

第三世代 デジタルアニーラ ご紹介資料

2021.2.1版

**FUJITSU Quantum-Inspired
Computing Digital Annealer**

富士通株式会社

関連技術を含め特許申請中

<http://www.fujitsu.com/jp/digitalannealer/>



Copyright 2021 FUJITSU LIMITED

第三世代デジタルアニーラ

ソフトウェア技術とハードウェア技術のHybridシステムが、
大規模な実問題(100 Kbit規模)の高速求解を実現

ソフトウェアテクノロジー



ハードウェアテクノロジー

大域探索機能:

大規模問題にて複数の良解を抽出

超高速探索:

抽出した良解周辺の最適解を高速発見

第二世代デジタルアニーラと比較し、問題サイズ約**10倍**

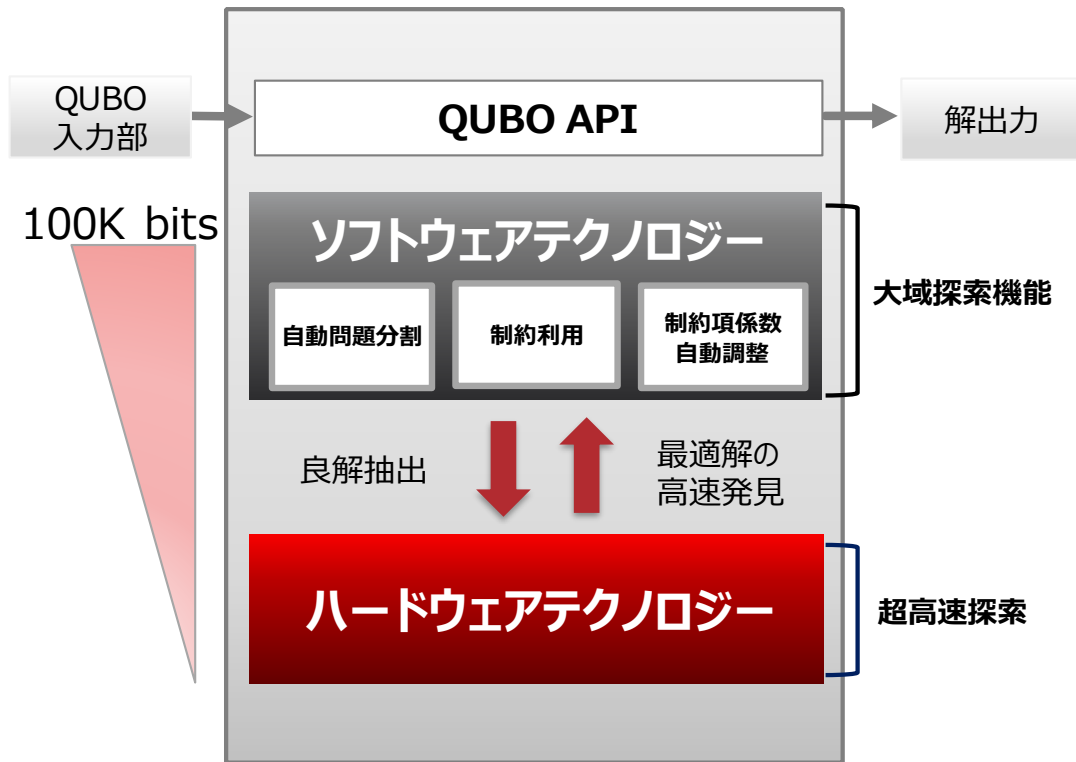
第三世代デジタルアニーラの特徴

大規模化、高速化

- **自動問題分割：**
ハードウェアを超えるサイズの問題も分割技術で求解が可能に
- **制約利用大域探索：**
実課題にて頻出の典型的な制約(1-Hot制約)を利用することで処理を高速化

利便性

- **制約項の係数自動調整：**
チューニング作業の軽減
- **不等式制約記述対応：**
 - 不等式制約の直接定義・入力が可能
 - 補助ビットによるQUBO定式化が不要



*QUBO(Quadratic Unconstrained Binary Optimization)

第三世代デジタルアニーラ 汎用数式型 QUBO API 補足

利便性

制約項分離

複雑な制約条件を分離入力し、QUBOのチューニングを簡単化

目的関数

制約条件

$$\mathcal{H} = \sum_{i \leq j} o_{ij} x_i x_j + A \sum_{i \leq j} p_{ij} x_i x_j$$

制約項分離

デジタルアニーラ

$$\mathcal{H} = \sum_{i \leq j} o_{ij} x_i x_j + \lambda \sum_{i \leq j} p_{ij} x_i x_j$$

係数Aを自動調整

チューニング作業を軽減

利便性

不等式制約対応

QUBOとは別に不等式制約を与えることにより、不等式を表す補助ビットを削減

目的関数

補助ビットによる不等式制約

$$\mathcal{H} = \sum_{i \leq j} q_{ij} x_i x_j + \sum_k L_k \left(\sum_j d_{kj} x_j - y_k \right)^2$$

QUBO

不等式制約

デジタルアニーラ

$$\sum_j d_{kj} x_j \leq y_k$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i \leq j} q_{ij} x_i x_j + \lambda \sum_k L_k \left(\sum_j d_{kj} x_j - y_k \right)^2$$

補助ビット y_n が不要に

複数の不等式制約に対応

高速性

1HOT制約対応

実用問題で頻出の1HOT制約に対応
典型的な制約条件を高速に処理

1WAY-1HOT制約

2WAY-1HOT制約

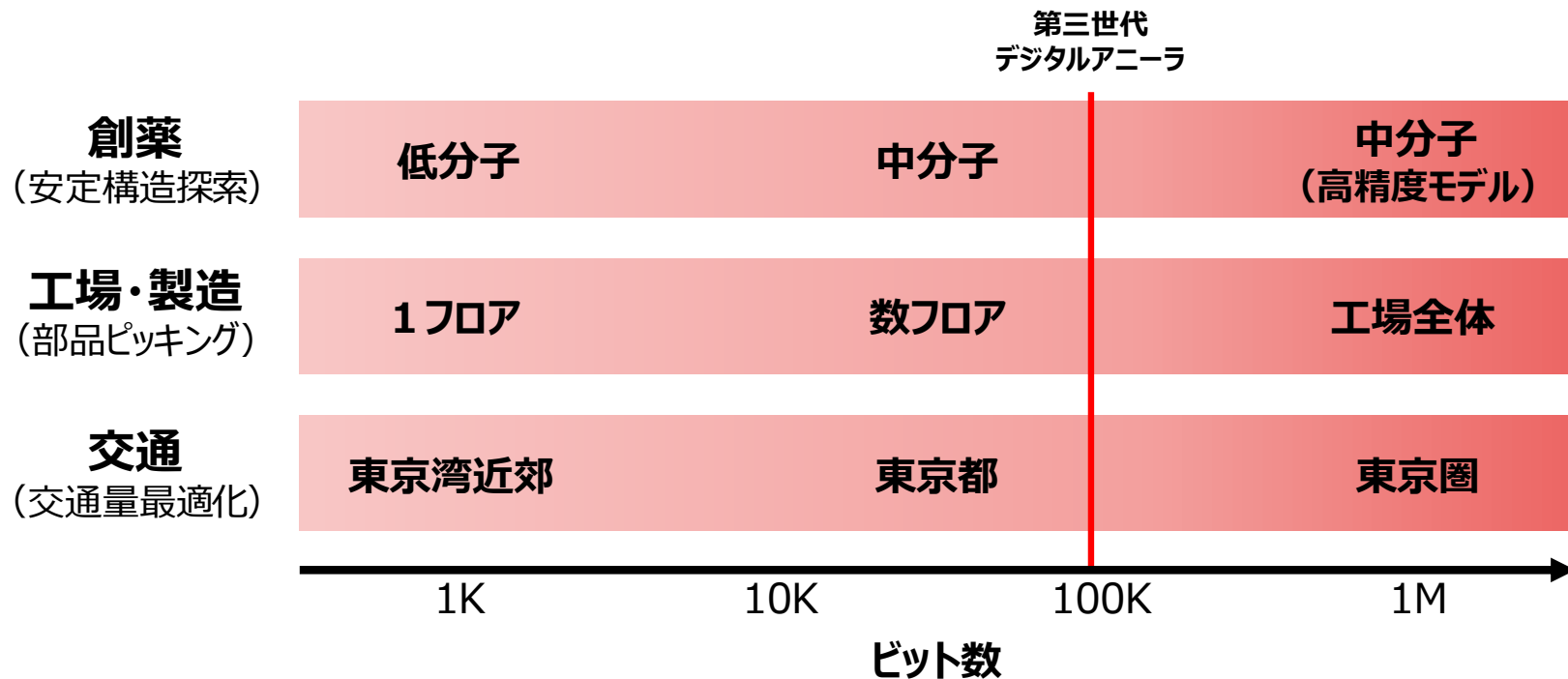
$$A \left(\sum_i x_i - 1 \right)^2$$

$$A \sum_i \left(\sum_j x_{ij} - 1 \right)^2 + B \sum_j \left(\sum_i x_{ij} - 1 \right)^2$$

対象のグループ内から"1"となるビットを1つだけ選択する

より高速な探索を実現

問題規模とビット数の関係例



サービス提供 ロードマップ°

FUJITSU

CY2018

2019

2020

2021

第一世代

》第二世代

》第三世代

》第四世代

次世代

規模: 1024 bit
精度: 16 bit
65536 階調

規模: 8192 bit
精度: 64 bit
 1.845×10^{19} 階調

規模: 100k bit
精度: 64 bit
 1.845×10^{19} 階調
ソフトウェアテクノロジー
X
ハードウェアテクノロジー

求解速度: 10倍
求解高速化技術
X
大規模問題求解技術
規模: 100k bit
精度: 64 bit

大規模問題の求解性能を向上させビジネス適用範囲拡大

技術 ロードマップ^o

FUJITSU

適用領域

 県域配送

 全国配送

 中分子医薬

 金融ポートフォリオ

 要員計画

規模 > 1M 変数

大規模実問題対応

第三世代
規模 100Kbit

第二世代
規模 8192bit

第一世代
規模 1024bit

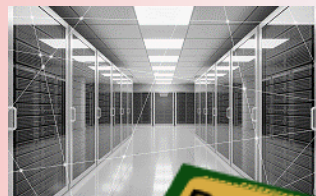
~2017

2018

2019

2020

2021~



第三世代デジタルアニメーション適用事例

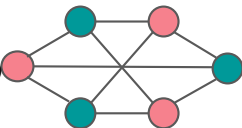
グラフ彩色問題とその応用

- デジタルアニーラ(DA)はより複雑なグラフ彩色問題において、商用ソルバに対し明らかな優位性が確認されている。
- グラフ彩色問題をベースとした実問題であるネットワークチャンネル配置の最適化においても優れた結果を得た。

グラフ彩色問題

グラフ彩色問題とは…

エッジ(辺)で繋がっているノード(頂点)
同士が同じ色にならないようにすべての
ノードを色分けする問題



ベンチマーク結果

辺密度	bit規模	正答率		求解速度
		商用ソルバ	DA	
50%以上	8k~50k	0%	100%	-
	8k未満	33%	100%	30倍
50%未満	8k~50k	0%	100%	-
	8k未満	100%	100%	0.9倍

辺密度: ノード同士のエッジで繋がっている比率

正答率: 規定計算時間内(最大10分)で解を得られた割合

求解速度: 商用ソルバを1としたときのDAの倍率

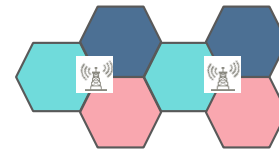
データセット: 以下URLのランダム/疑似ランダムグラフ(DSJ/CUL)を10個使用

<https://mat.tepper.cmu.edu/COLOR/instances.html>

応用例: ネットワークチャンネルの最適化

ネットワークチャンネルの最適化とは…

- ・ 同一周波数帯を用いる基地局間の信号干渉を最小にすることを目的として、基地局毎の信号パターンを可能な限り周辺基地局と重複しないように割り当てる問題



1,000基地局を対象とした大規模問題による性能比較



(対商用ソルバ)重複量改善率

60%以上

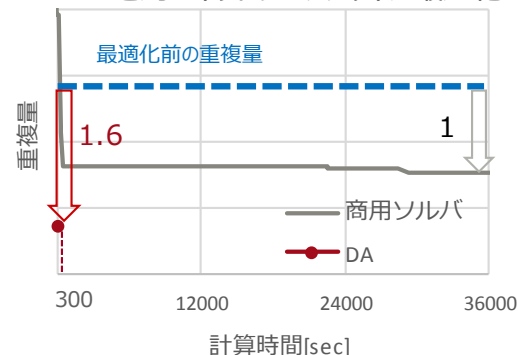


(対商用ソルバ)求解速度

120倍以上

商用ソルバでは長時間計算してもたどり着かなかった、重複量がより少ない良解に短時間で到達

1000基地局のネットワークチャンネル最適化



平均分散ポートフォリオ最適化とその応用

- 一般的な平均分散ポートフォリオ最適化において、デジタルアニーラ(DA)は商用ソルバに速度面で優位性がある。
- 非凸型指標を用いたより実用的なモデルの最適化では、商用ソルバがたどり着けない良解に到達。

平均分散ポートフォリオ最適化

平均分散ポートフォリオ最適化とは…

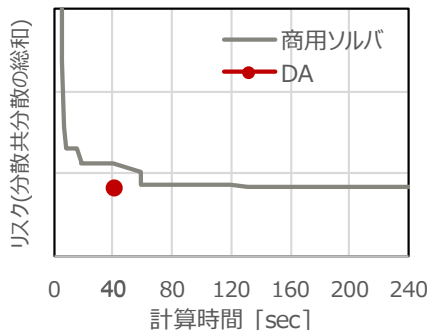
- 期待収益率が投資家の要求する期待収益率以上であるという制約の下で、リスク(分散)を最小化する資産への投資比率を求める問題。
- 凸2次計画問題であり、一般的に高速に求解できる。

$$\begin{aligned} \min \quad & x^T \sigma^2(p) x \\ \text{s. t.} \quad & \bar{r}_p^T x \geq r_E \\ & \sum_i x_i = 1 \\ & x_i \geq 0 (i = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

ベンチマーク結果

- より一般的に銘柄数や取引単位を制約した平均分散モデルで性能測定を実施。
- 凸性は失われるが、商用ソルバもDAも同等の良解を得られた。
- 速度面でDAが優位。

2000銘柄のポートフォリオ最適化



応用例:非凸型指標を用いたポートフォリオ最適化

- 新たなポートフォリオ構築のため、更なる非凸型指標を用いた、単純な平均分散ではないポートフォリオ最適化の必要がある。
- 分散を非凸に加工したモデルで性能測定を実施。

2,000銘柄のポートフォリオ最適化による性能比較

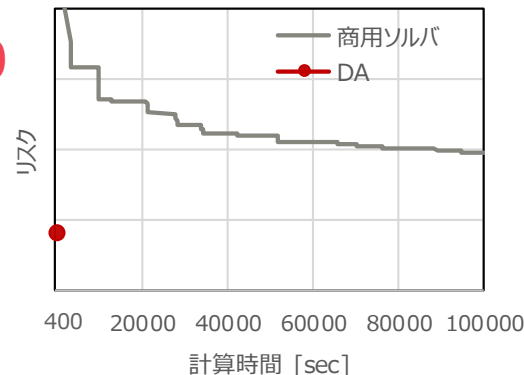
(対商用ソルバ)解精度

商用ソルバがたどり着けない良解

(対商用ソルバ)求解速度

250 倍以上

2000銘柄のポートフォリオ最適化



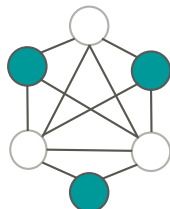
最大独立集合問題とその応用

- デジタルアニーラ(DA)は最大独立集合問題に対して、商用ソルバへの優位性を持っている。
- 独立集合問題を用いた分子類似性検索では既存手法より高精度・高機能の類似性評価を実現。

最大独立集合問題

最大独立集合問題とは…

- 頂点の部分集合のうち、どの二点間も辺で結ばれていない部分集合(=独立集合)で最大のものを求める問題



ベンチマーク結果

正答率		求解速度
商用ソルバ	DA	
54%	94%	60倍

データセット: 以下URLのDIMACS/BHOSLIBのベンチマークデータセット(107個)を使用

<http://networkrepository.com/DIMACS.php>

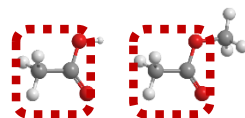
正答率: 規定計算時間内(最大5分)で解を得られた割合

求解速度: 商用ソルバを1としたときのDAの倍率 (全データセットの平均値)

応用例: 分子類似性検索

分子類似性検索とは…

- “類似した化合物は類似した性質を持つ”という類似性質原則に基づき、特定の性質を持つ類似分子をデータベースから検索する手法。
- 例えば、材料・薬品候補をスクリーニングする際に用いられる。



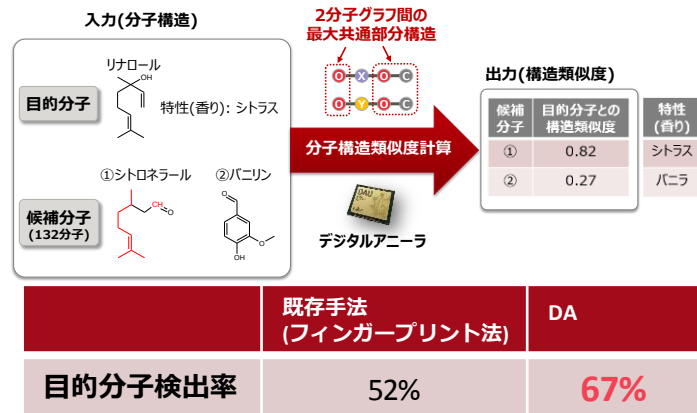
香料分子に対する類似性評価による性能比較(※)

(対既存手法)目的分子検出率

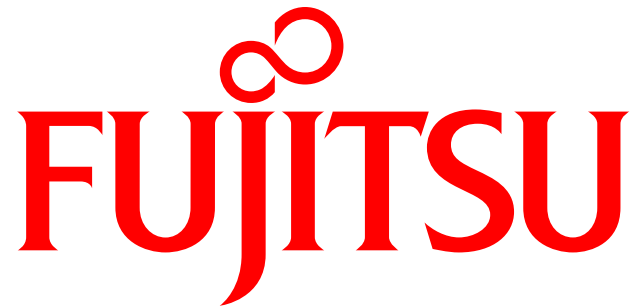
1.2倍以上

(対既存手法)差別化機能

香りを特徴づける
部分構造の抽出



(※) 第13回分子科学討論会 名古屋 2019 デジタルアニーラを用いた香料分子の類似度評価



shaping tomorrow with you