概要

近年，量子計算と量子アニーラに関連する技術の発展やその研究が注目されている．量子アニーラを利用して問題を解決するのに問題自身がQUBO（**Quadratic Unconstrained Binary Optimization**）の形に変更することが必要である．その中，ペナルティー係数の選択が非常に重要であり，小さい過ぎるペナルティー係数では全域的最小値が問題自身の最適解にならなくて，大き過ぎるペナルティー係数ではQUBOソルバーに悪影響を与えることが分かった．本研究では，tsp（traveling sales man problem）問題を注目してボロノイー図とその双対ドロネー三角分割に基づいて二つペナルティー係数の選択法を提案した．実験結果としてインスタンスのサイズが小さい時，提案された方法で得られたペナルティー係数でソルバーは実行可能解が得られた．かつ，通常使われている町間の最大距離より小さいことが確かめた．

1. はじめに

組み合わせ最適化問題は様々な制約条件の下で数多くの選択肢からある評価関数を最大または最小にする選択肢を選ぶ問題であり，その問題自身がNP困難問題でもある。問題に含まれる変数の個数が多くなるに連れて，問題の解空間が爆発的に拡大していて非常に困難な問題になってしまう．なので，コンピューターの計算性能は成功に問題を解けないかと繋がっている．残念ながら，現在のコンピューターは組み合わせ最適化問題を解くには大量の時間がかかって数年，数十年もかかる場合もある．通常の場合，近似アルゴリズムが多数考案されていて，その中メタヒューリスティックアルゴリズムは一番使われる手法としている．遺伝的アルゴリズム，蟻コロニー最適化アルゴリズム，タブーサーチ，焼きなまし法等は有名なメタメタヒューリスティックアルゴリズムとして知られている．ところがメタヒューリスティックアルゴリズムを用いても得られた解は必ず最適解ということを保証してもらえなくて，なるべく最適解に近い解を手に入れたいという目標で機能している．なお，一般的なメタヒューリスティックアルゴリズムは特定の問題に限らず汎用的に様々な問題が解けるのが，より精度が良い解を得るためにアルゴリズムに関連するパラメータを問題の事前知識で調整する必要がある．

近年，高速発展する量子計算と量子アニーラは組み合わせ最適化問題を解くためのもう一つも手法として注目されている．その中，量子アニーラは量子ビットの性質を利用して短時間で最小エネルギーを持つ解は導出してくれる．そのため，今量子アニーラと関連する研究も多くなっていく．

組み合わせ問題を量子アニーラで最適化するために問題自身がQUBO又はIsingの形に変換することが必要である．本研究ではQUBOモデルを注目している．

1. 関連研究（QUBOモデル，ising，tspモデルの導出、ドロネー、ボロノイー図）

２．１QUBO問題

QUBO（**Quadratic Unconstrained Binary Optimization**）とは二次形式の制約なし二値変数最適化問題であり，一般の数学式は：

**QUBOモデル**

その中，ｘはバイナリ変数でその値は０又は１，Ｑiiは一次項の係数，Qijは二次項の係数である．QUBO問題の目標はバイナリ変数xの値を定めてその値がQUBOの数学式を最小化または最大化にする．なお，QUBO問題は上三角行列の形で表現できる．

**QUBO行列**

その中，ｘはバイナリ変数のベクトル，Ｑは一次項と二次項の係数からなる行列で，対角成分Qiiは一次項の係数，非対角成分Ｑijは二次項の係数である．バイナリ変数xの個数が多くなるに連れて解空間の探索範囲は爆発的に拡大していて，なのでコンピューターの計算性能が非常に重要である．

２．２isingモデル

イジングモデルのハミルトニアンは次の式で与えられる

**Ising**

その中，はスピンで上向き（+1）と下向き（-1）２状態を取れる，ｈは対応するスピンに与える外部磁場，Ｊは異なる二つのスピンの相互作用．イジングモデルとQUBOモデルはほぼ同じであって，次の式で簡単に相互変換できる．

**变换公式**

現実世界の焼きなましと同じ現象を持つイジングモデルは最終的にエネルギーが最小の状態に収束する特徴がある．その特徴を利用して量子アニーラが開発されて様々な問題が迅速に解決できるが，現在の量子アニーラは所有の量子ビット数はまた少ない問題点がある．その一方，量子アニーラが外部からの温度変化が非常に敏感で，少しだけの温度変化でスピンを影響してしまって正確な状態を得られなくなることがある．その故，量子アニーラの稼働状態を保持するために常に非常に低い温度でいなければならない．要するに現在の量子アニーラの稼働はコストが高くて未来の発展が期待される．

２．３tspモデルの導出

Tsp（巡回セールスマン問題）問題は組み合わせ最適化問題としてよく知られている．ｔｓｐは町の座標あるいは距離行列が与えられた時，全ての町をちょうど一度ずつ巡り出発地に戻る巡回路のうちで総移動距離が最小のものを求める組合せ最適化問題である．例えば：次は町五つあるのtsp問題の完全グラフであり，目標は完全グラフの中から総距離が最小の巡回路を求めることである．例のインスタンスで最適巡回路は：１-２-３-４-５．

**ｔｓｐ示例图**

通常のメタヒューリスティックアルゴリズムでtsp問題が解けるが，対応するQUBOモデルに変換して量子アニーラ，QUBOソルバーでも解決できる．

次はtsp問題もQUBOモデルの数学式である．

**ｔｓｐQUBO**

TspのQUBOモデルは目的関数と制約条件，２部分から構成されている．その中，ｎは町の個数．ｘitはバイナリ変数でその値は１あるいは0，ｘitが１の時町iへt番目に訪れる，０の時町iへt番目に訪れないと定義している，なのでサイズｎのインスタンス（町の個数はｎ）でｎ^2個の．ｄijは町iと町jのユークリッド距離（整数）である．目的関数の値は求めた巡回路の総距離，残りの部分は制約条件から変換されたQUBOモデル．はペナルティー係数．Tsp問題は二つ制約条件があって一つ目は各町は１回しか訪れてはいけない，二つ目は同じタイミングに複数の町に訪れることができない．二つの制約条件がそれぞれQUBOに変換できて，目的関数に加えてからtsp問題のQUBOモデルが得られる．

**可以扩充onehot 和 如何转换为qubo的**

２．４ドロネー三角分割　と　ボロノイー図

ボロノイ図（Voronoi Diagram）とは，平面上に配置された複数の点（母点）に対して，各点から最も近い領域を決定する方法である．具体的には，各母点からの距離が最小となる点の集合が，その母点に対応するボロノイ領域を形成する．これにより，平面が複数のボロノイ領域に分割される。例えば：下の図はあるtspインスタンスに基づいて生成されたボロノイ図，複数のボロノイ領域から構成されている．青い点は母点（tsp問題の町），オレンジ色の点はボロノイ頂点，黒い辺はボロノイ辺である．

**ボロノイ図**

ボロノイ図の性質

ドロネー三角分割（Delaunay Triangulation）は、与えられた点集合を三角形に分割する手法で、ボロノイ図と密接に関連しています。具体的には、ドロネー三角分割は、ボロノイ図の隣接する領域のシードポイント同士を結んで得られる三角形から構成されます。つまり、ドロネー三角分割の各辺は、ボロノイ図の隣接する2つの領域の境界を超えたシードポイント同士を結んでいます。

このように、ボロノイ図とドロネー三角分割は双対の関係にあり、ボロノイ図の頂点はドロネー三角形の外接円の中心に対応し、ドロネー三角形の各辺はボロノイ領域の境界を形成します。この関係性により、計算幾何学やグラフィックス、地理情報システム（GIS）など、さまざまな分野で応用されています。

1. 提案手法
2. 実験結果
3. まとめ