

機械学習を用いた次元圧縮&QUBO 構築による
アニーリングマシン向け計算補助ミドルウェアの開発
ー オートエンコーダを用いたアニーリングマシンの高効率化 ー

1. 背景

組合せ最適化問題は、物流、製造業、金融などの多様な産業分野において極めて重要な課題である。これらの問題は計算規模が指数関数的に増大するため、従来の古典的アルゴリズムでは解決が困難なケースが多い。そのため、近年ではアニーリングマシンが新たな組合せ最適化問題の計算機として注目を集めている。アニーリングマシンは図 1 のような手順で組合せ最適化問題の最適解を求解する。



図 1：アニーリングマシンによる組合せ最適化問題の求解手順

しかし、実際にアニーリングマシンを活用するには、最適化問題を QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) の形式に変換する必要がある。その際、図 2 のように、元の問題の変数をバイナリ変数へと変換する必要がある。この変換過程において以下の課題が発生する。

- ビット数の増大
整数変数やカテゴリ変数をバイナリ変数に変換する際、One-hot エンコーディングのようなエンコーディング手法が用いられる。この変換によって求解に必要なビット数が増大し計算負荷が増加する。
- 制約非充足解の発生
アニーリングマシンの最適化プロセスでは、制約を満たさない解が多数生成されることがあり、適切な解を得ることが難しい。従来のエンコーディング手法では、変換後のバイナリ変数空間に制約非充足解が多く含まれてしまうという特性があるため、アニーリングマシンによる求解の際に制約非充足解が発生する確率が高くなる。

これらの問題を解決し、アニーリングマシンの最適化性能を向上させるため、本プロジェクトではオートエンコーダを活用した新たなエンコーディング手法を開発した。

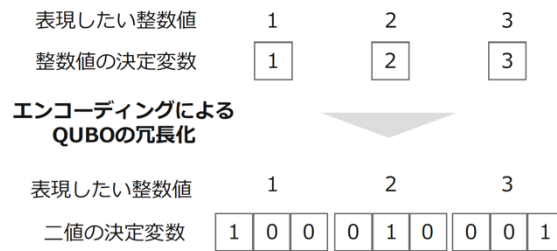


図 2：従来のエンコーディング手法による変換

2. 目的

本プロジェクトの目的は、オートエンコーダを用いた新たなエンコーディング手法の提案である。従来手法では、変数をバイナリ変数に変換する際に One-hot エンコーディングなどを用いることが多い。この変換によって求解に必要なビット数が増大していた。本プロジェクトでは、オートエンコーダを用いることで、元の問題の情報を適切に保持しつつ、ビット数の少ないバイナリ変数を生成することを目指した。また、従来の QUBO 定式化では、変数のバイナリ変換によって制約非充足解が多く発生するという課題があった。これに対し、オートエンコーダの学習過程で制約充足解のみを利用することで、変換後のバイナリ変数空間において制約非充足解の発生を抑制することを目指した。

3. ソフトウェア開発内容

3-1. オートエンコーダの設計

オートエンコーダは、エンコーダ、潜在層、デコーダの 3 つの主要な構成要素から成る。エンコーダは入力データを圧縮し、潜在層ではエンコーダによって圧縮されたデータをバイナリ変数のみで構築される潜在表現に変換する。デコーダはバイナリ変数の潜在表現をもとに元の入力データを復元する。

エンコーダ: RNN (GRU) と CNN を活用し、入力データの系列적および局所的な特徴を捉えつつ圧縮する手法を比較検討。

潜在層: シグモイド関数とベルヌーイ分布を利用し、潜在表現を 0,1 のバイナリ変数に変換。

デコーダ: RNN を利用し、バイナリ変数に変換された潜在表現から元データを逐次的に復元する。

3-2. 最適化フローの構築

オートエンコーダを活用して圧縮された潜在変数を用いて QUBO を構築し、アニーリングマシンによる最適化を実施した。以下の①～③を一定回数繰り返すことで、最終的に最適解を求める。

- ① **QUBO 構築**：初期データセットをオートエンコーダのエンコーダに通して潜在変数に圧縮し，Factorization Machine（FM）を利用して QUBO を構築する．
- ② **アニーリングマシンの適用**：D-Wave Advantage System 6.4 および Fixstars Amplify AE を用い，潜在空間で構築した QUBO を求解する．
- ③ **解の取得**：得られた解をオートエンコーダのデコーダに通して復元し，データセットに追加し，①に戻る．

4. 新規性・優位性

本プロジェクトの成果として，巡回セールスマン問題（Traveling Salesman Problem：TSP）を対象にした検証を実施し，従来手法（One-hot エンコーディング）と比較して以下のような改善が得られた．

① ビット数の削減

One-hot エンコーディングでは 64 ビットを要していた TSP に対し，提案手法では 12～20 ビットに削減することができた．これにより，アニーリングマシンに入力するビット数を大幅に縮小することに成功した．（図 3）

② 制約充足解獲得率の向上

オートエンコーダを用いた最適化により，制約非充足解の発生を大幅に抑制し，制約を満たす解の探索がより効率的に行えることを確認した．（図 4）

③ 最適解の獲得率向上

量子アニーリングマシンである D-Wave Advantage System 6.4 を用いた最適化において，提案手法を適用することで従来手法よりも高い確率で最適解を得ることができた．（図 5）

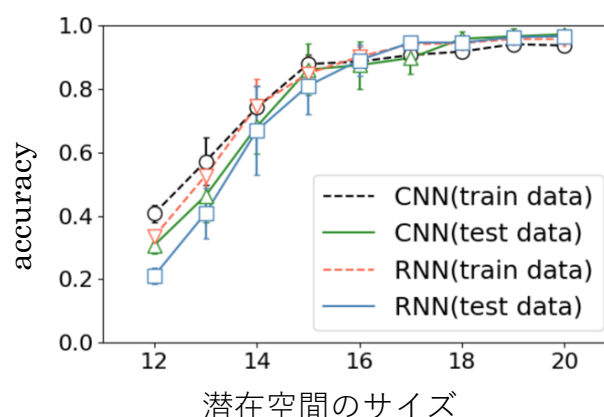


図 3：復元精度（accuracy）の潜在空間サイズ依存性

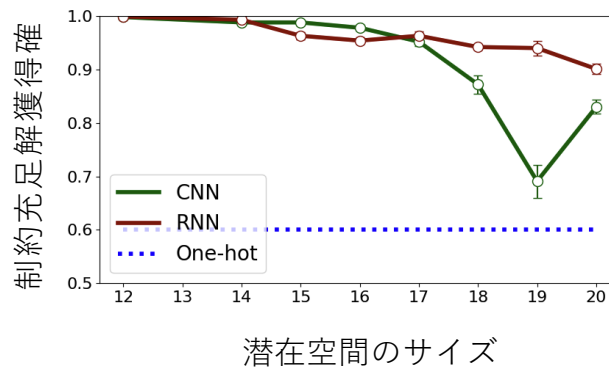


図 4：制約充足解獲得確率の潜在空間サイズ依存性. One-hot が従来手法.

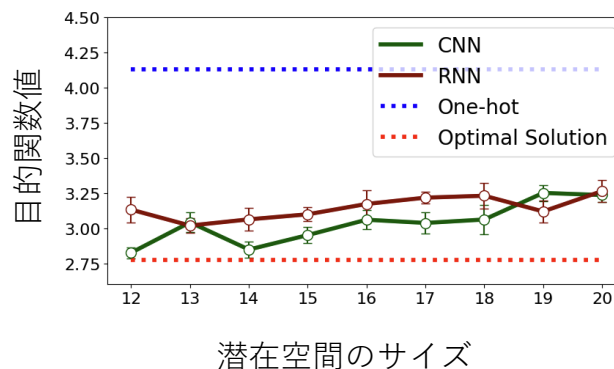


図 5：得られた最小目的関数値の潜在空間サイズ依存性. One-hot が従来手法.

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本手法は、従来の One-hot エンコーディング手法と比較して変数の数を削減することを可能にした。結果として制約充足解の獲得確率を向上およびアニーリングマシンによる最適化性能の向上を実現した。本プロジェクトの成果は、アニーリングマシンの計算効率向上を通じて、さまざまな分野での最適化技術の発展に寄与するものであり、産業界への応用の可能性を大きく広げるものである。また、量子アニーリング技術の実用化を後押しし、より多くの企業や研究機関がこの技術を研究・活用できるようになることで、社会全体の生産性向上や持続可能な社会の実現にも貢献することが期待される。本技術のさらなる発展により、組合せ最適化の枠組みが拡張され、現代社会が抱える複雑な課題の解決に向けた新たなアプローチが可能となるだろう。

6. 氏名（所属）

山下 将司（株式会社リクルート）

阿部 哲郎（慶應義塾大学大学院理工学研究科）