組合せ最適化計算エンジンの開発

株式会社富士通研究所　デジタルアニーラプロジェクト 技術開発グループ マネージャー　柴崎（しばさき）　崇之（たかゆき）

1. はじめに

半導体集積回路のスケーリングによる性能向上は鈍化しており、あと数年で実質的に停止すると言われている[1]。スケーリングによらない性能向上として、特定ドメインに特化したハードウェアの専用化によって性能を向上させることが可能である。しかしながら、専用化の度合いを高くし過ぎると適用領域が狭くなり、開発費の回収が困難になるという課題がある。したがって、可能な限り広い領域に適用可能なドメインにフォーカスすることが大切である。

様々な組合せの中から最適な組合せを選びたいという要求は様々な分野で存在する。一般に組合せ最適化問題では問題の規模の増加に伴い計算時間が急速に大きくなるため、従来のコンピュータでは扱える規模に限界があった。そこで、我々は組合せ最適化問題を解く最適化計算エンジンであるデジタルアニーラの開発を行っている。本稿では、デジタルアニーラのアーキテクチャー及び高速化技術や大規模化技術に関して紹介する。

2. デジタルアニーラのアーキテクチャー

2.1　イジング型エネルギー関数による探索手法

デジタルアニーラはマルコフ連鎖モンテカルロ法（Markov-Chain Monte-Carlo method, MCMC）に基づく統計的探索を並列に行うことで、以下の式（1）によって示されるイジング型エネルギー関数を高速に最小化する。

$$E(X) = -(1/2)\,\Sigma_{i,j} W_{ij} x_i x_j - \Sigma_i b_i x_i \qquad (1)$$

$$x_i \in \{0, 1\}\ (i=1, 2, \cdots, N),\ W_{ii}=0,\ W_{ij}=W_{ji}$$

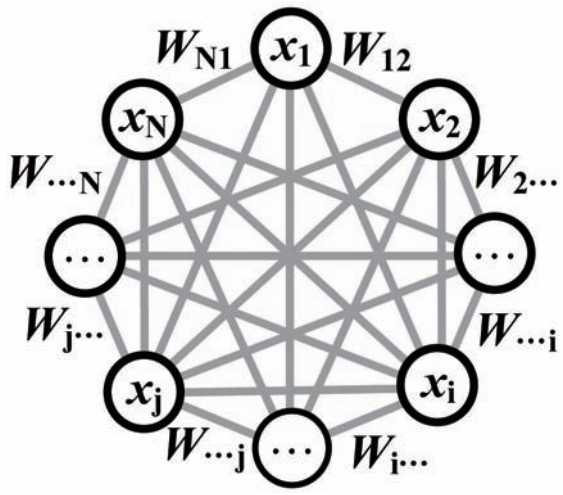
ここで、Xはビットの組であり、$X=(x_1, x_2, \cdots, x_N)$である。$N$個のビット値$x_i$, (i=1, 2, …, N) によって、組合せを表現している。W_{ij}はビットiとビットj間の結合係数、b_iは各ビットに対するバイアス項である。デジタルアニーラは全てのビット間の相互作用を表現可能な全結合アーキテクチャーであるという特徴を有している（図1）。

2.2　並列試行による高速化

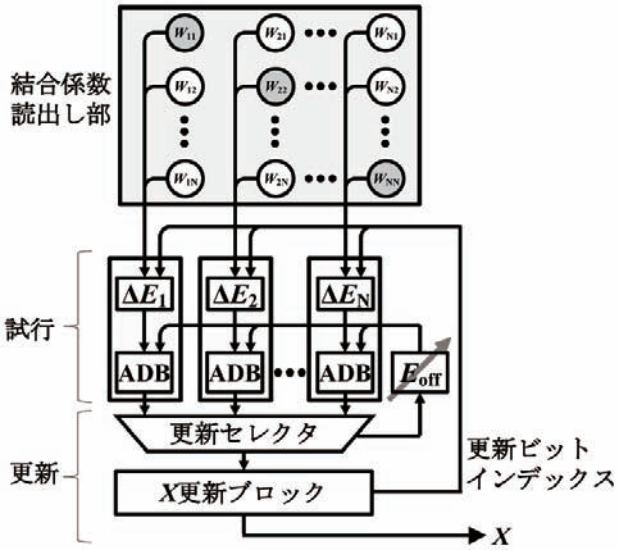
デジタルアニーラの動作サイクルとしては、受け入れ基準を満たすようなビット反転を選ぶ試行フェーズと、選出されたビットを反転する更新フェーズの2つに分けられる（図2）。

試行フェーズでは、現行のビットの組$X=(x_1, x_2, \cdots, x_N)$から1つのビット値$x_i$を$1-x_i$に反転させることによって得られる$N$個の隣接状態$X^{(i)}$に着目する。現在の状態$X$から隣接状態$X^{(i)}$に移行することで得られるエネルギー$E(X)$の増加を$\Delta E_i$とし、式（2）で与えられるMetropolis-Hastingsの基準を用いてビット反転の受け入れ可否を決定する。

$$A(\Delta E_i) = min\,[1, exp(-\beta \Delta E_i)] \qquad (2)$$



■図1.　全結合構造の模式図



■図2.　デジタルアニーラの構成

ここで$A(\Delta E_i)$はビットx_iが$1-x_i$に反転された場合のエネルギー変化がΔE_iである場合の反転受け入れ確率であり、β $(=1/T)$はシミュレーテッドアニーリング法で使われる温度Tの逆数である。各ビットごとに設けた受け入れ決定ブロック（ADB：Acceptance Decision Block）により、各状態変化に対するΔE_iの値と適切な値を取る乱数（ノイズ）との比較を行うことにより、式(2)の受け入れ確率で値1を取る2値フラグを出力する。この2値フラグの値が1であることは、対応するビットの反転を行ってよいことを表す。最終的には、2値フラグの値が1のものから反転するビット1個を更新セレクタを使って選ぶ。もし更新可能なビットの候補がない場合にはセレクタがフラグ値0を出力する。

ここで、並列試行が従来のMCMCに比較して高速であることを示す。系が状態Xにあり、通常のMCMCの単一試行の場合に、何らかの新しい状態に移行できる確率をP_{single}とする。このとき隣接状態$X^{(i)}$に移行したときのエネルギー増加をΔE_iとするとP_{single}は式(2)の遷移受け入れ確率を用いて

$$P_{single}=(1/N)\Sigma_{i=1}^{N}A(\Delta E_i) \quad (3)$$

で与えられる。特定のビットiが選ばれる確率は一様に$1/N$、そのビットが選ばれたときに反転できる確率が$A(\Delta E_i)$であり、どのビットでもよいから反転できる確率が式(3)となる。

デジタルアニーラの並列試行で新しい状態に移行する確率$P_{parallel}$を求める。ここでは式(3)の確率でNビットの中から1つだけ選ぶ選択規則を使うとする。最適解に近づいてきて遷移先の状態を発見する確率が小さくなり$A(\Delta E_i)\ll 1$ $(i=1, 2, \cdots, N)$となった場合を考えると

$$P_{parallel}=1-\Pi_{i=1}^{N}(1-A(\Delta E_i)) \cong \Sigma_{i=1}^{N}A(\Delta E_i)=N\cdot P_{single} \quad (4)$$

となる。式(4)は並列試行の方が単一探索に比較して新しい状態に遷移する確率がN倍となることを示す。また、この手法は、複数のビットを並行して更新する並列試行とは異なり、収束性に問題が発生しない利点がある。

2.3　オフセット付加による高速化

イジング型エネルギー関数の極小値（Local Minimum）に系の状態が陥った場合、そこから抜け出て別の状態に移行する確率は、並列試行を用いてもかなり低くなる可能性がある。その場合には，系は何サイクルもの間、同じ極小値にとどまり、収束に時間がかかるようになる。

極小値に滞在する時間を減らすために、エネルギーの増加分から正のオフセットE_{off}を減算する手段を入れた。これは、共通の因子$\exp(\beta\cdot E_{off})>1$を状態反転の受け入れ確率に乗じたこととほぼ等価である。これを実行するために、新しい反転ビット候補が見つからない場合に オフセット発生器を用いて一定の増分値をオフセットに加えていく。オフセットの増加は、次の状態が見つかるまで続く。この方法により、オフセットの値は次の状態反転先が見つかる確率が1になるようにダイナミックに制御され、極小値にとどまる時間が短縮される。

2.4　交換モンテカルロ法

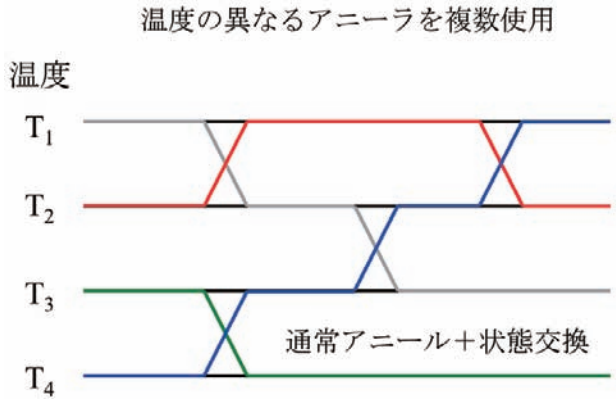
確率的な探索では複数レプリカを使った様々な高速化手法がある。これらの方法のうち、最も単純なものが単純並列動作である。単純並列動作は複数のレプリカに同じ問題を与えて統計的に独立に探索するものである。M個のレプリカを動作させ、得られた状態ベクトルで最も低い目的関数（エネルギー）を与えるものを解とすると、レプリカごとにあるサイクル数アニールした場合の個々のレプリカの正解率をP_0とするとM個全体での正解率$P_{total}(M)$は

$$P_{total}(M)=1-(1-P_0)^M \quad (5)$$

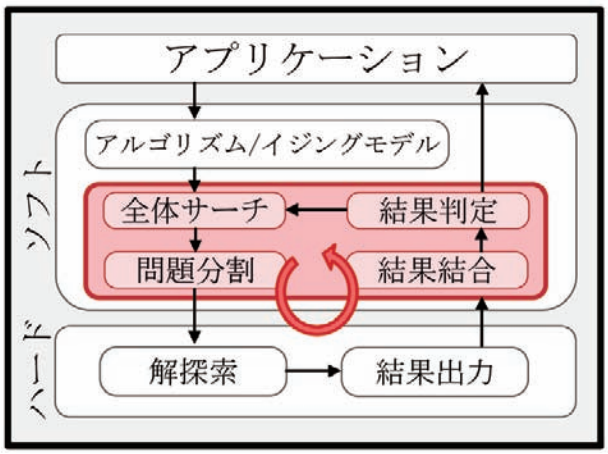
で与えられる。全体での正解率$P_{total}(k)$を99%とするために必要な個々のレプリカの正解率P_0は、M=1ではP_0=0.99、M=10ではP_0=0.37、M=100ではP_0=0.045となる。個々のアニールブロックの目標正解率が小さくてよい分、正解を得るために必要な時間（サイクル数）が短くなる。

シミュレーテッドアニーリング法では温度を下げていくと状態ベクトルが局所的な最小値付近に停滞し、真の解への到達が遅くなるという深刻な問題がある。これはシミュレーテッドアニーリング法の遅い緩和の問題として知られている[2]。デジタルアニーラは平均試行時間を短縮することで高速化を行っているが、遅い緩和を本質的に解決しているわけではない。また単純並列動作でも遅い緩和の問題そのものは解決できない。

統計物理の分野では、1990年代中頃より遅い緩和の問題を解決するための様々な手法が考案された。それらの方法は、パラメータ（例えば温度等）が異なる複数の統計的集団（レプリカ）を用いて確率的探索を行う。複数のレプリカを使う方法の1つに交換モンテカルロ法[3]がある。交換モンテカルロ法では、温度の異なる$(T_1>T_2>\cdots>T_{Ne})$レプリカをM個用意し、それぞれで確率的探索を行う。隣接した温度のレプリカ間ではある条件（Metropolis流の規則を用いる）で状態ベクトルの交換を行う。状態の交換をすることで、温度の低い（遅い緩和に陥りやすい）レプリカと温



■図3.　交換モンテカルロ法による確率的探索



■図4.　問題分割手法

度の高い（遅い緩和の問題のない易しい）レプリカとの間に道を付けることができ、全体として遅い緩和の問題が解決できる（図3）。デジタルアニーラでは、単純並列動作及び交換モンテカルロ法の両方の機能をサポートしている。

3.　大規模化

3.1　大規模化に向けた取組み

デジタルアニーラの適用領域拡大のためには、より大規模な問題への対応が求められている。そこで、我々はハードウェアとソフトウェアの両面から大規模化のための技術開発を継続して行っている。現在の第1世代のデジタルアニーラのハードウェアで取り扱えるビット数Nは1,024ビットである。まず、第2世代のデジタルアニーラではハードウェアが8,192ビットまで拡張される。さらに、ソフトウェアによる問題を分割して解く技術を組み合わせることで、ハードウェアの規模よりも大きな問題を扱うことが可能となり、適用範囲を拡大することが可能である。

3.2　問題分割技術

大規模な問題をハードウェアに入力可能な規模に単純に分割し、分割した問題をそれぞれ最適化したとしても全体の最適化にはならない。なぜなら、分割した部分問題間に相互関係があるため、一方を最適化した時に他方にも影響があるためである。ここで、問題の一部分を抽出し、抽出していない箇所の状態は固定し、抽出した箇所のみを最適化することで部分的な最適化は可能だが、適切な箇所を抽出しなければ十分な効果を得ることはできない。

今回、ハードウェアで処理可能な規模よりも大きな問題を取り扱う技術を開発した。第2世代のデジタルアニーラに本技術を適用することで、10万ビット規模の問題への適用が可能となる。

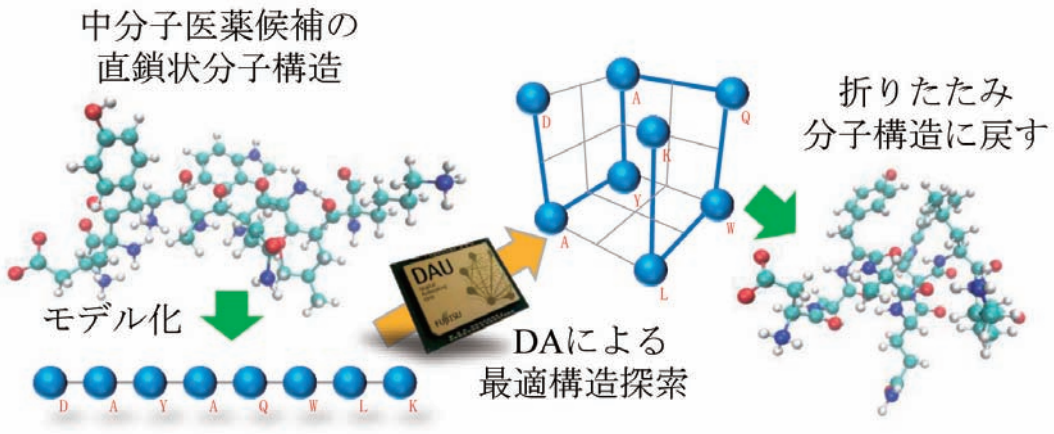
まず、問題全体に対して短時間の全体サーチを行い、初期解を求める。その後、ハードウェアに入力可能な規模に問題の一部を抽出し、抽出部分についてデジタルアニーラにより解の探索を行う。その結果を全体に戻すというフローを、抽出箇所を変えながら複数回行うことで、大規模問題に対して解を導き出す（図4）。

問題全体の最適化効率を上げるためには、問題の特性に応じてどの部分を抽出するかが重要である。そこで問題の関係性に着目し、問題全体の中で変化のしやすい要素を中心に抽出する方法や要素間の結合が小さい箇所を分割する方法など、複数の分割方式を開発した。問題に応じて適した分割方式を選択することにより、大規模な問題に対して効率のよい解探索が可能となる。

3.3　安定構造探索問題への適用

今回、中分子医薬候補の安定構造を求めるシミュレーションにおいて、問題分割技術を用いたデジタルアニーラによって、大規模な問題へと適用可能であることを確認したので、これを紹介する（図5）。

中分子創薬では、数個～50個程のアミノ酸が鎖状につながった中分子医薬候補が、標的となるタンパク質と強固に結合することで、薬としての効果が発揮される。まず、各アミノ酸をモデル化し格子点上に配置した場合にどの構造が最も安定的かを、アミノ酸同士の結合関係などからデジタルアニーラを用いて探索する。そして、探索されたアミノ酸の構造と標的タンパク質との結合の強さをドッキング計算で調べる。このフローを、1,000回程繰り返すことで、薬効の高い中分子医薬候補を探索する。

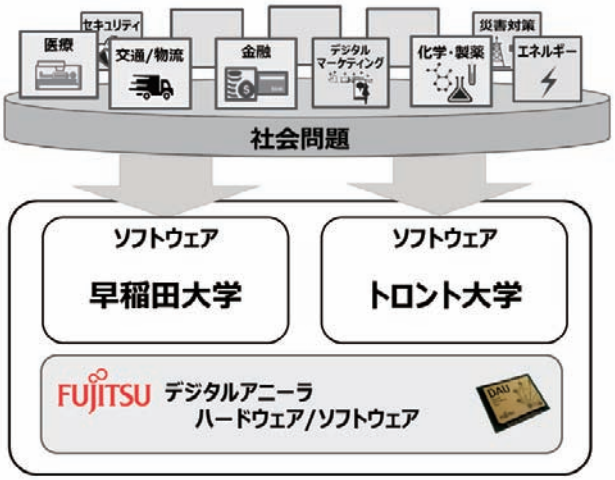


■図5. 安定構造探索問題への適用方法

今回、問題分割技術を第2世代のデジタルアニーラに適用することで、中分子医薬候補としてアミノ酸48個規模（30Kビット規模）の中分子医薬候補に対し、アミノ酸をモデル化する同じ手法を用いて計算した従来のコンピュータでは数時間かかっていたシミュレーション時間を数分に短縮することができた。デジタルアニーラに開発技術を適用することで、次世代の薬として注目を集める中分子医薬の開発を加速することが期待される。

4. 応用分野の拡大

実社会の様々な分野における組合せ最適化問題にデジタルアニーラを適用していくためには、それぞれの分野の専門家と共に実問題に適用するためのソフトウェア開発が必要である。そこで、2017年に富士通と量子コンピューティング用アプリケーション開発に優れている1QB Information Technologies Inc.（本社：カナダ　バンクーバー市）は協業を開始し、アプリケーション開発の基盤を構築した。そして同年、富士通研究所とトロント大学は戦略的パートナーシップを締結し研究拠点をトロントに設立した。さらに、2018年には早稲田大学とデジタルアニーラに関する包括的連携活動協定を締結し、共同研究拠点を設立した（図6）。今後、共同研究で得られた成果は富士通のデジタルアニーラ事業に取り込み、実社会の問題解決を促進し、社会や経済に貢献していく。



■図6. デジタルアニーラコミュニティ

5. おわりに

本稿では、組合せ最適化問題を解く最適化計算エンジンであるデジタルアニーラのアーキテクチャー、高速化技術及び大規模化技術に関して述べた。今後もさらに高速化技術や大規模化技術を随時デジタルアニーラに取り入れていき、性能面を向上させていくとともに、複数の研究機関との共同研究を通して応用分野を拡大し、様々な分野のビジネスに貢献していく。

参考文献

[1] R. Colwell, “The Chip Design Game at the End of Moore’s Law,” Hot Chips 27, 2015.
[2] 福島孝治、“モンテカルロ法の前線―サイコロ振って積分する方法―、”科研費特定領域研究「確率的情報処理への統計力学的アプローチ」主催、若手研究者・学生向けに最新技術をわかりやすく紹介する講演会「確率的アルゴリズムによる情報処理」2003.
[3] K. Hukushima and K. Nemoto, “Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations,” J. Phys. Soc. Jpn., 65, pp. 1604-1611 (1996).