Wave Advantage のハイブリッド最適化手法の性能を評価した. また, ハイブリッド最適化手法の複数のパラメータによる解精度への影響について調査した. その結果, D-Wave Advantage に入力可能か不可能かに関わらず, ハイブリッド最適化手法によって, 前処理 SA によって得られた解が改善されることが示された. 一方, パラメータによる影響を調査した結果, 適したサブイジングモデルサイズの設定がハイブリッド最適化手法の性能を向上させるために重要であることが見出された. 設定するサブイジングモデルサイズは, 小さすぎたり, 大きすぎたりするとハイブリッド最適化手法による解精度向上は期待できない. その理由を, サブイジングモデルサイズが小さい場合は固定スピンのサブイジングモデルに与える影響が大きく, サブイジングモデルの変数の変化によって得られる解の自由度が少なかったためと仮説を立てた. また, サブイジングモデルサイズが大きい場合は, D-Wave Advantage の解精度が

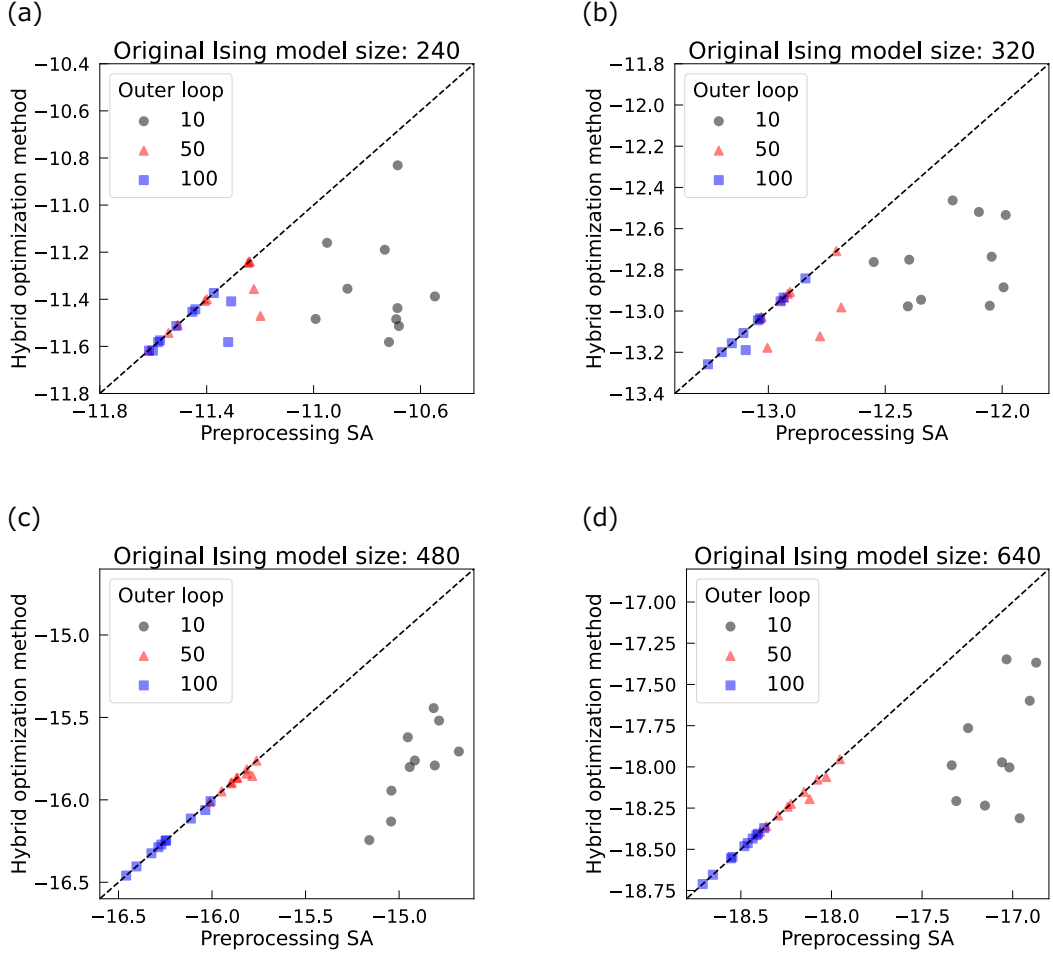


図 4.8: 元のイジングモデルサイズ (a) $N = 240$, (b) $N = 320$, (c) $N = 480$, (d) $N = 640$ における前処理の解精度依存性. 黒い円, 赤い三角形, 青い四角形は, 前処理 SA のアウターループがそれぞれ 10, 50, 100 の解を用いた条件である.

低下するためと仮説を立てた.

そこで上記の仮説について, マスター方程式 (式 (2.38)) を用いた SA の解析とシュレディンガー方程式 (式 (2.49)) を用いた QA のシミュレーションを含むハイブリッド最適化手法のシミュレーションの解析によって検証した.

4.6.1 SA による解析

まず, サブイジングモデルサイズが小さいときにハイブリッド最適化手法によって解の改善が起きづらい理由について SA の解析によって考察する. マスター方程式 (式 (2.38)) を用いた SA を実施することで, 時刻 t におけるすべての状態の確率を得ることができる. そこで, 時刻 t における k 番目の状態の確率 $P_k(t)$ を用

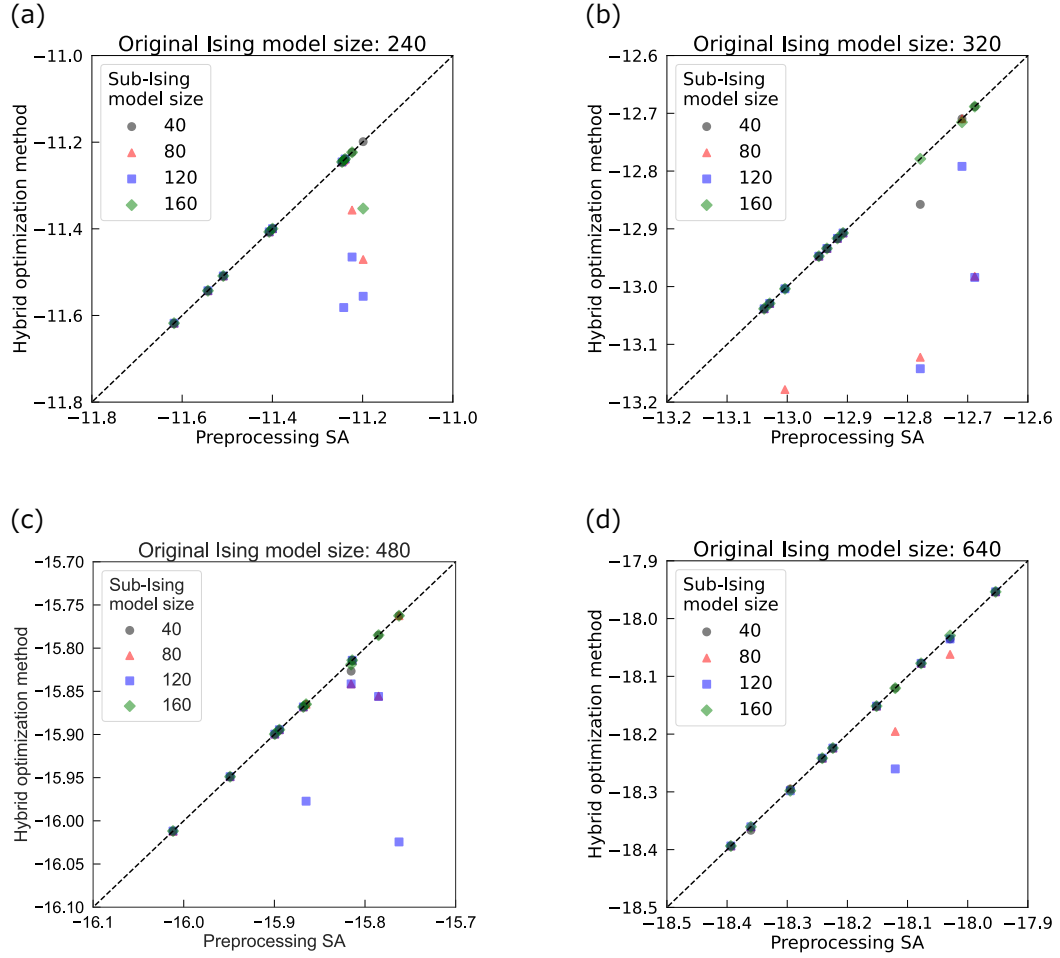


図 4.9: 元のイジングモデルサイズ (a) $N = 240$, (b) $N = 320$, (c) $N = 480$, (d) $N = 640$ におけるサブイジングモデルサイズ依存性. 黒い円, 赤い三角形, 青い四角形, 緑の菱形は, サブイジングモデルサイズがそれぞれ 40, 80, 120, 160 の条件における結果である.

いてスピン σ_i の期待値を次のように算出した.

$$\langle \sigma_i \rangle = \sum_{k=1}^{2^n} P_k(t) \sigma_{i,k}. \quad (4.6)$$

ここで, $\langle \cdot \rangle$ は期待値を, $\sigma_{i,k}$ は k 番目の状態における σ_i を示している.

この $\langle \sigma_i \rangle$ は, ハイブリッド最適化手法において N_I が無限であり, N_S が N_I の条件で, サブイジングモデルを生成する場合の d_i (式 (4.3)) であると仮定できる. また, Conversion step でサブイジングモデル生成のためにスピンを固定する際, $\langle \sigma_i \rangle$ の値が $+1$ や -1 に近いほど, それらの値に固定されやすい状態と仮定することができる.

解析に用いるイジングモデルのスピン数は 8 とし, 前節で使用した場合と同じようにすべてのスピンの間に相互作用している全結合イジングモデルとした. 係数は, 平均が 0 で標準偏差が 1 のガウス分布に従って相互作用と局所磁場を決定したランダムイジングモデルとガウス分布の 0 以下を除いて相互作用と局所磁場を設

定した強磁性体イジングモデルを用いた。なお、ランダムイジングモデルにおいては相互作用と局所磁場の両方で 0 になる場合を除外した。また、ランダムイジングモデルは二つ（イジングモデル A とイジングモデル B）を用意した。それらのイジングモデルについてすべてのスピン状態を探索した結果、縮退は存在しなかった。

マスター方程式 (式 (2.38)) を用いた SA は、4 次の Runge–Kutta 法を用いて実装した。SA の条件は次の通りである。初期条件は、すべての状態が等確率となる条件とした。初期温度 T_{initial} は 20 とした。温度スケジュールも前節と同様に、 $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ とした。減衰率 r は、設定したいアウトグループの値と最終温度 ($T = 0.1$) から算出して設定した。

また、比較としてある温度における熱平衡状態をプロットした理想的なダイナミクスについても解析した。その場合は、ある温度における全状態のエネルギーからボルツマン分布を算出し、式 (4.6) に従いスピン毎の期待値を算出した。

まず、強磁性体イジングモデルと二つのランダムイジングモデルの熱平衡状態における温度ごとのスピンの期待値と $T = 0.1$ のときの期待値を図 4.10 に示す。強磁性体イジングモデルは、低温になるほどすべてのスピンの期待値が 1 に近づくことがわかる (図 4.10(a),(d))。一方、ランダムイジングモデルの温度によって期待値の正負が変化するスピンが存在することが確認された。例えば、ランダムイジングモデル A の σ_5 やランダムイジングモデル B の σ_2 である (図 4.10(b),(c))。なお、ランダムイジングモデル B の最終温度における σ_2 と σ_7 の期待値が 1 となっていないが、より低温状態では 1 となるため、フラストレーションによる効果のためと考えられる。

続いて、強磁性体イジングモデルと二つのランダムイジングモデルに対して SA を実施した際のスピンの期待値を図 4.11 と図 4.12 に示す。図 4.11 は減衰率 $r = 0.948$ 、図 4.12 は $r = 0.555$ で SA を実施した結果であり、図 4.11 の方が徐々に温度を下けているため、基底状態を得られる可能性が高い。

SA 終了時 ($T = 0.1$) のスピンの期待値を見ると、図 4.11 と図 4.12 では、強磁性体イジングモデルにおいてすべてのスピンの期待値がそれぞれ 0.33 と 0.16 付近となった。一方、ランダムイジングモデル A とランダムイジングモデル B においては期待値が 1 に近いスピンと、期待値が 0 から $|0.5|$ 付近と低くなるスピンの混在することが示された。特に、図 4.12 においてその傾向は顕著であった。また、図 4.12(f) ではランダムイジングモデル B の σ_2 や σ_7 のように基底状態とは異なる正負の期待値を示すスピンも見出された。SA 終了時に期待値が低くなったスピンについて着目すると、図 4.10(b),(c) で期待値の絶対値が大きくなる温度が比較的低いスピンと共通していた。SA 終了時のスピンの期待値が低くなる傾向が図 4.11 よりも図 4.12 の方が顕著であることから、温度低下が早くなったことで十分な温度でスピンフリップする機会を逸し、準安定状態から抜け出せなくなることで、スピンの期待値が低い状態が生じたと考えられる。

本研究で提案するハイブリッド最適化手法では、期待値の絶対値 $|\langle\sigma_i\rangle|$ が低いスピンから順に設定したサブイジングモデルサイズ分スピンを選択する。ここで、ランダムイジングモデル A を対象に $r = 0.555$ で実施した SA を前処理の解としてハイブリッド最適化手法を実施する場合を考える。サブイジングモデルサイズが 4 以上のとき、 $\sigma_5, \sigma_0, \sigma_4, \sigma_1$ を含むスピンがサブイジングモデルのスピンが選択される。それ以外のスピンは期待値によって固定されると言えるため、 σ_2 や σ_7 は、基底状態と同じ向きにスピンが固定される可能性が高い。固定されたスピンが基底状態と同じ向きであれば、QA によって基底状態を得られる可能性がある。一方、サブイジングモデルサイズが 4 未満のとき、 $\sigma_5, \sigma_0, \sigma_4, \sigma_1$ の内、いくつかは固定スピンとなる。固定する際、それらのスピンは期待値が 0 に近いため、基底状態と同じ向きに固定される確率は約 50% となる。もし、基底状態と異なる向きに固定されてしまった場合、サブイジングモデルを解いても元のイジングモデルの基底状態に辿り着くことはできない。これはランダムイジングモデル B についても同様である。このように、ハイブリッド最適化手法で基底状態を高確率で得るためには、期待値の絶対値が低く不安定なスピンをすべてサ

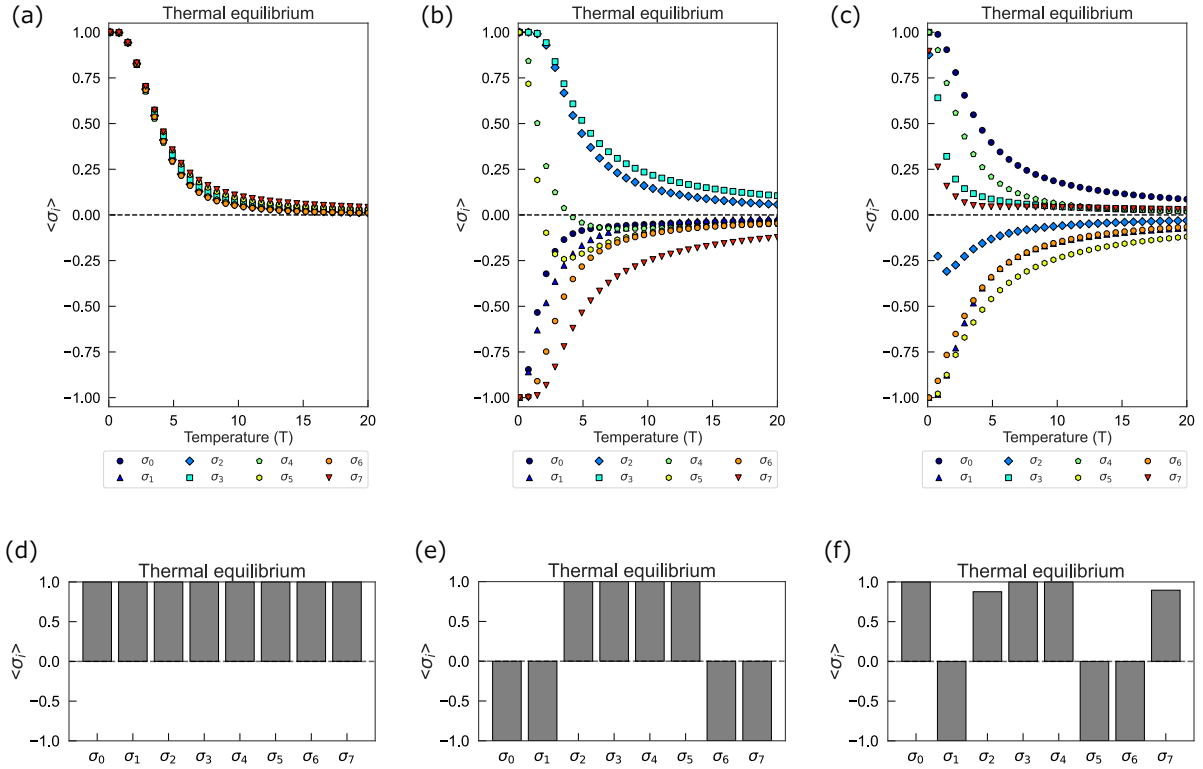


図 4.10: 強磁性体イジングモデルとランダムイジングモデルの熱平衡状態におけるスピンの期待値. (a) 強磁性体イジングモデルと (b) ランダムイジングモデル A, (c) ランダムイジングモデル B の温度ごとの期待値. (d) 強磁性体イジングモデルと (e) ランダムイジングモデル A, (f) ランダムイジングモデル B の温度 $T = 0.1$ の期待値.

ブイジングモデルのスピンのように、サブイジングモデルサイズを設定する必要がある。

ここまでで、マスター方程式を用いた SA によって、サブイジングモデルサイズが小さいときにハイブリッド最適化手法の解精度が低下する理由について考察した。上記のように、SA 実施後に期待値が低いスピンの存在することを確認するために、元のイジングモデルサイズが 160, 240, 320 のイジングモデルを SA した際のスピンの期待値を計算した。

SA のパラメータについては、初期温度は 4.4 節で記載の設定方法に倣っており、元の問題スピン数が 160, 240, 360 のイジングモデルに対してそれぞれ、79.0, 82.0, 110.0 と設定している。温度スケジュールも前節と同様に、 $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ とし、アウターループは 10, 50, 100, 500, 1000 とした。

一つの条件において 1000 回の SA を実施し、次の式でスピンの期待値 $\langle \sigma_i \rangle$ を算出した。

$$\langle \sigma_i \rangle = \sum_{k=1}^{1000} \sigma_{i,k} / 1000. \quad (4.7)$$

期待値は規格化されているため、範囲は $[-1, 1]$ となっている。

スピン毎の期待値を 0.1 刻みで集計し、出現する確率を図 4.13 に示す。元のイジングモデルサイズの大きさに関わらず、アウターループが大きくなるほど期待値の絶対値が高いスピンの出現、分布がなだらかになることが確認された。アウターループが上がり、SA の精度が高くなるほどよりエネルギーが低い解が集積され、

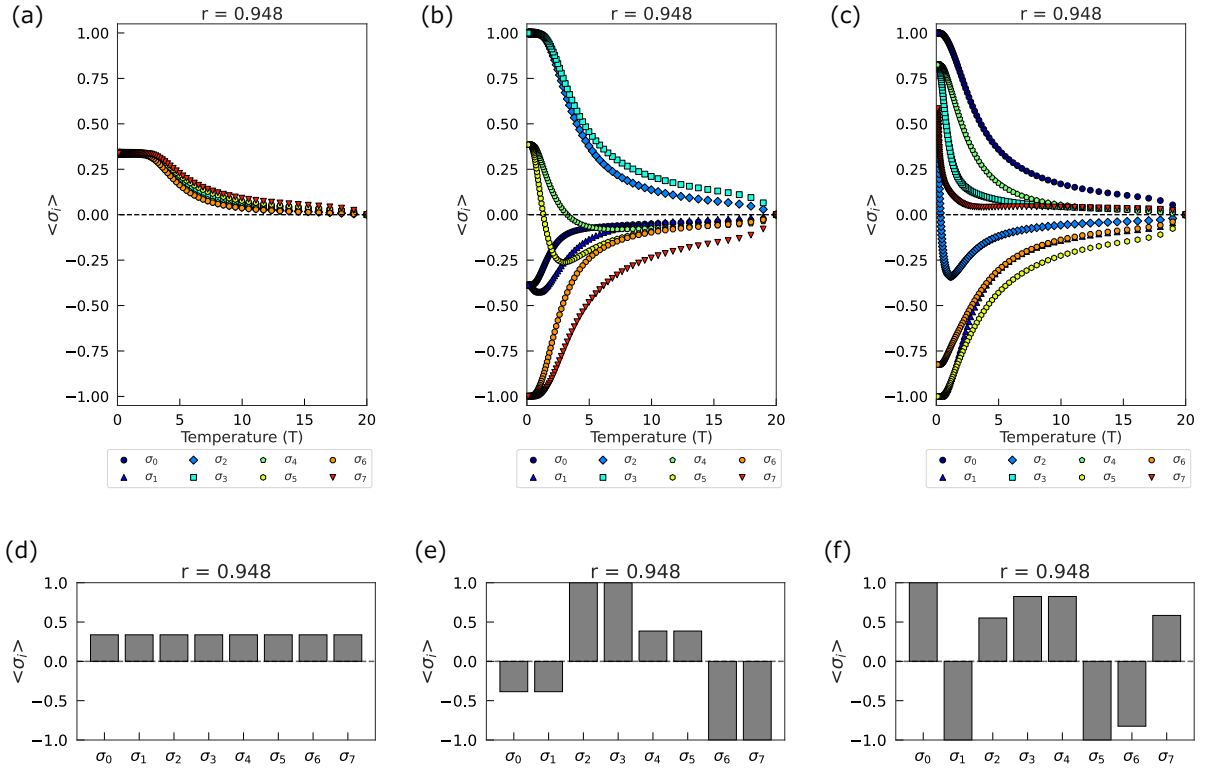


図 4.11: 減衰率 $r = 0.948$ 条件の SA 実施時における強磁性体イジングモデルとランダムイジングモデルのスピンの期待値. (a) 強磁性体イジングモデルと (b) ランダムイジングモデル A, (c) ランダムイジングモデル B の温度ごとの期待値. (d) 強磁性体イジングモデルと (e) ランダムイジングモデル A, (f) ランダムイジングモデル B の温度 $T = 0.1$ の期待値.

エネルギーの低い状態で共通した向きを持つスピンが出現しやすくなったためと考えられる. この結果は, マスター方程式を用いた SA の結果と一致する. 期待値の大きさに着目すると, アウターループが 10 のときは絶対値の最大が 0.3 程度であり, アウターループが 1000 のときは, 0.7 や 0.8 程度となった.

この結果から, サブイジングモデルサイズが小さい時は, ハイブリッド最適化手法によって解が改善されない理由の一つを示していると考えられる.

4.6.2 ハイブリッド最適化手法による解析

次に, サブイジングモデルサイズが大きいときに, QA の解精度が低いことによって解の改善が起きづらい理由について, シュレディンガー方程式を用いた QA のシミュレーションを含むハイブリッド最適化手法のシミュレーションの解析によって考察する.

シミュレーションで使用するイジングモデルは, 前節で使用した場合と同じようにすべてのスピンが互いに相互作用している全結合イジングモデルとした. 係数は, 平均が 0 で標準偏差が 1 のガウス分布に従って相互作用と局所磁場を決定したランダムイジングモデルを用いた. なお, ランダムイジングモデルにおいては相互作用と局所磁場の両方で 0 になる場合を除外した. 元のイジングモデルのスピン数は 20 とした.

SA による前処理は, 4.4 節で用いた SA を使用する. SA の条件としては, 初期温度 T_{initial} は前節で使用

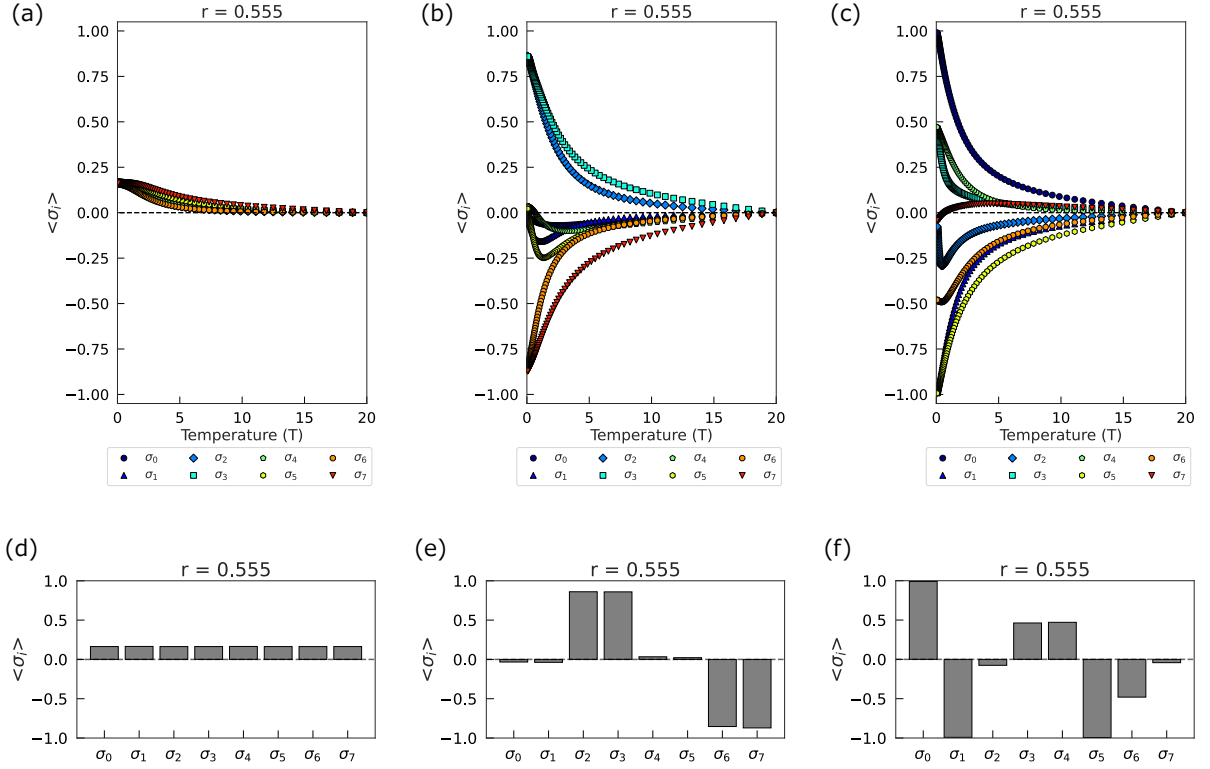


図 4.12: 減衰率 $r = 0.555$ 条件の SA 実施時における強磁性体イジングモデルとランダムイジングモデルのスピンの期待値. (a) 強磁性体イジングモデルと (b) ランダムイジングモデル A, (c) ランダムイジングモデル B の温度ごとの期待値. (d) 強磁性体イジングモデルと (e) ランダムイジングモデル A, (f) ランダムイジングモデル B の温度 $T = 0.1$ の期待値.

したイジングモデルの $[2v_{\max}]$ の値とした. 温度スケジュールも前節と同様に, $T(t) = T_{\text{initial}} \times r^t$ とした. SA の精度が高いと基底状態が解プールに含まれてしまい, QA の解精度の効果を検証できないため, SA 精度が高くなりすぎないようにアウターループは 5 とした.

QA は, 式 (2.47) のハミルトニアンをシュレディンガー方程式 (式 (2.49)) に従い時間発展させることで実施した. 実装には, オープンソースソフトウェアである QuTiP [154, 155] 上の `mesolve` を用いた. QA 実施後, すべてのスピン状態の出現確率が得られるため, その確率に従って一つのスピン状態を選択し, QA の結果とした. QA の精度を調整するために, τ を 2, 4, 6, 8, 10, 20, 40, 60, 80, 100 と変更した (式 (2.47)). τ が大きいほど, 量子ゆらぎを徐々に弱めていることになるため, QA の解精度は高くなる.

ハイブリッド最適化手法のパラメータは, N_L , N_S , N_E および N_L をそれぞれ, 20, 5, 10, 3 とした. 異なる解プールを得るために, SA を複数回実行し, 20 個の解の中に基底状態が含まれなかった解プールを 100 組抽出した. サブイジングモデルサイズは 1 – 10 まで変更した.

また, 比較のためスピン状態を全探索し, 基底状態を算出した.

ハイブリッド最適化手法をシミュレーションした結果を, 図 4.14 に示す. 図 4.14(a) は, ハイブリッド最適化手法によって得られたエネルギー密度を示す. サブイジングモデルサイズが 0 の部分では, 前処理 SA によって得られた解プールの結果を示している. また, 図 4.14(b) は, ハイブリッド最適化手法が計算を終了す

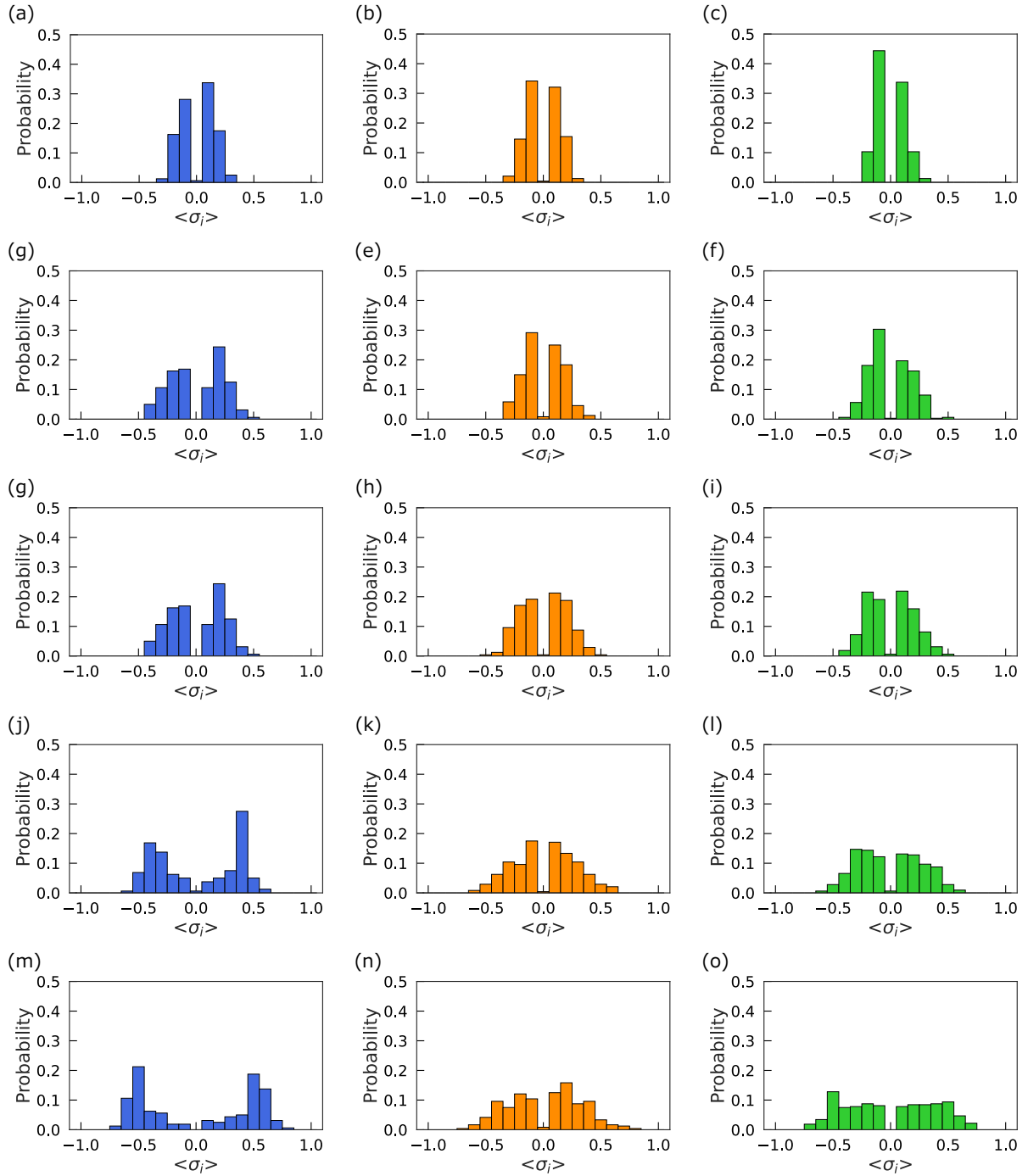


図 4.13: 異なるアウトーループにおけるスピンの期待値の分布. アウターループ 10 におけるサイズ (a) $N = 160$, (b) $N = 240$, (c) $N = 320$ のイジングモデルのスピンの期待値. アウターループ 50 におけるサイズ (d) $N = 160$, (e) $N = 240$, (f) $N = 320$ のイジングモデルのスピンの期待値. アウターループ 100 におけるサイズ (g) $N = 160$, (h) $N = 240$, (i) $N = 320$ のイジングモデルのスピンの期待値. アウターループ 500 におけるサイズ (j) $N = 160$, (k) $N = 240$, (l) $N = 320$ のイジングモデルのスピンの期待値. アウターループ 1000 におけるサイズ (m) $N = 160$, (n) $N = 240$, (o) $N = 320$ のイジングモデルのスピンの期待値.

るまでに必要としたループ数を示す．そして，図 4.14(c) と図 4.14(d) は，100 組の前処理解プールのうち，ハイブリッド最適化手法によって解が改善された割合と基底状態に到達した割合を示す．また，ループごとに N_E 個生成されたサブイジングモデルを QA で解いた際の基底状態占有確率の平均値を算出した．基底状態占有確率算出の基準となるサブイジングモデルの基底状態は全探索によって求めた．図 4.15 で，一つの解プールをもとに $\tau = 4$ と $\tau = 80$ で QA を行ったハイブリッド最適化手法における基底状態占有確率の平均値を示す．

ハイブリッド最適化手法をシミュレーションした結果について，まず τ が低い時の結果に着目する．例えば $\tau = 4$ の場合，最もエネルギー密度の平均値が低い条件はサブイジングモデルサイズ (m) が 5 や 7 のときである (図 4.14(a))．この現象は，D-Wave Advantage を用いたシミュレーションの結果である図 4.7 や図 4.9 で認められた現象と類似している．サブイジングモデルが小さい ($m = 1$)，もしくは大きい条件 ($m = 9$) では，最も解の改善が認められたサブイジングモデルサイズ ($m = 5$) と比較して，解の改善割合は半分以下となった (図 4.14(c))．図 4.15(a) より， $\tau = 4$ の QA ではサブイジングモデルサイズが大きくなるほど基底状態占有確率が低下する様子が認められる．サブイジングモデルサイズが小さい条件では，QA によってサブイジングモデルの基底状態を得る確率が高くなるが，固定スピンの数が増えるため，前節で記載したようにエネルギーが低くなる向きに固定されない可能性が出てきてしまい解が改善されないと考えられる．一方，サブイジングモデルサイズが大きい条件では，固定スピンの数をエネルギーが低くなる向きに固定できる可能性が高くなるが，サブイジングモデルの基底状態を得る確率が下がってしまう．このことから，QA の解精度が低い条件では上記のトレードオフのバランスがとれたサブイジングモデルサイズでハイブリッド最適化手法による解の改善が起こると考えられる．次に， τ が高いとき ($\tau = 80$) に着目する．サブイジングモデルの基底状態占有確率の結果から，サブイジングモデルサイズに関わらず基底状態を得られる条件である (図 4.15(b))．図 4.14(a),(c) より，サブイジングモデルサイズが小さいときは解の改善割合が低くエネルギー密度の平均値はあまり低下しなかったが，サブイジングモデルサイズが大きくなるほど解が改善されることが示された．サブイジングモデルサイズ毎の基底状態に到達した割合もサブイジングモデルサイズが大きくなるほど上がっており，基底状態を得られやすことが示された (図 4.14(d))．以上から，QA の精度が高い条件であってもサブイジングモデルサイズが小さい条件では十分な解を得られないことが示された．一方，サブイジングモデルサイズが大きい条件では前処理の結果から解精度が向上する割合が高くなったため，QA 精度の向上がハイブリッド最適化手法の解精度向上に関係していることがわかった．

4.7 本章のまとめ

問題サイズ制限が強く，多くの変数を入力することができない量子アニーリングマシンの性能を向上させるために，比較的多くの変数を入力可能な非量子イジングマシンを用いたハイブリッド最適化手法を構築した．ハイブリッド最適化手法の性能を評価するために，非量子イジングマシンとして SA を，量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を使用したシミュレーションを行った．D-Wave Advantage に入力可能または入力不可能な問題サイズのイジングモデルを用いてハイブリッド最適化手法の解精度について解析した結果，いずれの場合でも D-Wave Advantage と前処理 SA のみによって得られた解よりも高い精度の解を得られることが示された．また，ハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性について検討した結果，前処理の解精度とサブイジングモデルサイズが解精度に影響を与えている可能性が示唆された．これらの点は，類似手法を用いた先行研究 [105, 109] において報告されていない内容である．また，上記のような SA と D-Wave Advantage のシミュレーションにより示唆された性質について解析するために，マスター方程

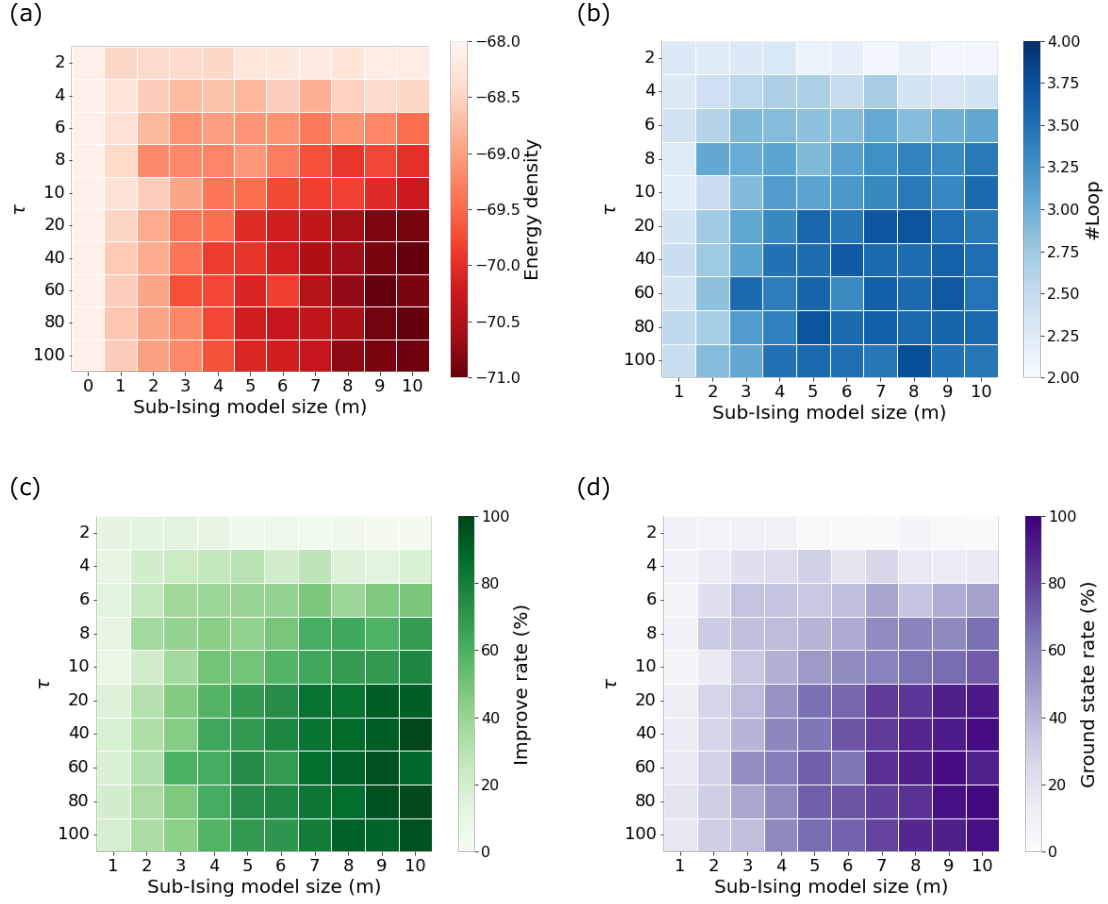


図 4.14: ハイブリッド最適化手法の QA の解精度とサブイジングモデルサイズ依存性. 比較指標は, (a) エネルギー密度, (b) ループ数, (c) 解の改善割合, (d) 基底状態割合を示す. ヒートマップの値は 10 回のシミュレーションの平均を示す.

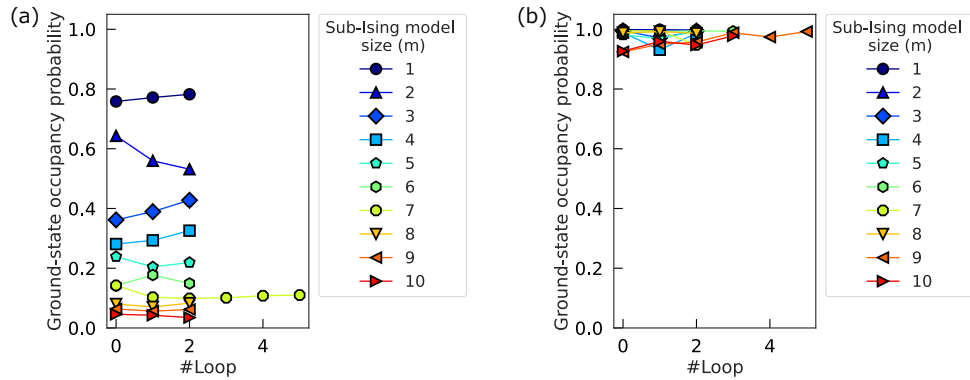


図 4.15: ハイブリッド最適化手法の QA におけるサブイジングモデルの基底状態占有確率. プロットは, N_E 個のサブイジングモデルの基底状態占有確率の平均値. 一つの解プールをもとに (a) $\tau = 4$, (b) $\tau = 80$ の QA を実施した結果を示す.

式やシュレディンガー方程式を用いた SA と QA によってシミュレーションを実施した．この解析により，D-Wave Advantage を用いたシミュレーションでも見られていた，QA の解精度とサブイジングモデルサイズのトレードオフの関係を再現することができた．また，QA の解精度が向上することでハイブリッド最適化手法の解精度も向上することが示された．このように，ハイブリッド最適化手法の特性を分析することは，今後の実用的な使用のために重要であると考えられる．

第 5 章

結論と今後の展望

5.1 結論

本論文では、イジングマシンの性能を十分に引き出すため、ハードウェア上の制限を克服または緩和するアルゴリズムの提案とその性質の理論的な検討を行った。

第 1 章では、本研究の背景と目的を述べた。第 2 章では、イジングマシンで組合せ最適化問題を得るための 3 段階の操作手順をもとに、本研究を遂行する上で考慮しなければならない基本的な事項とそれに伴う記法を紹介した。組合せ最適化問題をイジングモデルで表現する方法、論理イジングモデルを物理イジングモデルに変換する原因であり、イジングマシンの性能を引き出すことを阻害するハードウェア上の制限、イジングマシンの内部アルゴリズムについて概説した。また、現在実装されているイジングマシンのハードウェア制限を示すスペックを簡単に説明した。

第 3 章では、ハードウェア制限の一つであるビット幅制限を緩和するアルゴリズムの提案と理論的な解析を行った。先行研究の補助スピンを用いたビット幅削減手法（補助スピン追加手法）においては、基底状態がビット幅削減前後で変化しないことが示されていたが、同じアルゴリズムで解く検討は行っていなかった。そこで、同じパラメータを用いた SA を元のイジングモデルと BWR イジングモデルに対して実施した。その結果、得られる解が異なることが示され、その理由が解を得るための動的過程が二つのイジングモデルで異なることにあることが示唆された。そのため、BWR イジングモデルにおいて動的過程が変化した理由を統計力学の観点から分析し、補助スピンを追加したことによる二つの特徴的な性質、すなわち有効温度とエントロピー緩和遅延が原因である可能性を見出した。この分析結果を考慮し、BWR イジングモデルのための SA パラメータを提案し、その効果を検証した結果、元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的過程が近づくことが示された。

第 4 章では、ハードウェア制限の一つである問題サイズ制限を緩和するアルゴリズムの提案と理論的な解析を行った。量子アニーリングマシンは、高速・高精度にイジングモデルを解くことが期待されているが、問題サイズ制限が強く大規模な問題を入力することができないという課題があった。そこで、入力問題サイズが比較的大きいという利点を持つ非量子イジングマシンと組み合わせたハイブリッド最適化手法を提案した。ハイブリッド最適化手法では、まず非量子イジングマシンで大規模な問題の複数の解を得たのちに、複数の解の中で値が不揃いとなるスピンを抽出し、問題サイズの小さいサブ問題を作成する。そして、そのサブ問題を量子アニーリングマシンで解く。この操作を、解が一定の回数変動しなくなるまで継続させる。このハイブリッド最適化手法の性能を評価するために、非量子イジングマシンとして SA を、量子アニーリングマシンとして D-Wave Advantage を使用したシミュレーションを行った。D-Wave Advantage に入力可能な問題サ

イズと入力不可能な問題サイズに対する性能を評価した結果、いずれにおいてもハイブリッド最適化手法は、D-Wave Advantage と前処理 SA のみで得た解よりも高い精度の解を得られることが示された。同時に、ハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性について検討した結果、前処理の解精度とサブ問題の問題サイズが解精度に影響を与えている可能性が示唆された。そこで、SA と D-Wave Advantage のシミュレーションにより示唆された性質について解析するために、マスター方程式とシュレディンガー方程式を用いた SA と QA によってシミュレーションを実施した。この解析により、D-Wave Advantage を用いたシミュレーションでも見られていた、QA の解精度とサブイジングモデルサイズのトレードオフの関係を再現することができた。また、QA の解精度が向上することでハイブリッド最適化手法の解精度も向上することが示された。

5.2 今後の展望

まず、ビット幅制限を緩和するアルゴリズムについては、本研究で提案した SA パラメータを用いた場合、計算時間が増大するという課題がある。提案 SA パラメータでは、インナーループを有効緩和時間 τ_{eff} を用いて $1\text{MCS} \times \tau_{\text{eff}}/2$ と設定する。MCS はイジングモデルのスピン総数であるため、ビット幅削減によって補助スピンの数が増加するほど値が大きくなる。また、 τ_{eff} は、補助スピン数が増加し、低温になるほど値が大きくなる（図 3.12）。また、提案 SA パラメータでは、温度スケジュールを有効温度 T_{eff} に従って設定する。この T_{eff} に沿った温度スケジュールは、補助スピン数増加に伴って、元の温度スケジュールよりも低温の期間が長くなる。また、式 (3.40) より、低温時では τ_{eff} が補助スピンの数 N_a に対して、指数関数的に長くなる。以上のことから、補助スピンの数の増加に伴い計算時間が増加する。元のイジングモデルと BWR イジングモデルのビット幅を、それぞれ n_{original} と n_{BWR} とした場合に、補助スピン追加手法によって 1 つの係数ごとに追加される補助スピンの数 N_a は次のように表される：

$$N_a \simeq \begin{cases} 2^{(n_{\text{original}} - n_{\text{BWR}})} & (n_{\text{BWR}} > 2) \\ 2^{(n_{\text{original}} - 1)} - 2 & (n_{\text{BWR}} = 2). \end{cases} \quad (5.1)$$

このように、補助スピン追加手法によって補助スピン数が増大するため、計算時間を短縮する方法を検討することには意義がある。

先行研究において、補助スピン追加手法による補助スピン数を削減する取り組みとして、シフト法と組み合わせる方法が提案されている [76] が、この方法では基底状態が元のイジングモデルのものから変化する可能性がある。計算時間の増加を緩和しながら基底状態を維持するための別の方法としてイジングマシンに入力できるビット幅を拡張することが考えられる。CMOS アニーリングマシン [14, 15, 18, 30, 31] やデジタルアニーラ [16, 17, 20] においては、入力可能なビット幅が拡大傾向にあり、ビット幅の拡張には期待ができる（表 2.3）。また、ハードウェアの制約によりイジングマシンのビット幅を増やすことができない場合でも、互いに独立なスピンを並列にフリップさせることによって、インナーループの増大を回避することができると考えられる。例えば、BWR イジングモデルの補助スピンは互いに独立であるため、並列にフリップさせても計算結果に影響はない（図 5.1(a)）。キンググラフを実装している CMOS アニーリング [14, 15, 30, 31] は、互いに独立なスピンを並列にフリップ可能である。また、デジタルアニーラ [16, 17, 19, 20] や STATICA [21], Momentum Annealing (MA) を内部アルゴリズムとする CMOS アニーリングマシン [18] は、並列にスピンを反転可能である。そのため、これらのイジングマシンで並列にスピン反転可能なスピんに、BWR イジングモデルの補助スピンを入力する埋め込み手法の開発が、計算時間が増大する課題への解決の一つの方法になると考えられる。

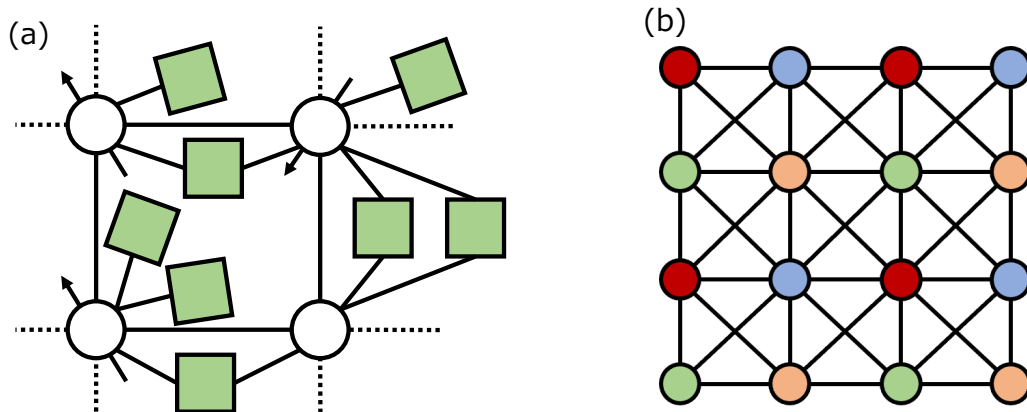


図 5.1: 計算時間増大を回避する方法. (a) 互いに独立であるため並列にフリップしても問題ない補助スピン. 緑色の四角が補助スピンである. (b) CMOS アニーリングに実装されているキングスグラフ. 同じ色の丸 (スピン) は互いに独立であるため並列にフリップ可能.

また、補助スピン追加手法適用後の BWR イジングモデルの動的過程について、QA やシミュレーテッド量子アニーリング (SQA), MA, Parallel Tempering 法といったイジングマシンに実装されている SA 以外のアルゴリズム [6, 16–20, 30, 33, 37, 39, 116] 実行時での検証も重要であると考えられる. QA については、補助スピンを持つイジングモデルにおけるシステムスピン同士の基底状態の相関係数が横磁場の強さに対して非単調依存性を示すことが報告されており [147], 動的過程に変化が起こる可能性が考えられる.

次に、問題サイズ制限を緩和するハイブリッド最適化手法については、アルゴリズムの特徴をもとに、計算時間を短縮する手法の検討が可能であると考えている. このハイブリッド最適化手法では、Execution step にて量子アニーリングマシンで N_E 個のサブイジングモデルを解く (図 4.2). 本研究で実施したシミュレーションでは、サブイジングモデルを一つずつ D-Wave Advantage によって解いていた. この過程を、複数の問題を同時に D-Wave マシンに埋め込み、一度の計算で複数の問題の解を得るという並列量子アニーリング [107] と呼ばれるアイデアによって、並列化させることを考える. 並列量子アニーリングをハイブリッド最適化手法の execution step で実行することができれば、計算時間は短縮されると推察されるため検討する意義はある.

また、本研究では非量子イジングマシンの代わりに SA を用いていたため、実装された非量子イジングマシンを前処理に使用して性能を評価することが重要であると考えている. さらに、非量子イジングマシンと量子アニーリングマシンのハイブリッドだけでなく、非量子イジングマシン同士や量子アニーリング同士をハイブリッドさせた手法や、量子アニーリングを前処理に使用し、サブ問題を非量子イジングマシンで解く手法も検討可能である. 非量子イジングマシン [14–18, 20, 30, 31, 45–47, 141] や量子アニーリングマシン [6, 33, 37, 116, 119] の入力可能な問題サイズは拡大傾向であるため (表 2.3), 上記の手法を用いた性能評価と理論的な検討は将来的な高精度アルゴリズムの開発に向けて重要である.

ハイブリッド最適化手法のアルゴリズムの改良も今後の展望として考えられる. ハイブリッド最適化手法における Sampling step から Conversion step にかけてのサブ問題生成の段階では、impact 値を用いた qbsolv のような手法 [98] や、分子動力学法 [66], 線形計画法 [108] を用いた手法といった “sample persistence” [99, 100, 105, 109] と異なるアプローチのサブ問題生成手法が先行研究で報告されている. このような手法をサブ問題生成手法として導入した場合に解精度が向上することがあれば、高精度なアルゴリズムとして提案していきたい. 本研究の結果から、前処理の解精度とサブ問題の問題サイズ依存性がサブ問題生成手

法に影響を受けている可能性が示唆されたため、サブ問題生成法の変更により解精度が変化することが期待できる。また、本研究では単純なイジングモデルを使用したか、制約条件を持つ組合せ最適化問題を対象とし、そのような問題に対する変数削減手法 [130] を使用するという改良方法も考えられる。

付録 A

異なる温度スケジュールにおける提案 SA パラメータの性能

この付録では, さまざまな温度スケジュールで SA が実行されたときの提案 SA パラメータの性能を評価する. 表 A.1 および図 A.1 は温度スケジュールを示している. 初期状態, アウターループ, インナーループはそれぞれ, ランダム, 100 ($n = 0 - 99$), および 1 MCS とした. これは 3.3 節および 3.6 節で説明されている. これらのパラメータは, 最終温度が 1 程度になるように調整された.

正方格子のイジングモデル ($L = 20$) に対して SA を実行した. 局所磁場と相互作用の係数は, 3.6 節に記載の条件のもとで値を付与した.

図 A.2 は, 異なる温度スケジュールを使用して, 提案パラメータまたは元のパラメータを用いた BWR イ

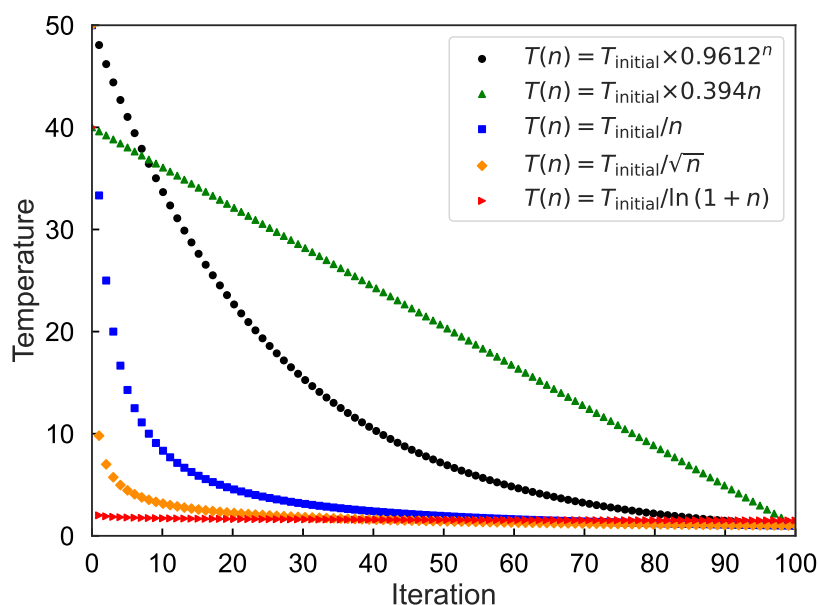


図 A.1: 異なるタイプの温度スケジュール. 温度スケジュール内の n は, n 番目のアウターループを表している. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

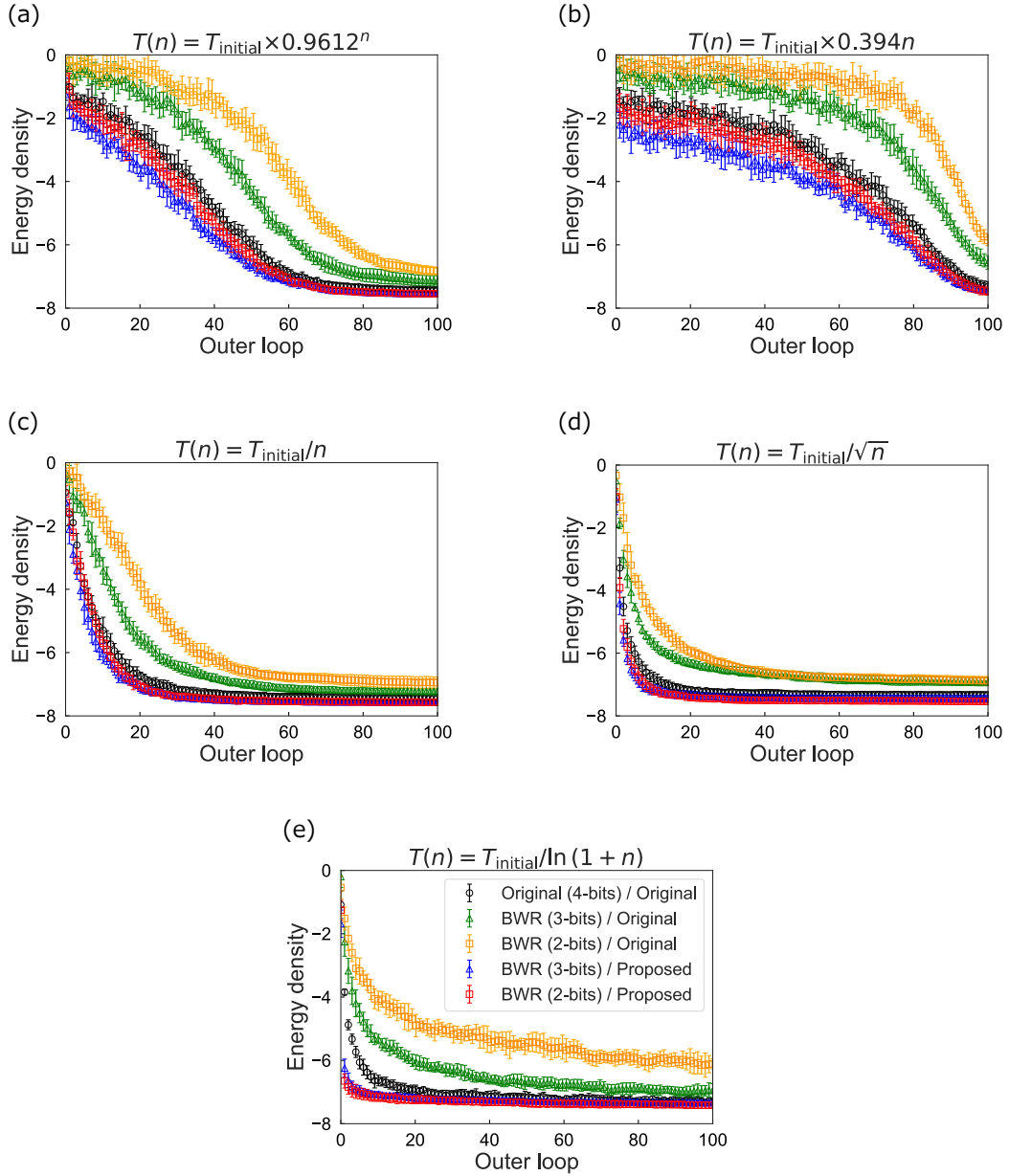


図 A.2: 異なる温度スケジュールにおける元のイジングモデルと BWR イジングモデルの動的プロセスの比較。黒い円は元のイジングモデルを示す。温度スケジュール内の n は、 n 番目のアウターループを表す。緑の三角とオレンジの四角は、ビット幅がそれぞれ 3 ビット幅または 2 ビット幅に削減されたときの元の SA パラメータを用いた BWR イジングモデルを示す。青い三角と赤い四角は、ビット幅がそれぞれ 3-bits または 2-bits に削減されたときの提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルを示す。各プロットは 10 回のシミュレーションの平均であり、エラーバーは標準偏差である。Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875].Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

表 A.1: SA における異なるタイプの温度スケジュール. 温度スケジュール内の n は, n 番目の外部ループを表している. Reprinted figure from [DOI:10.1109/ACCESS.2023.3310875].Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2023 by the Shuta Kikuchi, Nozomu Togawa, and Shu Tanaka.

Temperature schedule	Initial Temperature (T_{initial})	Final Temperature
$T(n) = T_{\text{initial}} \times 0.9612^n$	50	0.994
$T(n) = T_{\text{initial}} \times 0.394n$	40	0.994
$T(n) = T_{\text{initial}}/n$	50	0.990
$T(n) = T_{\text{initial}}/\sqrt{n}$	50	1.005
$T(n) = T_{\text{initial}}/\ln(1+n)$	40	1.506

ジングモデルと, 元の SA パラメータを用いた元のイジングモデルの動的プロセスを示す. 図 A.2 より, すべての温度スケジュールにおいて, 元の SA パラメータを用いた BWR イジングモデルの動的プロセスと SA の終了時のエネルギー密度は, 元のイジングモデルと異なっていた. 対照的に, 提案 SA パラメータを用いた BWR イジングモデルは, 元のイジングモデルに近い値が得られた.

付録 B

D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズのイジングモデルに対するハイブリッド最適化手法のパラメータ依存性

この付録では、D-Wave Advantage に入力不可能な問題サイズのイジングモデルに対してハイブリッド最適化手法を使用した際のパラメータ依存性について示す。

まず、 N_L 依存性について検討した。問題サイズが 320 のイジングモデルを対象とし、サブイジングモデルのサイズは 80、 N_I は 20、 N_S は 10、 N_E は 20 とした。アウターループを 50 に設定し、 N_L を 3, 5, 7 とした場合のエネルギー密度とループ数を図 B.1 に示した。前処理 SA によって得られた解のプールのセットは N_L のすべての条件に対して同じである。また、図 4.5 と同様に、ハイブリッド方法の 10 回のシミュレーションの中で前処理 SA の X_{best} が改善された割合を示している。ハイブリッド最適化手法によって、前処理 SA の解は $N_L \geq 3$ の条件で改善された。図 4.5 でも $N_L \geq 3$ で解の改善が認められており、大規模問題についても同様の結果を得た。また、ループ数と前処理 SA の解が改善された割合も、D-Wave Advantage に入力可能な問題の結果と同様に、 N_L が増加するにつれ増加した。

続いて、 N_I 依存性について検討した。問題サイズが 320 のイジングモデルを対象とし、サブイジングモデルのサイズは 80、 N_L は 3、 N_E は 20 とした。アウターループは 50 に設定し、 N_I を 5, 10, 20, 100 とし、 N_S を複数パターンにした場合のエネルギー密度とループ数を図 B.2 に示した。前処理 SA によって得られた解のプールのセットは N_I の条件ごとに取得した。 N_I の値が大きくなると、前処理 SA のエネルギー密度が低下した。これは、前処理 SA によって得られた解の数が多くなり、確率的に解プールにエネルギーの低い解が含まれるようになったためであると考えられる。このように前処理 SA によって低いエネルギーの解が得られると、ハイブリッド最適化手法によって解があまり改善されなくなる。その結果、 N_I の値が大きくなるとハイブリッド最適化手法による効果が見えづらくなった。また、本検討では N_S が N_I と同じとなる条件、すなわち解プールに含まれるすべての解をもとにサブイジングモデルを生成する条件で性能を評価している。多くのサンプル数をもとにサブイジングモデルを生成することによる解の改善効果はあまり期待できないことが示された。

最後に、 N_E 依存性について検討した。問題サイズが 240, 320, 640 のイジングモデルを対象とし、サブイジングモデルのサイズは 80、 N_I は 20、 N_L は 3、アウターループは 50 とした。問題サイズが 240, 640 のイジングモデルに対しては、 N_S を 10 に、問題サイズが 320 のイジングモデルに対しては、 N_S を 2, 5, 10, 20 とした際の、エネルギー密度とループ数を図 B.3 に示した。前処理 SA によって得られた解のプールのセットは

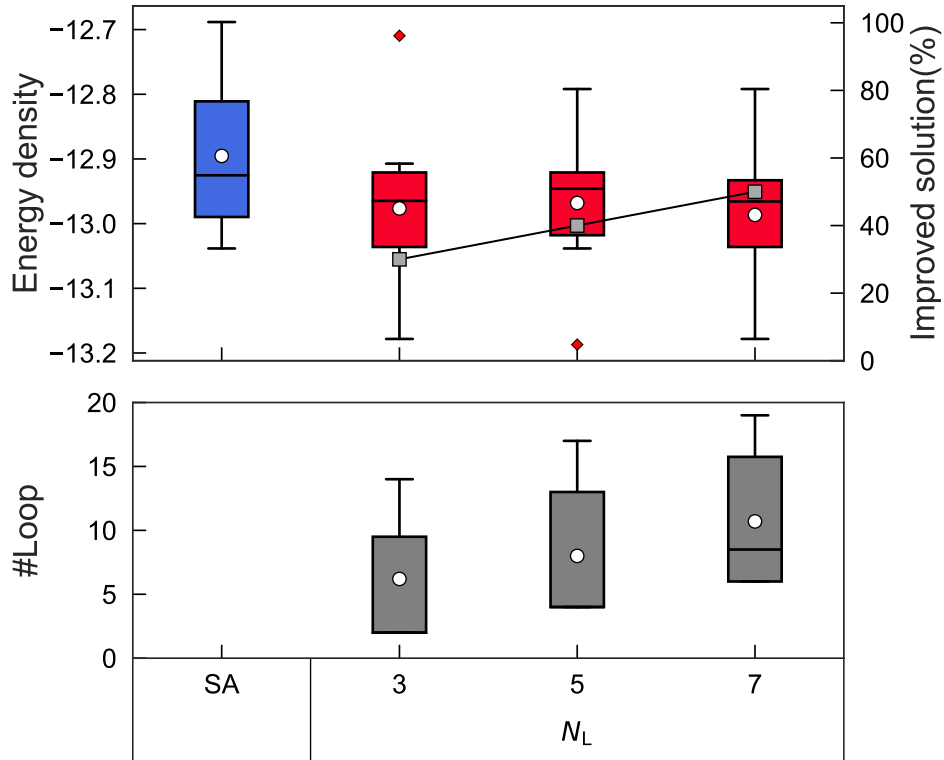


図 B.1: 問題サイズ $N = 320$ のイジングマシンにおける N_L 依存性. (上部) 前処理 SA とハイブリッド方法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均である. 上部および下部のバーはそれぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 赤い菱形は外れ値を示す. 灰色の四角は, ハイブリッド最適化方法の 10 回のシミュレーションで前処理 SA から改善された解の割合を示す. (下部) ハイブリッド最適化方法によるループ数. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均である. 上部および下部のバーはそれぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す.

N_E のすべての条件に対して同じである. 図 B.3(a),(b),(c) より, 前処理 SA の解は $N_E \geq 20$ の条件で改善された. 図 4.6 では, $N_L \geq 10$ で解の改善が認められており, 大規模なイジングモデルを扱う際は解の改善に必要な N_E の値が大きくなることが示唆された.

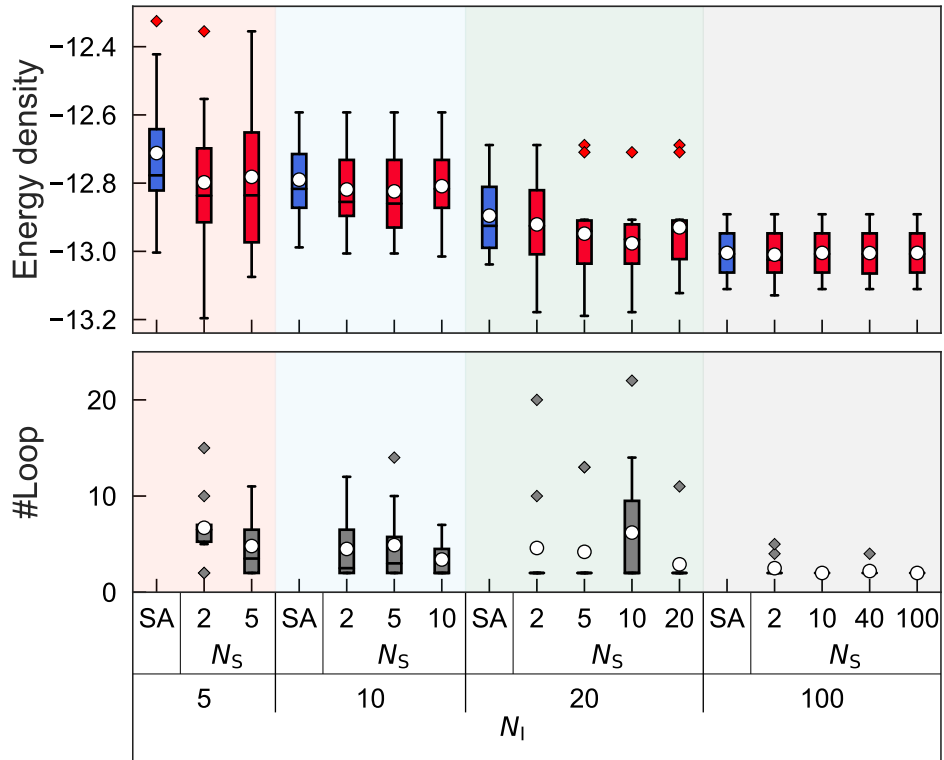


図 B.2: 問題サイズ $N = 320$ のイジングマシンにおける N_I および N_S 依存性. (上部) 前処理 SA とハイブリッド最適化方法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均を示す. 上部および下部のバーは, それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 赤い菱形は外れ値を示す. (下部) ハイブリッド最適化方法によるループ数. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均を示す. 上部および下部のバーは, それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 灰色の菱形は外れ値を示す.

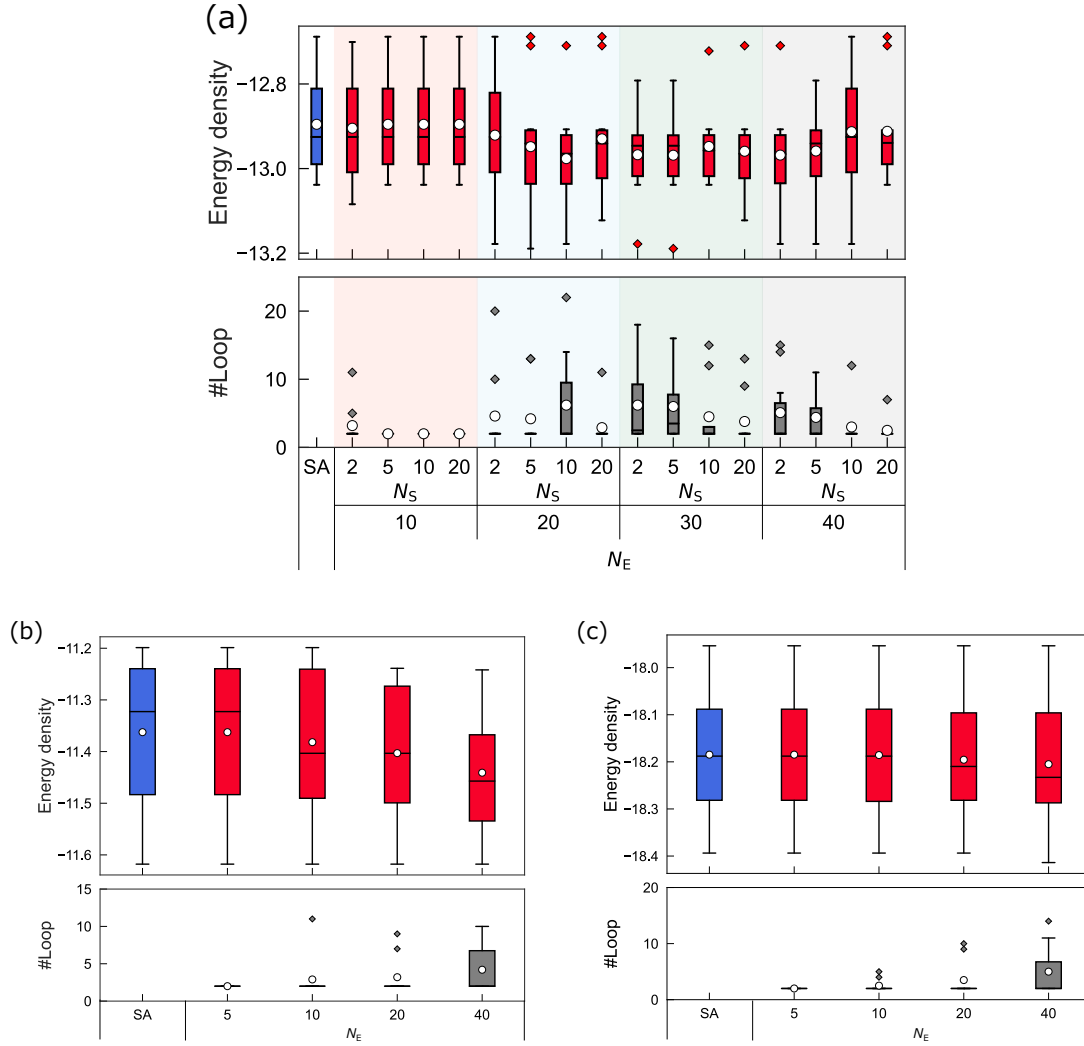


図 B.3: 問題サイズ (a) $N = 320$, (b) $N = 240$, (c) $N = 640$ のイジングマシンにおける N_E および N_S 依存性. (上部) 前処理 SA とハイブリッド最適化方法のエネルギー密度. 白い円は 10 回のシミュレーションの平均を示す. 上部および下部のバーは、それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 赤い菱形は外れ値を示す. (下部) ハイブリッド最適化方法によるループ数. 上部および下部のバーは、それぞれ最高および最低のエネルギー密度を示す. 灰色の菱形は外れ値を示す.

謝辞

本研究は、筆者が慶應義塾大学大学院 理工学研究科 基礎理工学専攻 後期博士課程在学中に同大学院 理工学研究科 田中宗准教授の指導のもとに行ったものです。

田中准教授には、博士後期課程の3年間に亘り、大変ご多忙の中、本研究について多大なるご指導をいただきました。在職しながら未経験の学問分野で博士課程挑戦は不安も多いものでしたが、研究議論のための時間を調整していただく等の様々なご配慮や温かい励ましのお言葉をいただき、研究に取り組み続けることができました。また、研究以外の幅広い話題についてお話しさせていただくことも多く、人間として成長させていただきました。厚く御礼申し上げます。

ご多忙のところ副査を引き受けてくださり、多くの貴重なご意見を賜りました慶應義塾大学大学院 理工学研究科 山本直樹教授、渡辺宙志准教授、村松眞由准教授に深く感謝の意を表します。また、お忙しい中本研究についてご助言をくださいました早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 戸川望教授に深く感謝いたします。

田中宗研究室の関優也特任講師には、研究内容や進め方についての的確なご意見をいただきました。また、同研究室内の学生の皆様には大変お世話になりました。上島雄高氏と中田百科氏には、同じ社会人博士として研究に取り組む姿勢を見て刺激を受けていました。学部4年生、修士1年生、修士2年生の皆様には、研究に関する様々なご意見をいただきました。特に、修士2年の服部智大氏には、お互いの研究内容について議論し、多くのご意見やご助言をいただきました。研究室生活でお世話になった方々に心から御礼申し上げます。

ライオン株式会社の関係者に皆様には、在職しながら博士課程学生となることを承認していただき、普段の生活の中で研究活動について話題にし、気にかけてくださいました。3年間で二つの部所を経験させていただきましたが、お陰様でどちらの部所でも博士課程学生を続けることができました。厚く感謝申し上げます。

最後に、就業時間以外の時間を研究に集中する環境を整えて、博士号取得を支えてくださった家族に感謝致します。

参考文献

- [1] Donald Ervin Knuth. *The art of computer programming*, Vol. 3. Pearson Education, 1997.
- [2] Christos H Papadimitriou. Computational complexity. In *Encyclopedia of computer science*, pp. 260–265. 2003.
- [3] Sanjeev Arora and Boaz Barak. *Computational complexity: a modern approach*. Cambridge University Press, 2009.
- [4] Thomas H Cormen, Charles E Leiserson, Ronald L Rivest, and Clifford Stein. *Introduction to algorithms*. MIT press, 2022.
- [5] Naeimeh Mohseni, Peter L McMahon, and Tim Byrnes. Ising machines as hardware solvers of combinatorial optimization problems. *Nature Reviews Physics*, Vol. 4, No. 6, pp. 363–379, 2022.
- [6] Mark W Johnson, Mohammad HS Amin, Suzanne Gildert, Trevor Lanting, Firas Hamze, Neil Dickson, Richard Harris, Andrew J Berkley, Jan Johansson, Paul Bunyk, et al. Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198, 2011.
- [7] Tadashi Kadowaki and Hidetoshi Nishimori. Quantum annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*, Vol. 58, No. 5, p. 5355, 1998.
- [8] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, Sam Gutmann, and Michael Sipser. Quantum computation by adiabatic evolution. *arXiv preprint quant-ph/0001106*, 2000.
- [9] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, Sam Gutmann, Joshua Lapan, Andrew Lundgren, and Daniel Preda. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem. *Science*, Vol. 292, No. 5516, pp. 472–475, 2001.
- [10] Scott Kirkpatrick, C Daniel Gelatt, and Mario P Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671–680, 1983.
- [11] David S Johnson, Cecilia R Aragon, Lyle A McGeoch, and Catherine Schevon. Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation; part I, graph partitioning. *Operations Research*, Vol. 37, No. 6, pp. 865–892, 1989.
- [12] David S Johnson, Cecilia R Aragon, Lyle A McGeoch, and Catherine Schevon. Optimization by simulated annealing: an experimental evaluation; part II, graph coloring and number partitioning. *Operations Research*, Vol. 39, No. 3, pp. 378–406, 1991.
- [13] Sergei V Isakov, Ilia N Zintchenko, Troels F Rønnow, and Matthias Troyer. Optimised simulated annealing for Ising spin glasses. *Computer Physics Communications*, Vol. 192, pp. 265–271, 2015.
- [14] Masanao Yamaoka, Chihiro Yoshimura, Masato Hayashi, Takuya Okuyama, Hidetaka Aoki, and Hiroyuki Mizuno. A 20k-spin Ising chip to solve combinatorial optimization problems with CMOS

- annealing. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, Vol. 51, No. 1, pp. 303–309, 2016.
- [15] Chihiro Yoshimura, Masato Hayashi, Takuya Okuyama, and Masanao Yamaoka. Implementation and evaluation of FPGA-based annealing processor for Ising model by use of resource sharing. *International Journal of Networking and Computing*, Vol. 7, No. 2, pp. 154–172, 2017.
 - [16] Sanroku Tsukamoto, Motomu Takatsu, Satoshi Matsubara, and Hirotaka Tamura. An accelerator architecture for combinatorial optimization problems. *Fujitsu Scientific and Technical Journal*, Vol. 53, No. 5, pp. 8–13, 2017.
 - [17] Satoshi Matsubara, Hirotaka Tamura, Motomu Takatsu, Danny Yoo, Behraz Vatankhahghadim, Hironobu Yamasaki, Toshiyuki Miyazawa, Sanroku Tsukamoto, Yasuhiro Watanabe, Kazuya Takemoto, et al. Ising-model optimizer with parallel-trial bit-sieve engine. In *Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems: Proceedings of the 11th International Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems (CISIS-2017)*, pp. 432–438. Springer, 2018.
 - [18] Takuya Okuyama, Tomohiro Sonobe, Ken-ichi Kawarabayashi, and Masanao Yamaoka. Binary optimization by momentum annealing. *Physical Review E*, Vol. 100, No. 1, p. 012111, 2019.
 - [19] Maliheh Aramon, Gili Rosenberg, Elisabetta Valiante, Toshiyuki Miyazawa, Hirotaka Tamura, and Helmut G Katzgraber. Physics-inspired optimization for quadratic unconstrained problems using a digital annealer. *Frontiers in Physics*, Vol. 7, p. 48, 2019.
 - [20] Satoshi Matsubara, Motomu Takatsu, Toshiyuki Miyazawa, Takayuki Shibasaki, Yasuhiro Watanabe, Kazuya Takemoto, and Hirotaka Tamura. Digital annealer for high-speed solving of combinatorial optimization problems and its applications. In *2020 25th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC)*, pp. 667–672. IEEE, 2020.
 - [21] Kasho Yamamoto, Kazushi Kawamura, Kota Ando, Normann Mertig, Takashi Takemoto, Masanao Yamaoka, Hiroshi Teramoto, Akira Sakai, Shinya Takamaeda-Yamazaki, and Masato Motomura. STATICA: A 512-spin 0.25 m-weight annealing processor with an all-spin-updates-at-once architecture for combinatorial optimization with complete spin-spin interactions. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, Vol. 56, No. 1, pp. 165–178, 2020.
 - [22] Ernst Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, Vol. 31, No. 1, pp. 253–258, 1925.
 - [23] Francisco Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, Vol. 15, No. 10, p. 3241, 1982.
 - [24] Fred Glover and Eugene Woolsey. Converting the 0-1 polynomial programming problem to a 0-1 linear program. *Operations research*, Vol. 22, No. 1, pp. 180–182, 1974.
 - [25] Gary Kochenberger, Jin-Kao Hao, Fred Glover, Mark Lewis, Zhipeng Lü, Haibo Wang, and Yang Wang. The unconstrained binary quadratic programming problem: a survey. *Journal of combinatorial optimization*, Vol. 28, pp. 58–81, 2014.
 - [26] Andrew Lucas. Ising formulations of many NP problems. *Frontiers in physics*, Vol. 2, p. 5, 2014.
 - [27] Shu Tanaka, Ryo Tamura, and Bikas K. Chakrabarti. *Quantum Spin Glasses, Annealing and Computation*. Cambridge University Press, 2017.
 - [28] Solver Parameters - D-Wave System Documentation. [https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_solver_parameters.html].

- [29] Jonathan Brugger, Christian Seidel, Michael Streif, Filip A Wudarski, Christoph Dittel, and Andreas Buchleitner. Quantum annealing in the presence of disorder. *arXiv preprint arXiv:1808.06817v2*, 2018.
- [30] Takuya Okuyama, Masato Hayashi, and Masanao Yamaoka. An Ising computer based on simulated quantum annealing by path integral Monte Carlo method. In *2017 IEEE international conference on rebooting computing (ICRC)*, pp. 1–6. IEEE, 2017.
- [31] Takashi Takemoto, Masato Hayashi, Chihiro Yoshimura, and Masanao Yamaoka. A $2 \times 30k$ -spin multi-chip scalable CMOS annealing processor based on a processing-in-memory approach for solving large-scale combinatorial optimization problems. *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, Vol. 55, No. 1, pp. 145–156, 2019.
- [32] William Moy, Ibrahim Ahmed, Po-wei Chiu, John Moy, Sachin S Sapatnekar, and Chris H Kim. A 1,968-node coupled ring oscillator circuit for combinatorial optimization problem solving. *Nature Electronics*, Vol. 5, No. 5, pp. 310–317, 2022.
- [33] Paul I Bunyk, Emile M Hoskinson, Mark W Johnson, Elena Tolkacheva, Fabio Altomare, Andrew J Berkley, Richard Harris, Jeremy P Hilton, Trevor Lanting, Anthony J Przybysz, et al. Architectural considerations in the design of a superconducting quantum annealing processor. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, Vol. 24, No. 4, pp. 1–10, 2014.
- [34] Andrew D King, Juan Carrasquilla, Jack Raymond, Isil Ozfidan, Evgeny Andriyash, Andrew Berkley, Mauricio Reis, Trevor Lanting, Richard Harris, Fabio Altomare, et al. Observation of topological phenomena in a programmable lattice of 1,800 qubits. *Nature*, Vol. 560, No. 7719, pp. 456–460, 2018.
- [35] Kelly Boothby, Paul Bunyk, Jack Raymond, and Aidan Roy. Next-generation topology of d-wave quantum processors. *arXiv preprint arXiv:2003.00133*, 2020.
- [36] Catherine McGeoch and Pau Farré. The advantage system: Performance update. In *D-Wave Technical Report Series 14-1054A-A*, 2021. [https://www.dwavesys.com/media/kjtlcemb/14-1054a-a-advantage_system_performance-update.pdf].
- [37] Andrew D King, Jack Raymond, Trevor Lanting, Richard Harris, Alex Zucca, Fabio Altomare, Andrew J Berkley, Kelly Boothby, Sara Ejtemaee, Colin Enderud, et al. Quantum critical dynamics in a 5,000-qubit programmable spin glass. *Nature*, pp. 1–6, 2023.
- [38] Masaaki Maezawa, Kentaro Imafuku, Mutsuo Hidaka, Hanpei Koike, and Shiro Kawabata. Design of quantum annealing machine for prime factoring. In *2017 16th International Superconductive Electronics Conference (ISEC)*, pp. 1–3, 2017.
- [39] Masaaki Maezawa, Go Fujii, Mutsuo Hidaka, Kentaro Imafuku, Katsuya Kikuchi, Hanpei Koike, Kazumasa Makise, Shuichi Nagasawa, Hiroshi Nakagawa, Masahiro Ukibe, and Shiro Kawabata. Toward practical-scale quantum annealing machine for prime factoring. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 88, No. 6, p. 061012, 2019.
- [40] Kasho Yamamoto, Kota Ando, Normann Mertig, Takashi Takemoto, Masanao Yamaoka, Hiroshi Teramoto, Akira Sakai, Shinya Takamaeda-Yamazaki, and Masato Motomura. 7.3 STATICA: A 512-spin 0.25 M-weight full-digital annealing processor with a near-memory all-spin-updates-at-once architecture for combinatorial optimization with complete spin-spin interactions. In *2020*

- IEEE International Solid-State Circuits Conference-(ISSCC)*, pp. 138–140. IEEE, 2020.
- [41] Arnab Das and Bikas K Chakrabarti. *Quantum annealing and related optimization methods*, Vol. 679. Springer Science & Business Media, 2005.
 - [42] Victor Bapst and Guilhem Semerjian. Thermal, quantum and simulated quantum annealing: analytical comparisons for simple models. In *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 473, p. 012011. IOP Publishing, 2013.
 - [43] Elizabeth Crosson and Aram W Harrow. Simulated quantum annealing can be exponentially faster than classical simulated annealing. In *2016 IEEE 57th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)*, pp. 714–723. IEEE, 2016.
 - [44] Hayato Goto, Kosuke Tatsumura, and Alexander R Dixon. Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems. *Science advances*, Vol. 5, No. 4, p. eaav2372, 2019.
 - [45] Kosuke Tatsumura, Alexander R Dixon, and Hayato Goto. FPGA-based simulated bifurcation machine. In *2019 29th International Conference on Field Programmable Logic and Applications (FPL)*, pp. 59–66. IEEE, 2019.
 - [46] Hayato Goto, Kotaro Endo, Masaru Suzuki, Yoshisato Sakai, Taro Kanao, Yohei Hamakawa, Ryo Hidaka, Masaya Yamasaki, and Kosuke Tatsumura. High-performance combinatorial optimization based on classical mechanics. *Science Advances*, Vol. 7, No. 6, p. eabe7953, 2021.
 - [47] Kosuke Tatsumura, Masaya Yamasaki, and Hayato Goto. Scaling out Ising machines using a multi-chip architecture for simulated bifurcation. *Nature Electronics*, Vol. 4, No. 3, pp. 208–217, 2021.
 - [48] Peter L McMahon, Alireza Marandi, Yoshitaka Haribara, Ryan Hamerly, Carsten Langrock, Shuhei Tamate, Takahiro Inagaki, Hiroki Takesue, Shoko Utsunomiya, Kazuyuki Aihara, et al. A fully programmable 100-spin coherent Ising machine with all-to-all connections. *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 614–617, 2016.
 - [49] Takahiro Inagaki, Yoshitaka Haribara, Koji Igarashi, Tomohiro Sonobe, Shuhei Tamate, Toshimori Honjo, Alireza Marandi, Peter L McMahon, Takeshi Umeki, Koji Enbutsu, et al. A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems. *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 603–606, 2016.
 - [50] Toshimori Honjo, Tomohiro Sonobe, Kensuke Inaba, Takahiro Inagaki, Takuya Ikuta, Yasuhiro Yamada, Takushi Kazama, Koji Enbutsu, Takeshi Umeki, Ryoichi Kasahara, et al. 100,000-spin coherent Ising machine. *Science advances*, Vol. 7, No. 40, p. eabh0952, 2021.
 - [51] Harmut Neven, Vasil S Denchev, Marshall Drew-Brook, Jiayong Zhang, William G Macready, and Geordie Rose. NIPS 2009 demonstration: Binary classification using hardware implementation of quantum annealing. *Quantum*, Vol. 4, p. 1, 2009.
 - [52] Mohammad H Amin. Searching for quantum speedup in quasistatic quantum annealers. *Physical Review A*, Vol. 92, No. 5, p. 052323, 2015.
 - [53] Mohammad H Amin, Evgeny Andriyash, Jason Rolfe, Bohdan Kulchytskyy, and Roger Melko. Quantum boltzmann machine. *Physical Review X*, Vol. 8, No. 2, p. 021050, 2018.
 - [54] Daniel O’ Malley, Velimir V Vesselinov, Boian S Alexandrov, Ludmil B Alexandrov. Nonnegative/binary matrix factorization with a D-Wave quantum annealer. *PloS one*, Vol. 13, No. 12, p.

- e0206653, 2018.
- [55] Koki Kitai, Jiang Guo, Shenghong Ju, Shu Tanaka, Koji Tsuda, Junichiro Shiomi, and Ryo Tamura. Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines. *Physical Review Research*, Vol. 2, No. 1, p. 013319, 2020.
 - [56] Keishu Utimula, Tom Ichibha, Genki I Prayogo, Kenta Hongo, Kousuke Nakano, and Ryo Maezono. A quantum annealing approach to ionic diffusion in solids. *Scientific Reports*, Vol. 11, No. 1, 2021.
 - [57] Takuya Inoue, Yuya Seki, Shu Tanaka, Nozomu Togawa, Kenji Ishizaki, and Susumu Noda. Towards optimization of photonic-crystal surface-emitting lasers via quantum annealing. *Optics Express*, Vol. 30, No. 24, pp. 43503–43512, 2022.
 - [58] Katsuhiko Endo, Yoshiki Matsuda, Shu Tanaka, and Mayu Muramatsu. A phase-field model by an Ising machine and its application to the phase-separation structure of a diblock polymer. *Scientific Reports*, Vol. 12, No. 1, p. 10794, 2022.
 - [59] Hiroshi Sampei, Koki Saegusa, Kenshin Chishima, Takuma Higo, Shu Tanaka, Yoshihiro Yayama, Makoto Nakamura, Koichi Kimura, and Yasushi Sekine. Quantum annealing boosts prediction of multimolecular adsorption on solid surfaces avoiding combinatorial explosion. *JACS Au*, Vol. 3, pp. 991–996, 2023.
 - [60] Andrejs Tucs, Francois Berenger, Akiko Yumoto, Ryo Tamura, Takanori Uzawa, and Koji Tsuda. Quantum annealing designs nonhemolytic antimicrobial peptides in a discrete latent space. *ACS Medicinal Chemistry Letters*, Vol. 14, No. 5, pp. 577–582, 2023.
 - [61] Kan Hatakeyama-Sato, Yasuei Uchima, Takahiro Kashikawa, Koichi Kimura, and Kenichi Oyazui. Extracting higher-conductivity designs for solid polymer electrolytes by quantum-inspired annealing. *RSC advances*, Vol. 13, No. 21, pp. 14651–14659, 2023.
 - [62] Gili Rosenberg, Poya Haghnegahdar, Phil Goddard, Peter Carr, Kesheng Wu, and Marcos López De Prado. Solving the optimal trading trajectory problem using a quantum annealer. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, Vol. 10, No. 6, pp. 1053–1060, 2016.
 - [63] Kotaro Tanahashi, Shinichi Takayanagi, Tomomitsu Motohashi, and Shu Tanaka. Application of Ising machines and a software development for Ising machines. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 88, No. 6, p. 061010, 2019.
 - [64] Alejandro Perdomo-Ortiz, Neil Dickson, Marshall Drew-Brook, Geordie Rose, and Alán Aspuru-Guzik. Finding low-energy conformations of lattice protein models by quantum annealing. *Scientific Reports*, Vol. 2, No. 1, pp. 1–7, 2012.
 - [65] Florian Neukart, Gabriele Compostella, Christian Seidel, David Von Dollen, Sheir Yarkoni, and Bob Parney. Traffic flow optimization using a quantum annealer. *Frontiers in ICT*, Vol. 4, p. 29, 2017.
 - [66] Hirotaka Irie, Goragot Wongpaisarnsin, Masayoshi Terabe, Akira Miki, and Shinichirou Taguchi. Quantum annealing of vehicle routing problem with time, state and capacity. In *International Workshop on Quantum Technology and Optimization Problems*, p. 145. Springer, 2019.
 - [67] Siya Bao, Masashi Tawada, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. An approach to the vehicle routing problem with balanced pick-up using Ising machines. In *2021 International Symposium on VLSI Design, Automation and Test (VLSI-DAT)*, 2021.

- [68] Siya Bao, Masashi Tawada, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. Multi-day travel planning using Ising machines for real-world applications. In *2021 IEEE International Intelligent Transportation Systems Conference (ITSC)*, p. 3704, 2021.
- [69] Yosuke Mukasa, Tomoya Wakaizumi, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. An Ising machine-based solver for visiting-route recommendation problems in amusement parks. *IEICE Transactions on Information and Systems*, Vol. 104, No. 10, pp. 1592–1600, 2021.
- [70] Soshun Naito, Yoshihiko Hasegawa, Yoshiki Matsuda, and Shu Tanaka. ISAAQ: Ising machine assisted quantum compiler. *arXiv:2303.02830*.
- [71] Syun Izawa, Koki Kitai, Shu Tanaka, Ryo Tamura, and Koji Tsuda. Continuous black-box optimization with an Ising machine and random subspace coding. *Physical Review Research*, Vol. 4, No. 2, p. 023062, 2022.
- [72] Yuya Seki, Ryo Tamura, and Shu Tanaka. Black-box optimization for integer-variable problems using Ising machines and factorization machines. *arXiv:2209.01016*.
- [73] Fixstars Amplify Annealing Engine: Fixstars Amplify. [<https://amplify.fixstars.com/en/>].
- [74] Daisuke Oku, Masashi Tawada, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. How to reduce the bit-width of an Ising model by adding auxiliary spins. *IEEE Transactions on Computers*, Vol. 71, No. 1, pp. 223–234, 2020.
- [75] Yuta Yachi, Yousuke Mukasa, Masashi Tawada, and Nozomu Togawa. Efficient coefficient bit-width reduction method for Ising machines. In *2022 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE)*, pp. 01–06. IEEE, 2022.
- [76] Yuta Yachi, Masashi Tawada, and Nozomu Togawa. An efficient combined bit-width reducing method for Ising models. *IEICE Transactions on Information and Systems*, Vol. 106, No. 4, pp. 495–508, 2023.
- [77] Vicky Choi. Minor-embedding in adiabatic quantum computation: I. the parameter setting problem. *Quantum Information Processing*, Vol. 7, pp. 193–209, 2008.
- [78] Vicky Choi. Minor-embedding in adiabatic quantum computation: II. minor-universal graph design. *Quantum Information Processing*, Vol. 10, No. 3, pp. 343–353, 2011.
- [79] Jun Cai, William G Macready, and Aidan Roy. A practical heuristic for finding graph minors. *arXiv preprint arXiv:1406.2741*, 2014.
- [80] Christine Klymko, Blair D Sullivan, and Travis S Humble. Adiabatic quantum programming: minor embedding with hard faults. *Quantum information processing*, Vol. 13, pp. 709–729, 2014.
- [81] Alejandro Perdomo-Ortiz, Joseph Fluegemann, Rupak Biswas, and Vadim N Smelyanskiy. A performance estimator for quantum annealers: Gauge selection and parameter setting. *arXiv preprint arXiv:1503.01083*, 2015.
- [82] Tomas Boothby, Andrew D King, and Aidan Roy. Fast clique minor generation in Chimera qubit connectivity graphs. *Quantum Information Processing*, Vol. 15, pp. 495–508, 2016.
- [83] Takuya Okuyama, Chihiro Yoshimura, Masato Hayashi, Saki Tanaka, and Masanao Yamaoka. Contractive graph-minor embedding for CMOS Ising computer. *IEICE Technical Report; IEICE Tech. Rep.*, Vol. 116, No. 116, pp. 97–103, 2016.
- [84] Arman Zaribafian, Dominic JJ Marchand, and Seyed Saeed Changiz Rezaei. Systematic and

- deterministic graph minor embedding for cartesian products of graphs. *Quantum Information Processing*, Vol. 16, No. 5, p. 136, 2017.
- [85] Kathleen E Hamilton and Travis S Humble. Identifying the minor set cover of dense connected bipartite graphs via random matching edge sets. *Quantum Information Processing*, Vol. 16, No. 4, p. 94, 2017.
 - [86] Timothy D Goodrich, Blair D Sullivan, and Travis S Humble. Optimizing adiabatic quantum program compilation using a graph-theoretic framework. *Quantum Information Processing*, Vol. 17, pp. 1–26, 2018.
 - [87] Richard Harris, Yuki Sato, Andrew J Berkley, M Reis, Fabio Altomare, MH Amin, Kelly Boothby, P Bunyk, C Deng, Colin Enderud, et al. Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator. *Science*, Vol. 361, No. 6398, pp. 162–165, 2018.
 - [88] Daisuke Oku, Kotaro Terada, Masato Hayashi, Masanao Yamaoka, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. A fully-connected Ising model embedding method and its evaluation for CMOS annealing machines. *IEICE Transactions on Information and Systems*, Vol. 102, No. 9, pp. 1696–1706, 2019.
 - [89] Nike Dattani and Nick Chancellor. Embedding quadratization gadgets on Chimera and Pegasus graphs. *arXiv preprint arXiv:1901.07676*, 2019.
 - [90] Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe, and Shinichiro Taguchi. Improving solutions by embedding larger subproblems in a D-Wave quantum annealer. *Scientific Reports*, Vol. 9, No. 1, p. 2098, 2019.
 - [91] Tatsuhiko Shirai, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. Guiding principle for minor-embedding in simulated-annealing-based Ising machines. *IEEE Access*, Vol. 8, pp. 210490–210502, 2020.
 - [92] Yuya Sugie, Yuki Yoshida, Normann Mertig, Takashi Takemoto, Hiroshi Teramoto, Atsuyoshi Nakamura, Ichigaku Takigawa, Shin-ichi Minato, Masanao Yamaoka, and Tamiki Komatsuzaki. Minor-embedding heuristics for large-scale annealing processors with sparse hardware graphs of up to 102,400 nodes. *Soft Computing*, Vol. 25, pp. 1731–1749, 2021.
 - [93] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo N Djidjev. Solving larger maximum clique problems using parallel quantum annealing. *Quantum Information Processing*, Vol. 22, No. 5, p. 219, 2023.
 - [94] Elijah Pelofske. 4-clique network minor embedding for quantum annealers. *arXiv preprint arXiv:2301.08807*, 2023.
 - [95] Zhengbing Bian, Fabian Chudak, Robert Brian Israel, Brad Lackey, William G Macready, and Aidan Roy. Mapping constrained optimization problems to quantum annealing with application to fault diagnosis. *Frontiers in ICT*, p. 14, 2016.
 - [96] Zhengbing Bian, Fabian Chudak, Robert Israel, Brad Lackey, William G Macready, and Aidan Roy. Discrete optimization using quantum annealing on sparse Ising models. *Frontiers in Physics*, Vol. 2, p. 56, 2014.
 - [97] Gili Rosenberg, Mohammad Vazifeh, Brad Woods, and Eldad Haber. Building an iterative heuristic solver for a quantum annealer. *Computational Optimization and Applications*, Vol. 65, pp. 845–869, 2016.
 - [98] Michel Booth, Steven P. Reinhardt, and Aidan Roy. Partitioning optimization problems for hybrid classical/quantum execution. In *D-Wave Technical Report Series 14-1006A-A*, 2017.

- [<https://docs.ocean.dwavesys.com/projects/qbsolv/en/latest/index.html>].
- [99] Hamed Karimi, Gili Rosenberg, and Helmut G Katzgraber. Effective optimization using sample persistence: A case study on quantum annealers and various Monte Carlo optimization methods. *Physical Review E*, Vol. 96, No. 4, p. 043312, 2017.
 - [100] Hamed Karimi and Gili Rosenberg. Boosting quantum annealer performance via sample persistence. *Quantum Information Processing*, Vol. 16, No. 7, p. 166, 2017.
 - [101] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo Djidjev. Solving large minimum vertex cover problems on a quantum annealer. In *Proceedings of the 16th ACM International Conference on Computing Frontiers*, pp. 76–84, 2019.
 - [102] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo Djidjev. Solving large maximum clique problems on a quantum annealer. In *Quantum Technology and Optimization Problems: First International Workshop, QTOP 2019, Munich, Germany, March 18, 2019, Proceedings 1*, pp. 123–135. Springer, 2019.
 - [103] Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, and Shinichiro Taguchi. Efficient partition of integer optimization problems with one-hot encoding. *Scientific Reports*, Vol. 9, No. 1, p. 13036, 2019.
 - [104] Hiroataka Irie, Haozhao Liang, Takumi Doi, Shinya Gongyo, and Tetsuo Hatsuda. Hybrid quantum annealing via molecular dynamics. *Scientific Reports*, Vol. 11, No. 1, p. 8426, 2021.
 - [105] Yuta Atobe, Masashi Tawada, and Nozomu Togawa. Hybrid annealing method based on subQUBO model extraction with multiple solution instances. *IEEE Transactions on Computers*, Vol. 71, No. 10, pp. 2606–2619, 2021.
 - [106] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo Djidjev. Decomposition algorithms for solving NP-hard problems on a quantum annealer. *Journal of Signal Processing Systems*, Vol. 93, pp. 405–420, 2021.
 - [107] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo N Djidjev. Parallel quantum annealing. *Scientific Reports*, Vol. 12, No. 1, p. 4499, 2022.
 - [108] Taisei Takabayashi and Masayuki Ohzeki. Hybrid algorithm of linear programming relaxation and quantum annealing. *arXiv preprint arXiv:2308.10765*, 2023.
 - [109] Tatsuya Noguchi, Keisuke Fukada, Siya Bao, and Nozomu Togawa. Trip planning based on sub-QUBO annealing. *IEEE Access*, 2023.
 - [110] Richard M. Karp. Reducibility among combinatorial problems. In Raymond. E. Miller, James W. Thatcher, and Jean D. Bohlinger, editors, *Complexity of Computer Computations*, The IBM Research Symposia Series, Boston, MA, 1972. Springer.
 - [111] D Wave System Documentation. Error sources for problem representation. [https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_qpu_ice.html].
 - [112] Victor Martin-Mayor and Itay Hen. Unraveling quantum annealers using classical hardness. *Scientific Reports*, Vol. 5, No. 1, p. 15324, 2015.
 - [113] Kevin C Young, Robin Blume-Kohout, and Daniel A Lidar. Adiabatic quantum optimization with the wrong Hamiltonian. *Physical Review A*, Vol. 88, No. 6, p. 062314, 2013.
 - [114] Kristen L Pudenz, Tameem Albash, and Daniel A Lidar. Error-corrected quantum annealing with hundreds of qubits. *Nature communications*, Vol. 5, No. 1, p. 3243, 2014.
 - [115] Davide Pierangeli, Giulia Marcucci, and Claudio Conti. Large-scale photonic Ising machine by

- spatial light modulation. *Physical review letters*, Vol. 122, No. 21, p. 213902, 2019.
- [116] James King, Sheir Yarkoni, Mayssam M Nevisi, Jeremy P Hilton, and Catherine C McGeoch. Benchmarking a quantum annealing processor with the time-to-target metric. *arXiv preprint arXiv:1508.05087*, 2015.
 - [117] Neil Robertson and Paul D Seymour. Graph minors. xiii. the disjoint paths problem. *Journal of combinatorial theory, Series B*, Vol. 63, No. 1, pp. 65–110, 1995.
 - [118] Catherine McGeoch and Pau Farré. The D-wave advantage system: An overview. In *D-Wave Technical Report Series 14-1049A-A*, 2020. [https://www.dwavesys.com/media/s3qbjp3s/14-1049a-a_the_d-wave_advantage_system_an_overview.pdf].
 - [119] Catherine McGeoch, Pau Farré, and Kelly Boothby. The D-wave advantage2 protptype. In *D-Wave Technical Report Series 14-1063A-A*, 2022. [https://www.dwavesys.com/media/eixhdtpa/14-1063a-a_the_d-wave_advantage2_prototype-4.pdf].
 - [120] Fred Glover. Future paths for integer programming and links to artificial intelligence. *Computers & operations research*, Vol. 13, No. 5, pp. 533–549, 1986.
 - [121] Fred Glover. Tabu search—part i. *ORSA Journal on computing*, Vol. 1, No. 3, pp. 190–206, 1989.
 - [122] Fred Glover. Tabu search—part ii. *ORSA Journal on computing*, Vol. 2, No. 1, pp. 4–32, 1990.
 - [123] Fred Glover, Gary A Kochenberger, and Bahram Alidaee. Adaptive memory tabu search for binary quadratic programs. *Management Science*, Vol. 44, No. 3, pp. 336–345, 1998.
 - [124] Dominik Marx and Jürg Hutter. *Ab initio molecular dynamics: basic theory and advanced methods*. Cambridge University Press, 2009.
 - [125] George Dantzig. *Linear programming and extensions*. Princeton university press, 1963.
 - [126] Frank R Kschischang, Brendan J Frey, and H-A Loeliger. Factor graphs and the sum-product algorithm. *IEEE Transactions on information theory*, Vol. 47, No. 2, pp. 498–519, 2001.
 - [127] Dimitri Bertsekas. *Nonlinear programming*. Athena scientific, 1995.
 - [128] Laurence A Wolsey. *Integer programming*. John Wiley & Sons, 1998.
 - [129] Simon Gravel and Veit Elser. Divide and concur: A general approach to constraint satisfaction. *Physical Review E*, Vol. 78, p. 036706, Sep 2008.
 - [130] Tatsuhiko Shirai and Nozomu Togawa. Spin-variable reduction method for handling linear equality constraints in Ising machines. *IEEE Transactions on Computers*, 2023.
 - [131] Nicholas Metropolis, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 21, No. 6, pp. 1087–1092, 1953.
 - [132] W Keith Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, Vol. 57, No. 1, pp. 97–109, 1970.
 - [133] Roy J Glauber. Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 4, No. 2, pp. 294–307, 1963.
 - [134] Stuart Geman and Donald Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Vol. PAMI-6, No. 6, pp. 721–741, 1984.
 - [135] Tosio Kato. On the adiabatic theorem of quantum mechanics. *Journal of the Physical Society of*

- Japan*, Vol. 5, No. 6, pp. 435–439, 1950.
- [136] Chihiro Yoshimura, Masato Hayashi, Takashi Takemoto, and Masanao Yamaoka. CMOS annealing machine: A domain-specific architecture for combinatorial optimization problem. In *2020 25th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC)*, pp. 673–678. IEEE, 2020.
 - [137] Robert H Swendsen and Jian-Sheng Wang. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses. *Physical Review Letters*, Vol. 57, No. 21, p. 2607, 1986.
 - [138] Koji Hukushima and Koji Nemoto. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 65, No. 6, pp. 1604–1608, 1996.
 - [139] David J Earl and Michael W Deem. Parallel tempering: Theory, applications, and new perspectives. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 7, No. 23, pp. 3910–3916, 2005.
 - [140] Helmut G Katzgraber, Simon Trebst, David A Huse, and Matthias Troyer. Feedback-optimized parallel tempering Monte Carlo. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, Vol. 2006, No. 03, p. P03018, 2006.
 - [141] Hayato Goto. Bifurcation-based adiabatic quantum computation with a nonlinear oscillator network. *Scientific reports*, Vol. 6, No. 1, p. 21686, 2016.
 - [142] Hayato Goto. Quantum computation based on quantum adiabatic bifurcations of Kerr-nonlinear parametric oscillators. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 88, No. 6, p. 061015, 2019.
 - [143] Paolo Dai Pra, Benedetto Scoppola, and Elisabetta Scoppola. Sampling from a Gibbs measure with pair interaction by means of PCA. *Journal of Statistical Physics*, Vol. 149, pp. 722–737, 2012.
 - [144] Kelly Boothby, Andrew D King, and Jack Raymond. Zephyr topology of D-Wave quantum processors. In *D-Wave Technical Report Series 14-1056A-A*, 2021. [https://www.dwavesys.com/media/2uznec4s/14-1056a-a-zephyr_topology_of-d-wave-quantum_processors.pdf].
 - [145] Seiji Miyashita, Shu Tanaka, and Masaki Hirano. Nonmonotonic relaxation in systems with reentrant-type interaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 76, No. 8, pp. 083001–083001, 2007.
 - [146] Shu Tanaka and Seiji Miyashita. Mechanism of slow relaxation due to screening effect in a frustrated system. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 78, No. 8, p. 084002, 2009.
 - [147] Shu Tanaka and Seiji Miyashita. Nonmonotonic dynamics in a frustrated Ising model with time-dependent transverse field. *Physical Review E*, Vol. 81, No. 5, p. 051138, 2010.
 - [148] Lester Ingber. Simulated annealing: Practice versus theory. *Mathematical and computer modelling*, Vol. 18, No. 11, pp. 29–57, 1993.
 - [149] Yoshitaka Haribara, Hitoshi Ishikawa, Shoko Utsunomiya, Kazuyuki Aihara, and Yoshihisa Yamamoto. Performance evaluation of coherent Ising machines against classical neural networks. *Quantum Science and Technology*, Vol. 2, No. 4, p. 044002, 2017.
 - [150] Yosuke Mukasa, Shu Tanaka, and Nozomu Togawa. Experimental evaluations of parallel tempering on an Ising machine. *IPJS Transactions on System and LSI Design Methodology*, Vol. 14, pp. 27–29, 2021.
 - [151] Tomoya Kashimata, Masaya Yamasaki, Ryo Hidaka, and Kosuke Tatsumura. Efficient and scalable architecture for multiple-chip implementation of simulated bifurcation machines. *arXiv preprint*

- arXiv:2311.17370*, 2023.
- [152] Robin Brown, Davide Venturelli, Marco Pavone, and David E Bernal Neira. Accelerating continuous variable coherent Ising machines via momentum. *arXiv preprint arXiv:2401.12135*, 2024.
- [153] D Wave System Documentation. Operation and timing. [https://docs.dwavesys.com/docs/latest/c_qpu_timing.html].
- [154] J Robert Johansson, Paul D Nation, and Franco Nori. QuTiP: An open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, Vol. 183, No. 8, pp. 1760–1772, 2012.
- [155] J Robert Johansson, Paul D Nation, and Franco Nori. QuTiP 2: A Python framework for the dynamics of open quantum systems. *Computer Physics Communications*, Vol. 184, No. 4, pp. 1234–1240, 2013.