

熱ゆらぎによるシミュレーテッド分岐アルゴリズムの高精度化

Improvement of Simulated Bifurcation Algorithm by Thermal Fluctuations

東芝研究開発センター¹, 東芝デジタルソリューションズ²

○金尾 太郎¹, 鈴木 賢², 辰村 光介¹, 後藤 隼人¹

Corporate R&D Center, Toshiba Corp.¹, Toshiba Digital Solutions Corp.²

○Taro Kanao¹, Masaru Suzuki², Kosuke Tatsumura¹, Hayato Goto¹

E-mail: taro.kanao@toshiba.co.jp

近年、組合せ最適化問題を高速に解くための専用計算機が注目を集めている[1-3]。最近我々は分岐現象を示す非線形ハミルトン力学系をデジタル並列計算機でシミュレートすることにより組合せ最適化問題を解く「シミュレーテッド分岐(simulated bifurcation, SB)アルゴリズム」を提案した[4]。FPGA や GPU により大規模な組合せ最適化問題を高速に解くことに成功している。SB アルゴリズムでは断熱・エルゴード過程により短時間で比較的良好な解が得られる。しかし、今回十分時間をかけた場合を調べたところ、解の精度向上に限りがあることがわかった。

そこで、本研究では解の探索範囲を拡大するためにゆらぎを導入し、精度が向上できるか調べた。方法として、分子動力学で有限温度のシミュレーションに使われる Nosé-Hoover (NH)法[5]を用いた。変数 x_i, y_i に対するハミルトン方程式に、変数 z を以下のように導入する。

$$\begin{aligned}\dot{x}_i &= \Delta y_i, \\ \dot{y}_i &= -[Kx_i^2 - p(t) + \Delta]x_i + \xi_0 \sum_{j=1}^N J_{ij}x_j - zy_i, \\ \dot{z} &= r \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i^2 - T(t) \right].\end{aligned}$$

最終的に良好な解へ収束させるために温度 $T(t)$ を徐々に下げる焼なましを行う。並列性の低い y_i^2 の和の計算を並列に行うための工夫も提案する。

Fig. 1 に最大カット問題のベンチマーク問題 G22 [1]の結果を示す。1000 通りの初期値 y_i について得られた平均と最大のカット数を示した。計算ステップ数（計算時間）を大きくしたとき、NH-SB によって従来の SB より大きなカット数が得られた。これはゆらぎと焼な

ましにより精度を向上できることを意味する。講演ではゆらぎを取り入れる別の方法としてハミルトニアンモンテカルロ法[6]を用いた場合についても報告する予定である。

[1] T. Inagaki et al., *Science* **354**, 603 (2016). [2] H. Goto, *Sci. Rep.* **6**, 21686 (2016). [3] H. Goto, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 061015 (2019). [4] H. Goto, K. Tatsumura, A. R. Dixon, *Sci. Adv.* **5**, eaav2372 (2019). [5] B. Leimkuhler, S. Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics* (Cambridge Univ. Press, 2004). [6] R. M. Neal, arXiv:1206.1901 (2012).

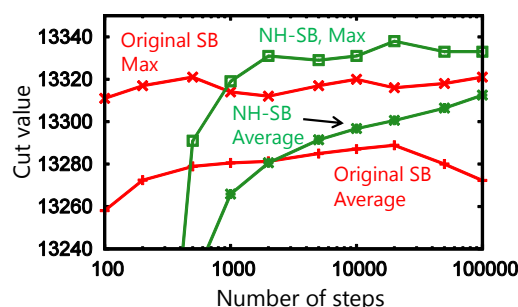


Fig. 1. Cut values vs. computation steps for G22. $N = 2000, K = \Delta = 1, \xi_0 = 0.5\Delta/(\sigma\sqrt{N}), \sigma = 0.01$, and $r = 0.5$. Initial y_i are uniform random numbers between -0.2 and 0.2 . $p(t)$ and $T(t)$ are linearly changed from 0 to 1 , and from 0.5 to 0 , respectively. Time evolutions are calculated by using the method in [4]. The parts which do not include J_{ij} are divided into $M = 5$ parts. Time steps are $\Delta t = 1$ for original SB, and $\Delta t = 0.5$ for NH-SB.