

「第2回量子コンピュータ勉強会」
～実感のわく課題のQUBO行列を作ってみよう～

日時：2022/1/19(土) 19:00-20:00

場所：オンライン

四谷ラボ

山本 慎也

目的

このセッションが終わるころには・・・

- 組合せ最適化問題の数学的な捉え方を理解できる。
- 量子アニーリングマシンへの入力と出力を知ることができる。
- 組合せ最適化問題を解くための工程を知ることができる。
- QUBO行列について理解できる。
- D-Waveマシンのトークがなくても、シミュレーテッドアニーリングで組合せ最適化問題のプログラミングができる。

座学編



$$R_1 = \frac{35}{8}$$

$$\frac{r}{ne} = \frac{h}{p}$$

$$p = p_0 e$$

$$E_2 = -L \frac{11}{n}$$

組合せ最適化問題ってなんだったっけ？

量子アニーリングマシンは、組合せ最適化問題専用のマシンですが、そもそも組合せ最適化問題ってなんだったか、おさらい。

組合せ最適化問題とは、様々な制約の下で多くの選択肢の中から、ある指標（価値）を最も良くする変数の値（組合せ）を求めることです。代表的な組合せ最適化問題に巡回セールスマン問題などがある。

- 菓子選択問題
- 長方形詰込み問題

菓子選択問題（組合せ最適化問題例）

○学校遠足の菓子選びを思い出してみましょう。この場合、変数・制約・価値は下記で与えられます。

変数：どの菓子を買うのか？（ x_1 の値、1:買う、0:買わない）

制約：遠足で決められた総額 300円

指標：満足度

「[第1回量子コンピュータ勉強会](#)」より

お菓子	変数	値段	満足度
ポッキー	x_1	120円	10点
チュッパチャプス	x_2	30円	3点
カントリーマアム	x_3	90円	4点
ポテチ	x_4	150円	8点
果汁グミ	x_5	120円	7点

指標： $10 x_1 + 3 x_2 + 4 x_3 + 8 x_4 + 7 x_5$

制約： $120 x_1 + 30 x_2 + 90 x_3 + 150 x_4 + 120 x_5 \leq 300$

この**制約**を満足しつつ、**指標**を最大化する菓子の組合せが求めたい答えとなります。

答え：ポッキー、チュッパチャプス、ポテチ（満足度21点、総額300円）

組合せ最適化問題を数学的にとらえると

組合せ最適化問題は、数学的には目的関数の最小化（あるいは、最大化）の問題としてとらえることができる。

例えば、菓子選択問題だと「菓子をどのように組み合わせる購入すると満足度が最大化できるのか？」という問題としてとらえることができる。

前項の菓子選択問題だと、目的関数は以下の通り。

目的関数： $10x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 8x_4 + 7x_5$

（但し、 x_i の取り得る値は、1 or 0。1:買う、0:買わない）

この目的関数の値を**最大化**する x_i を求めることが、組合せ最適化問題を解くということ。

※上記の目的関数の場合、 x_i をすべて1にすれば、満足度が最大値の32になりますが、「予算が300円まで」という制約条件が考慮されてないからです。制約条件の表現については後述。

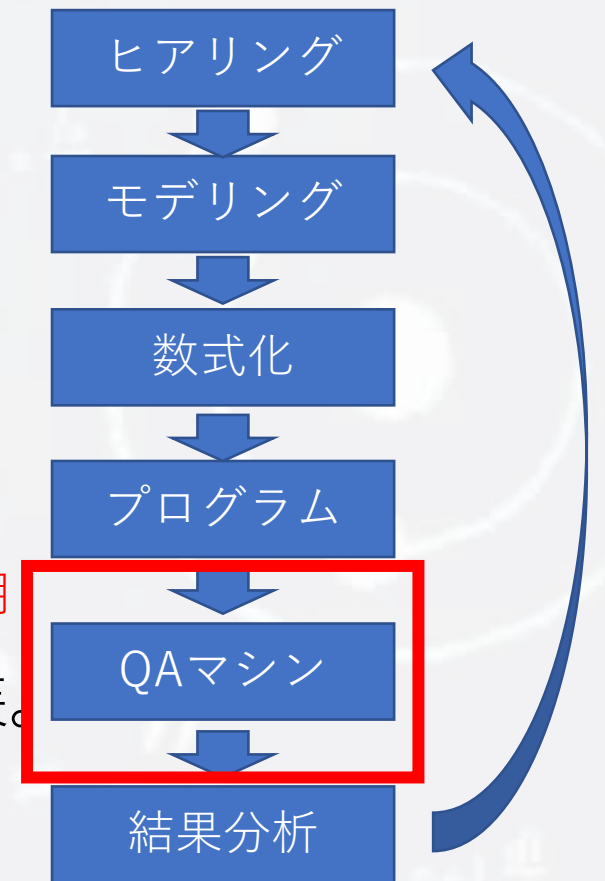
組合せ最適化問題を目的関数で表現するのが肝。

組合せ最適化問題を解くための工程

量子アニーリングマシンで組合せ最適化問題を解くための工程はこんな感じ。

1. 解くべき課題のヒアリング（コミュ力・洞察力）
2. 組合せ最適化問題のモデリング（発想力・論理思考力）
3. モデルの数式化（数学力）
4. QUBO行列生成プログラミング（プログラミング力）
5. QAマシンへQUBO行列を送信（財力）
6. QAマシンからの結果行列の分析（説得力）

- 一番大変なのが、1、2。
- 4のプログラミングの95%は古典コンピュータで実装。
- 2～6の工程を数十回以上繰り返すことは、あるある。

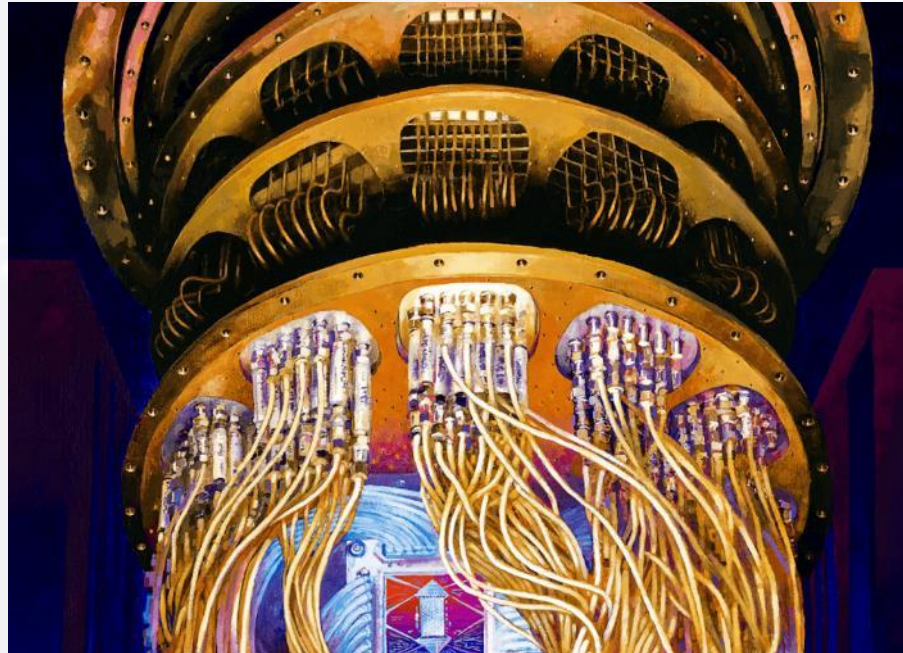


量子アニーリングマシンの入出力

QAマシンへの入出力はシンプル！ 入力がQUBO行列で、出力も行列。
組合せ最適化問題をQUBOという行列に抽象化して、QAマシンへ入力します。
QAマシンはQUBOで定義した相互作用を勘案して、結果行列を出力します。

QUBO行列

入力



入力

結果行列

量子アニーリングマシン
(写真みるだけでワクワクする)

組合せ最適化問題を定義した行列

現役エンジニアの方は最初にこれを知っておくと理解しやすい。結局のところ組合せ最適化問題をQUBO行列で定義

QUBO行列ってなんなのよ。

QUBOは「Quadratic unconstrained binary optimization」の略、「二次制約なしバイナリ最適化問題」という意味。最大カット問題など多くの理論計算機科学で定式化されている。

重要なのは、二次関数であること、変数の取り得る値が二値（0 or 1）であること。

量子アニーリングマシンで取り扱うことが可能な組合せ最適化問題は、マシンの性質上、この「二次制約なしバイナリ最適化問題」のみということになります。逆に言うと「二次制約なしバイナリ最適化」を解くために開発されたのが量子アニーリングマシンということになる。

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Q_{ij} x_i x_j$$

（但し、 x_i 、 x_j の取り得る値は1 or 0）

QUBOを定式化した関数

QUBO行列ってなんなのよ。

QUBO（二次制約なしバイナリ最適化問題）を定式化した関数 $E(x)$ の Q_{ij} 部分をQUBO行列という。このQUBO行列をQAマシンに送信して、解を求める。

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \boxed{Q_{ij}} x_i x_j \quad \text{QUBO行列ってこれ。} \quad (\text{但し、} x_i, x_j \text{の取り得る値は1 or 0})$$

QUBOを定式化した関数 $E(x)$ について、詳しく見ていこう。

x_i 、 x_j は二値の変数 (0 or 1) で、量子アニーリングでは量子ビットを表します。

量子アニーリングマシンは、 Q_{ij} を受け取って、 $E(x)$ が最小になる x_i 、 x_j の解の候補を出力するように設計されています。

Q_{ij} は、 x_i 、 x_j の互いの影響（相互作用）を考慮するための行列です。

実践編



QUBO行列を作成するプログラム

東北大学大関先生のQA4Uからプログラムを拝借し、詳しく説明します。

今回は、シミュレーテッドアニーリングを使いなので、D-Waveマシンのトークンは不要！

- Google Colaboを準備しよう

Google Colaboの使い方が分からない方は「[第1回量子コンピュータ勉強会](#)」の下から5ページ目をチェック！

- プログラムをGoogle Colaboへロードしてください。

https://github.com/428lab/quantum-annealing-study-session/blob/main/002_20220119/src/quantum_annealing_study_session_002.ipynb

次回は、より実践的な最適化問題を解く！