

第 1 章

QUBO の表現（その 1）

1.1 量子アニーリングで N-クィーン問題を解く

1.2 定式化

N-Queen 問題を考える． $x_{i,j}$ は、 i 行 j 列目のマスに、0 にするか 1 にするかを表すものとする．例えば、

2 行 1 列目のマスに 1 をする場合、 $x_{2,1} = 1$ に、

1 行 3 列目のマスに 1 にしない場合、 $x_{1,3} = 0$ とする．

$(N \times N)$ の盤面における N-Queen 場合の場合、変数の組み合わせは次のようになる．

$$\begin{aligned} \mathbf{x} = \{ & \\ & x_{1,1}, x_{1,2}, \dots, x_{1,N}, \\ & x_{2,1}, x_{2,2}, \dots, x_{2,N}, \\ & \vdots \\ & x_{N,1}, x_{N,2}, \dots, x_{N,N} \} \end{aligned}$$

（ただしプログラムの実装時には、配列の添字は 0 から $N - 1$ までの N 次の配列になるので、このことを考慮する必要がある）

量子アニーリングで解くということは、評価関数 f の値が、この組み合わせ \mathbf{x} が正しい N-Queen の配置を構成できているときには小さい値になり、間違った構成の場合には大きな値になる．その様な QUBO 行列 Q を決定していくことになる．

1.2.1 縦横どの 1 列の数値の総和も等しい

N-queen が正しい構成になるときには、縦横のどの列についての総和も等しくなるという制約がある．

$$\begin{aligned}
f_0(x) &= \sum_k \sum_l \left(\sum_{(i,j) \in L_k} x_{i,j} - \sum_{(i,j) \in L_l} x_{i,j} \right)^2 \\
&= \sum_k \sum_l \left(\sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_k} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2} - 2 \sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{(i_1,j_1) \in L_l} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2} \right)
\end{aligned}$$

ここで, L_k と L_l は列に含まれるマスの集合のことで, 以下の通り. $L_1 \sim L_N$ は横の行, $L_{N+1} \sim L_{2N}$ は縦の列, を表している.

$$\begin{aligned}
L_1 &= \{(1, 1), (1, 2), \dots, (1, N)\} \\
L_2 &= \{(2, 1), (2, 2), \dots, (2, N)\} \\
&\vdots \\
L_N &= \{(N, 1), (N, 2), \dots, (N, N)\} \\
L_{N+1} &= \{(1, 1), (2, 1), \dots, (N, 1)\} \\
L_{N+2} &= \{(1, 2), (2, 2), \dots, (N, 2)\} \\
&\vdots \\
L_{2N} &= \{(1, N), (2, N), \dots, (N, N)\}
\end{aligned}$$

また, ある列 k の総和と, ある列 l の総和の差を d とすると,

$$\left(\sum_{(i,j) \in L_k} x_{i,j} - \sum_{(i,j) \in L_l} x_{i,j} \right)^2 = d^2$$

であることから, $d = 0$ の時 (すべての列の総和が等しい時) に最小になる.

(N-queen の各行および各列における総和 S は単に 1 になる.)

各行 (横方向) の値の総和は S である

$$\begin{aligned}
f_1(x) &= \sum_i \left(\sum_j x_{i,j} - S \right)^2 \\
&= \sum_i \left(\sum_{j_1} \sum_{j_2} x_{i,j_1} x_{i,j_2} - 2 \sum_j S x_{i,j} + S^2 \right)
\end{aligned}$$

$x_{i,j} \in \{0, 1\}$ に注意すると, $x_{i,j}$ は x を掛けた 2 次の形にしてもよい. また, 最小化問題では定数項は影響しないので無視できる. (以下同様に)

各列（縦方向）の値の総和は S である

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{x}) &= \sum_j \left(\sum_i x_{i,j} - S \right)^2 \\ &= \sum_j \left(\sum_{i_1} \sum_{i_2} x_{i_1,j} x_{i_2,j} - 2 \sum_i S x_{i,j} + S^2 \right) \end{aligned}$$

斜め方向の値の総和は 0 または 1 である

$$f_3(\mathbf{x}) = \left(\sum_d x_{d,d} - S \right)^2 + \left(\sum_d x_{d,N-d+1} - S \right)^2$$

左側の項は右下がりの斜めの列に対する制約, 右側の項は右上がりの斜めの列に対する制約.

1.2.2 $N \times N$ の盤面の数値の総和は N である

8-queen の場合, N は 8 である.

$$\begin{aligned} f_4(\mathbf{x}) &= \left(\sum_i \sum_j x_{i,j} - N \right)^2 = \left(\sum_i \sum_j x_{i,j} - N \right) \left(\sum_i \sum_j x_{i,j} - N \right) \\ &= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} x_{i_1, j_1} x_{i_2, j_2} - 2 \sum_i \sum_j N x_{i,j} + N^2 \\ &= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} x_{i_1, j_1} x_{i_2, j_2} - 2 \sum_i \sum_j N x_{i,j} x_{i,j} \end{aligned}$$

$x_{i,j} \in \{0, 1\}$ を考慮して, 二次形式に直している.

1.2.3 N-Queen 生成の評価関数

以上の制約を足し合わせることで N-Queen の生成に必要な評価関数を作ることができる.

$$f(\mathbf{x}) = \lambda_1 f_1(\mathbf{x}) + \lambda_1 f_2(\mathbf{x}) + \lambda_2 f_3(\mathbf{x}) + \lambda_3 f_4(\mathbf{x})$$

或いは,

$$f(\mathbf{x}) = \lambda_1 f_0(\mathbf{x}) + \lambda_3 f_4(\mathbf{x})$$

1.3 実装

```
pip install dwave-ocean-sdk
```

```
pip install openjij
```

1.3.1 初期化

```

from collections import defaultdict
import numpy as np
from dwave.optimization.symbols import Sum
from dwave.system import DWaveSampler, EmbeddingComposite
from openjij import SASampler, SQAASampler
import time

rotate90 = lambda A: [list(x)[::-1] for x in zip(*A)] # 90度回転用関数
transpose = lambda A: [list(x) for x in zip(*A)] # 転置用関数

class EightQueen:

```

以下は EightQueen クラスにまとめたもの。必要なライブラリのインポートや変数、定数はパラメータを変更することで、N-Queen の大きさや使う量子アニーリングマシンなどを変更することができる。

```

def __init__(self):
    self.N = 8 # 盤面の大きさは  $N \times N$ 
    self.S = 1.0 # 各列の総和
    self.l1 = 2.0 # 罰金項の強さ (各行、各列の総和は等しい)
    self.l2 = 1.5 # 罰金項の強さ (斜めの総和は0または1)
    self.l3 = 1.0 # 罰金項の強さ (盤面上は  $N$  個)
    self.num_reads = 10000 # アニーリングを実行する回数
    self.token = 'XXXX' # API token (個人のもを使用)
    self.solver = 'Advantage_system6.4' # 量子アニーリングマシン
    self.machine = False
    Sampler = [SASampler(), SQAASampler()]
    self.sampler = Sampler[0]
    self.ij_to_idx = {}

def myindex(self):
    Q = defaultdict(lambda: 0) #  $Q_{i,j}$  ( $i, j$ )に入れる値
    #  $x_{i,j}$  の通し番号を記録
    ij_to_idx = {}
    idx = 0
    for i in range(self.N):
        for j in range(self.N):
            ij_to_idx[(i, j)] = idx
            idx += 1
    self.ij_to_idx = ij_to_idx
    return Q, ij_to_idx

```

1.3.2 QUBO 行列を作る

各列の総和は等しい (f_1, f_2, f_3 の制約)

```

def constraint(self, Q, ij_to_idx):
    Q = self.constraint_row(Q, ij_to_idx)

```

```

    Q = self.constraint_clmn(Q, ij_to_idx)
    Q = self.constraint_diagonal(Q, ij_to_idx)
    Q = self.constraint_N(Q, ij_to_idx)
    return Q

def constraint_row(self, Q, ij_to_idx):
    # 各行の総和を  $S$  に制限 ( $f_1$ )
    for i in range(self.N):
        for j1 in range(self.N):
            for j2 in range(self.N):
                Q[(ij_to_idx[(i, j1)], ij_to_idx[(i, j2)])] += self.l1
                Q[(ij_to_idx[(i, j1)], ij_to_idx[(i, j1)])] -= 2 * self.S * self.l1
    return Q

def constraint_clmn(self, Q, ij_to_idx):
    # 各列の総和を  $S$  に制限 ( $f_2$ )
    for j in range(self.N):
        for i1 in range(self.N):
            for i2 in range(self.N):
                Q[(ij_to_idx[(i1, j)], ij_to_idx[(i2, j)])] += self.l1
                Q[(ij_to_idx[(i1, j)], ij_to_idx[(i1, j)])] -= 2 * self.S * self.l1
    return Q

def constraint_diagonal(self, Q, ij_to_idx):
    # 斜めの各列の総和は  $0$  または  $1$ 
    # 左上から右下の斜め制約 ( $i - j$  が等しい)
    for k in range(-self.N + 1, self.N): # 有効なダイアゴナルの範囲
        diagonal_indices = [(i, j) for i in range(self.N) for j in range(self.N) if
                               i - j == k]
        for idx1 in diagonal_indices:
            for idx2 in diagonal_indices:
                Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx2])] += self.l2
                Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx1])] -= 2 * self.S * self.l2

    # 右上から左下の斜め制約 ( $i + j$  が等しい)
    for k in range(2 * self.N - 1): # 有効なダイアゴナルの範囲
        diagonal_indices = [(i, j) for i in range(self.N) for j in range(self.N) if
                               i + j == k]
        for idx1 in diagonal_indices:
            for idx2 in diagonal_indices:
                Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx2])] += self.l2
                Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx1])] -= 2 * self.S * self.l2
    return Q

def constraint_N(self, Q, ij_to_idx):
    #  $N \times N$  の盤面上の数値の総和は  $N$  である
    for i1 in range(self.N):
        for j1 in range(self.N):
            for i2 in range(self.N):
                for j2 in range(self.N):
                    Q[(ij_to_idx[(i1, j1)], ij_to_idx[(i2, j2)])] += self.l3
                    Q[(ij_to_idx[(i1, j1)], ij_to_idx[(i1, j1)])] -= 2 * self.N * self.l3

```

```
return Q
```

1.3.3 量子アニーリングの実行

solver(Advantage.system6.4) という量子アニーリングマシンで, num_reads(今回は 1000) 回量子アニーリングを実行させることも可能だが有料になるので, Openjij のシミュレータを使うことにする. openjij から SASampler または SQAASampler のいずれかを使って, ここまでに作成した QUBO 行列 Q に基づいた量子アニーリングの実行をシミュレートすることができる.

```
def annealing(self, Q):
    if self.machine:
        # 量子アニーリングの実行
        endpoint = 'https://cloud.dwavesys.com/sapi/'
        dw_sampler = DWaveSampler(solver=self.solver, token=self.token, endpoint=
        endpoint)
        sampler = EmbeddingComposite(dw_sampler)
        sampleset = sampler.sample_qubo(Q, num_reads=self.num_reads)
    else:
        # 焼きなまし法の実行
        sampler = self.sampler
        sampleset = sampler.sample_qubo(Q, num_reads=self.num_reads)
    return sampleset
```

1.3.4 出力結果のフィルタ

量子アニーリングが出力する結果には, 最適化しきれずに制約条件を満たせないままのもの, あるいは同じ結果を重複して複数回出力しているもの, そして, 回転対称や鏡像の盤面も複数含まれて出力されてくる. まず制約条件を満たせないまま出力されているものを除外 (check_valid 関数) し, 対称な形も含めた重複出力を除外 (check_duplicate 関数) する様にしている.

```
def gen_mat(self, sset):
    mat = []
    for i in range(self.N):
        w = []
        for j in range(self.N):
            w.append(sset[(self.ij_to_idx[(i, j)])])
        mat.append(w)
    return mat

def same_p(self, sset1, sset2):
    s1 = np.array(sset1).flatten()
    s2 = np.array(sset2).flatten()
    if np.array_equal(s1, s2):
        return True
    return False

def check_row_clmn(self, mat):
    Sum = self.S
```

```

    for i in range(self.N):
        s = 0.0
        for j in range(self.N):
            s += mat[i][j]
        if Sum < s:
            return False
    return True

def check_diagonal(self, mat):    # def check2(mat):
    Sum = self.S
    # 左上から右下の斜め (i - j が等しい)
    for k in range(-self.N + 1, self.N):    # 有効なダイアゴナルの範囲
        diagonal_indices = [(i, j) for i in range(self.N) for j in range(self.N) if
            i - j == k]
        s = 0
        for d in diagonal_indices:
            s += mat[d[0]][d[1]]
        if Sum < s:
            return False
    # 右上から左下の斜め (i + j が等しい)
    for k in range(2 * self.N - 1):    # 有効なダイアゴナルの範囲
        diagonal_indices = [(i, j) for i in range(self.N) for j in range(self.N) if
            i + j == k]
        s = 0
        for d in diagonal_indices:
            s += mat[d[0]][d[1]]
        if Sum < s:
            return False
    return True

def check_valid(self, sampleset):
    removelist = []
    for nth, sset in enumerate(sampleset):
        # Convert the solution into the 2D matrix form
        mat = self.gen_mat(sset)    # Properly generate the matrix form
        # Conduct various checks (rows, columns, diagonals)
        ck1 = self.check_row_clmn(mat)    # Check rows
        if not ck1:
            removelist.append(nth)
            continue
        ck2 = self.check_row_clmn(transpose(mat))    # Check columns
        if not ck2:
            removelist.append(nth)
            continue
        ck3 = self.check_diagonal(mat)    # Check diagonals
        if not ck3:
            removelist.append(nth)
            continue
    return self.remove_from_sampleset(sampleset, removelist)

def check_duplicate(self, sampleset):
    # Ensure no duplicates due to symmetry or rotations
    removelist = []
    for nth1, sset1 in enumerate(sampleset):

```

```

        if nth1 in removelist:
            continue
        sets1 = self.variable_mat(sset1)
        for nth2, sset2 in enumerate(sampleset):
            if nth1==nth2 or nth2 in removelist:
                continue
            sets2 = self.variable_mat(sset2)
            for elem1 in sets1:
                for elem2 in sets2:
                    if self.same_p(elem1, elem2):
                        if nth2 not in removelist:
                            removelist.append(nth2)
                            break
                else:
                    continue
        return self.remove_from_sampleset(sampleset, removelist)

def remove_from_sampleset(self, sampleset, removelist):
    sampleset1 = []
    for nth, sset in enumerate(sampleset):
        if nth not in removelist:
            sampleset1.append(sset)
    return sampleset1

def variable_mat(self, sset):
    sets = []
    set0 = self.gen_mat(sset) # Convert to matrix form
    set1 = rotate90(set0)      # rotate 90
    set2 = rotate90(set1)      # rotate 180
    set3 = rotate90(set2)      # rotate 270
    set4 = np.fliplr(np.array(set)).copy().tolist()
    set5 = np.flipud(np.array(set)).copy().tolist()
    sets = [set0, set1, set2, set3, set4, set5]
    return sets

def check(self, sampleset):
    sampleset1 = self.check_valid(sampleset)
    tm1 = time.time()
    print("valid   =", len(sampleset1))
    sampleset2 = self.check_duplicate(sampleset1)
    tm2 = time.time()
    print("checked =", len(sampleset2))
    return sampleset2, tm1, tm2

```

1.3.5 結果出力 (可視化)

num_reads 回のアニーリングの結果から、重複、回転対称、鏡像などのチェックをクリアしたものを可視化している。

```

def result(self, resultset):
    for nth, sset in enumerate(resultset):
        mat = self.gen_mat(sset)

```



```

        print(nth+1)
        for i in range(self.N):
            print(mat[i])
        print()

```

または, 各出力結果ごとに, 回転対称 (90 度, 180 度, 270 度) のもの, 鏡像 (左右, 上下) のもの, を同時に生成出力して, 確認できるようにしたものは以下.

```

def result_check_do(self, resultset):
    for nth, sset in enumerate(resultset):
        sset = self.gen_mat(sset) # 行列の形に変換
        set1 = rotate90(sset)
        set2 = rotate90(set1)
        set3 = rotate90(set2)
        set4 = (np.array(sset)[: , :-1]).tolist()
        set5 = (np.array(sset).T[: , :-1].T).tolist()
        print(nth+1)
        for i in range(self.N):
            print(sset[i], set1[i], set2[i], set3[i], set4[i], set5[i])
        print()

```

1.3.6 実行 (主処理)

```

if __name__ == '__main__':
    start = time.time()
    eq = EightQueen()
    Q, ij2idx = eq.myindex()
    Q = eq.constraint(Q, ij2idx)
    ckpt1 = time.time()
    sampleset = eq.annealing(Q)
    ckpt2 = time.time()
    print("annealed=", len(sampleset))
    resultset, ckpt3, ckpt4 = eq.check(sampleset)
    eq.result_check_do(resultset)
    #
    print("Prepare:{}".format(ckpt1 - start))
    print("Annealing:{}".format(ckpt2 - ckpt1))
    print("ValidateCheck:{}".format(ckpt3 - ckpt2))
    print("DuplicateCheck:{}".format(ckpt4 - ckpt3))
    print("Total:{}".format(ckpt4 - start))

```

1.4 まとめ

実行例. 出力は以下の通り. 8 クィーンの場合, 10000 回の num_reads の内で, 制約条件を満たした出力だったのが 7074 個. その内, 重複や対称な恰好のものを除外した結果, 8 クィーンの基本解である 12 個を全て出力できている. また, それ以上の数を出してくることはない (重複を総当たりで潰しているのですか

ら) .elapsed time は, インテルシリコンの Mac で 1 分弱で済んでいる. num_reads を小さくすると, 出力はだんだん 12 個の基本解を網羅できなくなってくる.

```
annealed= 10000
valid    = 7074
checked  = 12

1
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]

2
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]

3
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]

4
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
```

[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]

5

[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]

6

[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]

7

[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]

8

[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]

[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]

9

[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]

10

[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]

11

[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]

12

[0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0]
[0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0]
[1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0]
[0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0]

[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1]

[0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0]

Prepare:0.003168821334838867

Annealing:20.62755823135376

ValidateCheck:3.63771915435791

DuplicateCheck:33.6769118309021

Total:57.94535803794861

プロセスは終了コード 0 で終了しました

第 2 章

QUBO の表現（その 2）

2.1 量子アニーリングで N-Queen を解く

2.1.1 定式化

N-Queen 問題を考えてみる. $x_{i,j,n}$ は, i 行 j 列目のマスに, $n \in \{1, 2, \dots, N^2\}$ を置くか否かを表すものとする. 例えば、

2 行 1 列目のマスに 5 を置く場合, $x_{2,1,5} = 1$ に、

1 行 3 列目のマスを 8 を置かない場合, $x_{1,3,8} = 0$ とする.

$(N \times N)$ の盤面における N-Queen 場合の場合, 変数の組み合わせは次の様になる.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} = \{ & \\ & x_{1,1,0}, x_{1,1,1}, x_{1,2,0}, x_{1,2,1}, \dots, x_{1,N,0}, x_{1,N,1}, \\ & x_{2,1,0}, x_{2,1,1}, x_{2,2,0}, x_{2,2,1}, \dots, x_{2,N,0}, x_{2,N,1}, \\ & \vdots \\ & x_{N,1,0}, x_{N,1,1}, x_{N,2,0}, x_{N,2,1}, \dots, x_{N,N,0}, x_{N,N,1} \} \end{aligned}$$

(ただしプログラムの実装時には, 配列の添字は 0 から $N - 1$ までの N 次の配列になるので, このことを考慮する必要がある)

量子アニーリングで解くということは, 評価関数 f の値が, この組み合わせ \boldsymbol{x} が正しい N-Queen の配置を構成できているときには小さい値になり, 間違った構成の場合には大きな値になる. その様な QUBO 行列 Q を決定していくことになる.

2.1.2 縦横どの 1 列の数値の総和も等しい

N-queen が正しい構成になるときは, 縦横のどの列についての総和も等しくなるという制約がある.

$$\begin{aligned}
f_0(x) &= \sum_k \sum_l \left(\sum_{(i,j) \in L_k} \sum_n n x_{i,j,n} - \sum_{(i,j) \in L_l} \sum_n n x_{i,j,n} \right)^2 \\
&= \sum_k \sum_l \left(\sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_k} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1,j_1,n_1} x_{i_2,j_2,n_2} \right. \\
&\quad - 2 \sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1,j_1,n_1} x_{i_2,j_2,n_2} \\
&\quad \left. + \sum_{(i_1,j_1) \in L_l} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1,j_1,n_1} x_{i_2,j_2,n_2} \right)
\end{aligned}$$

ここで, L_k と L_l は列に含まれるマスの集合のことで, 以下の通り. $L_1 \sim L_N$ は横の行, $L_{N+1} \sim L_{2N}$ は縦の列, を表している.

$$\begin{aligned}
L_1 &= \{(1, 1), (1, 2), \dots, (1, N)\} \\
L_2 &= \{(2, 1), (2, 2), \dots, (2, N)\} \\
&\vdots \\
L_N &= \{(N, 1), (N, 2), \dots, (N, N)\} \\
L_{N+1} &= \{(1, 1), (2, 1), \dots, (N, 1)\} \\
L_{N+2} &= \{(1, 2), (2, 2), \dots, (N, 2)\} \\
&\vdots \\
L_{2N} &= \{(1, N), (2, N), \dots, (N, N)\}
\end{aligned}$$

また, ある列 k の総和と, ある列 l の総和の差を d とすると,

$$\left(\sum_{(i,j) \in L_k} \sum_n n x_{i,j,n} - \sum_{(i,j) \in L_l} \sum_n n x_{i,j,n} \right)^2 = d^2$$

であることから, $d = 0$ の時 (すべての列の総和が等しい時) に最小になる.

(N-queen の各行および各列における総和 S は単に 1 になる.)

各行 (横方向) の値の総和は S である

$$\begin{aligned}
f_1(x) &= \sum_i \left(\sum_j \sum_n n x_{i,j,n} - S \right)^2 \\
&= \sum_i \left(\sum_{j_1} \sum_{j_2} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i,j_1,n_1} x_{i,j_2,n_2} - 2 \sum_j \sum_n S n x_{i,j,n} + S^2 \right)
\end{aligned}$$

$x_{i,j,n} \in \{0, 1\}$ に注意すると, $x_{i,j,n}$ は x を掛けた二次の恰好にしてもよい. また, 最小化問題では定数項は影響しないので無視できる (以下同様に)

各列（縦方向）の値の総和は S である

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{x}) &= \sum_j \left(\sum_i \sum_n n x_{i,j,n} - S \right)^2 \\ &= \sum_j \left(\sum_{i_1} \sum_{i_2} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1,j,n_1} x_{i_2,j,n_2} - 2 \sum_i \sum_n S n x_{i,j,n} + S^2 \right) \end{aligned}$$

斜め方向の値の総和は S である

$$f_3(\mathbf{x}) = \left(\sum_d \sum_n n x_{d,d,n} - S \right)^2 + \left(\sum_d \sum_n n x_{d,N-d+1,n} - S \right)^2$$

左側の項は右下がりの斜めの列に対する制約、右側の項は右上がりの斜めの列に対する制約

2.1.3 数値の $1 \sim N^2$ は 1 回しか使えない

$$f_4(\mathbf{x}) = \sum_n \left(\sum_i \sum_j x_{i,j,n} - 1 \right)^2$$

ある数値を丁度 1 回使う場合は、 $\left(\sum_i \sum_j x_{i,j,n} - 1 \right)^2 = 0$ となり、1 回も使わなかったり、複数回使ったりすると、0 より大きな値になってしまうため、 $1 \sim N^2$ を丁度 1 回使った場合に $f_4(x)$ は最小になる

2.1.4 各マスには 1 っしか数字を入れてはならない

$$f_5(\mathbf{x}) = \sum_i \sum_j \left(\sum_n x_{i,j,n} - 1 \right)^2$$

あるマスに丁度 1 つの数値を入れる場合は、 $\sum_i \sum_j (\sum_n x_{i,j,n} - 1)^2 = 0$ となり、1 つも入れなかったり、複数入れたりすると、0 より大きな値になってしまうため、全てのマスに数値を丁度 1 つ入る時に $f_5(x)$ は最小になる

2.1.5 $N \times N$ の盤面上にある数値の総和は N である

8-queen の場合、 N は 8 である。

$$\begin{aligned} f_6(\mathbf{x}) &= \left(\sum_i \sum_j \sum_n n x_{i,j,n} - N \right)^2 = \left(\sum_i \sum_j \sum_n n x_{i,j,n} - N \right) \left(\sum_i \sum_j \sum_n n x_{i,j,n} - N \right) \\ &= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1, j_1, n_1} x_{i_2, j_2, n_2} - 2 \sum_i \sum_j \sum_n n N x_{i,j,n} + N^2 \\ &= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} \sum_{n_1} \sum_{n_2} n_1 n_2 x_{i_1, j_1, n_1} x_{i_2, j_2, n_2} - 2 \sum_i \sum_j \sum_n n N x_{i,j,n} x_{i,j,n} \end{aligned}$$

$x_{i,j} \in \{0, 1\}$ を考慮して, 二次形式に直している.

2.1.6 N-Queen 生成の評価関数

以上の制約を足し合わせることで, N-Queen 生成に必要な評価関数を作ることができる

$$f(\mathbf{x}) = \lambda_1 f_1(\mathbf{x}) + \lambda_1 f_2(\mathbf{x}) + \lambda_1 f_3(\mathbf{x}) + \lambda_2 f_4(\mathbf{x}) + \lambda_3 f_5(\mathbf{x}) + \lambda_4 f_6(\mathbf{x})$$

或いは,

$$f(\mathbf{x}) = \lambda_1 f_0(\mathbf{x}) + \lambda_2 f_4(\mathbf{x}) + \lambda_3 f_5(\mathbf{x}) + \lambda_4 f_5(\mathbf{x})$$

2.2 実装

当初, すでに作成済みの EightQueen クラスを継承して, AnotherEQ クラスを作ろうと考えたが, 全て作り直した形で実装することができた. EightQueen クラスと名前が重なっている関数は 2 つ (same_p() と result()) だが, 両方とも上書き状態で実装しているので親クラスの寄与はないはず.

```
from __future__ import annotations
from main import EightQueen
import numpy as np
from openjij import SASampler, SQASampler
from collections import defaultdict

class AnotherEQ(EightQueen):
    def __init__(self, N=8, S=1, lambda_1=1, lambda_3=1, lambda_diag=1):
        super().__init__()
        self.N = N # 盤面のサイズ
        self.l_1 = lambda_1
        self.l_3 = lambda_3
        self.l_diag = lambda_diag
        self.S = S
        self.ijn_to_idx = {} # QUBOキー部のタプルとインデックスの対応
        self.samplers = [SASampler(), SQASampler()]

    def qubo_init(self):
        Q = defaultdict(lambda: 0)
        self.ijn_to_idx = {} # QUBOキー部のタプルとインデックスの対応
        idx = 0
        for i in range(self.N):
            for j in range(self.N):
                for n in range(2):
                    self.ijn_to_idx[(i, j, n)] = idx
                    idx += 1
        return Q

    def add_row_column_constraints(self, Q):
        # 行方向の和は1
        for i in range(self.N):
```

```

        for j1 in range(self.N):
            for n1 in range(2):
                idx = self.ijn_to_idx[(i, j1, n1)]
                for j2 in range(self.N):
                    for n2 in range(2):
                        jdx = self.ijn_to_idx[(i, j2, n2)]
                        Q[(idx, jdx)] += n1 * n2 * self.l_1
                        Q[(idx, idx)] -= 2 * n1 * self.S * self.l_1
# 列方向の和は1
for j in range(self.N):
    for i1 in range(self.N):
        for n1 in range(2):
            idx = self.ijn_to_idx[(i1, j, n1)]
            for i2 in range(self.N):
                for n2 in range(2):
                    jdx = self.ijn_to_idx[(i2, j, n2)]
                    Q[(idx, jdx)] += n1 * n2 * self.l_1
                    Q[(idx, idx)] -= 2 * n1 * self.S * self.l_1

def add_diagonal_constraints(self, Q):
    """
    Add constraints to ensure that all diagonal (main and anti-diagonal,
    including offset diagonals)
    sums are equal to 1 in the QUBO formulation.

    Args:
        Q (dict): QUBO dictionary to store constraints.
        ijn_to_idx (dict): Index mapping for (i, j, n).
        N (int): Size of the grid (N x N).
        l_diag (float): Weight for diagonal constraints.

    Returns:
        None: Modifies Q in-place to add diagonal constraints.
    """
# --- 主対角線およびその平行な斜め方向の制約を追加 ---
for offset in range(-self.N + 1, self.N): # オフセットを考慮
    involved_indices = []
    for i in range(self.N):
        j = i + offset
        if 0 <= i < self.N and 0 <= j < self.N: # 有効な範囲
            for n in range(2): # n = 0 or 1
                involved_indices.append(self.ijn_to_idx[(i, j, n)])

# 制約のペナルティ項を QUBO に追加
for idx1 in involved_indices:
    for idx2 in involved_indices:
        Q[(idx1, idx2)] += self.l_diag # 対角項
        Q[(idx1, idx1)] -= 2 * self.S * self.l_diag # 線形項

# --- 副対角線およびその平行な斜め方向の制約を追加 ---
for offset in range(-self.N + 1, self.N): # オフセットを考慮
    involved_indices = []
    for i in range(self.N):
        j = self.N - 1 - i + offset

```

```

        if 0 <= i < self.N and 0 <= j < self.N: # 有効な範囲
            for n in range(2): # n = 0 or 1
                involved_indices.append(self.ijn_to_idx[(i, j, n)])

    # 制約のペナルティ項を QUBO に追加
    for idx1 in involved_indices:
        for idx2 in involved_indices:
            Q[(idx1, idx2)] += self.l_diag # 対角項
            Q[(idx1, idx1)] -= 2 * self.S * self.l_diag # 線形項

def add_only_one_number_placed_constraints(self, Q):
    # 各マスには1つしか数値を置かない
    for i in range(self.N):
        for j in range(self.N):
            for n1 in range(2):
                idx = self.ijn_to_idx[(i, j, n1)]
                for n2 in range(2):
                    jdx = self.ijn_to_idx[(i, j, n2)]
                    Q[(idx, jdx)] += 1 * self.l_3
                    Q[(idx, idx)] -= 2 * self.l_3

def generate_QUBO(self):
    Q = self.qubo_init()
    #--- 行方向と列方向の総和制約を追加 ---
    self.add_row_column_constraints(Q)
    #--- 各マスには1つしか数値を置かない ---
    self.add_only_one_number_placed_constraints(Q)
    # --- 斜め方向の総和制約を追加 ---
    self.add_diagonal_constraints(Q)
    # QUBO行列を返す
    return Q

def solve(self, Q, sampler=0, num_reads=100):
    sampleset = self.samplers[sampler].sample_qubo(Q, num_reads=num_reads)
    # 計算の結果出力
    result_records = list(sampleset.data())
    # エネルギーの大きい順に並び替え(最後が最も小さい)
    sorted_results = sorted(result_records, key=lambda record: record.energy,
reverse=True)
    # 結果を格納
    all_answers = []
    for k, record in enumerate(sorted_results):
        candidate = list(record.sample.values())
        ans = [[0] * self.N for _ in range(self.N)] # ans = [[None] * N for _
in range(N)]
        for i in range(self.N):
            for j in range(self.N):
                for n in range(2):
                    if candidate[self.ijn_to_idx[(i, j, n)]] == 1:
                        ans[i][j] = n
        all_answers.append((record.energy, ans)) # エネルギーと解を保存
    # 点対称、線対称、重複チェック
    non_symmetric = self.remove_symmetric_duplicates(all_answers)
    unique_results = self.filter_answers(non_symmetric)

```

```

        return unique_results
        #return all_answers

def select_sampler(self):
    pass

def rotate_180(self, answer):
    """
    与えられた2次元リストを180度回転させる関数
    """
    # 入力データが2次元リストであることを確認
    if not isinstance(answer, list) or not all(isinstance(row, list) for row in
answer):
        raise ValueError("rotate_180 関数には2次元リストを渡す必要があります。"
)
    return [row[::-1] for row in answer[::-1]]

def rotate_90(self, answer):
    """
    与えられた2次元リストを90度回転させる関数
    """
    if not isinstance(answer, list) or not all(isinstance(row, list) for row in
answer):
        raise ValueError("rotate_90 関数には2次元リストを渡す必要があります。")
    # 転置して各行を逆順にすることで90度回転
    return [list(row) for row in zip(*answer[::-1])]

def same_p(self, m, result, unique_results):
    num = []
    entry = result.flatten()
    for n, matrix in enumerate(unique_results):
        if m!=n:
            work = np.array(matrix[1]).flatten()
            if np.array_equal(entry, work):
                num.append(n)
    return num

def line_symmetric_duplicates(self, unique_results):
    filtered_results = []
    num0, num1, num2 = [], [], []
    for m, result in enumerate(unique_results):
        entry = np.array(result[1])[:, ::-1]      # 左右対称チェック
        a = np.array( num1 )
        b = np.array( self.same_p(m, entry, unique_results) )
        num1 = np.concatenate([a, b], axis=0)
        #
        entry = np.array(result[1]).T[:, ::-1].T    # 上下対称チェック
        a = np.array( num2 )
        b = np.array( self.same_p(m, entry, unique_results) )
        num2 = np.concatenate([a, b], axis=0)
        #
        entry = np.array(result[1])
        a = np.array( num0 )
        b = np.array( self.same_p(m, entry, unique_results) )

```

```

        num0 = np.concatenate([a, b], axis=0)
    for m, result in enumerate(unique_results):
        if m not in num0 and m not in num1 and m not in num2:
            filtered_results.append(result)
    return filtered_results

def remove_symmetric_duplicates(self, results):
    ww = self.point_symmetric_duplicates(results)
    return self.line_symmetric_duplicates(ww)

def point_symmetric_duplicates(self, results):
    """
    回転対称 (90度, 180度, 270度) な解を削除する関数
    """
    unique_results = []
    seen = set()
    for energy, result in results:
        # 各回転状態を計算
        rotated_90 = self.rotate_90(result)
        rotated_180 = self.rotate_90(rotated_90) # 90度回転をさらに90度回転
        rotated_270 = self.rotate_90(rotated_180) # 180度回転をさらに90度回転
        # 全方向の状態をタプル形式に変換
        result_tuple = tuple(map(tuple, result))
        rotated_90_tuple = tuple(map(tuple, rotated_90))
        rotated_180_tuple = tuple(map(tuple, rotated_180))
        rotated_270_tuple = tuple(map(tuple, rotated_270))
        # どれか1つでも既に記録されていればスキップ
        if (result_tuple not in seen and
            rotated_90_tuple not in seen and
            rotated_180_tuple not in seen and
            rotated_270_tuple not in seen):
            # 重複がなければ追加
            unique_results.append((energy, result))
            seen.add(result_tuple) # オリジナルを記録
            seen.add(rotated_90_tuple) # 90度回転を記録
            seen.add(rotated_180_tuple) # 180度回転を記録
            seen.add(rotated_270_tuple) # 270度回転を記録
    return unique_results

def check_diagonal_sums(self, matrix):
    n = matrix.shape[0]
    #print(matrix)
    # 主対角線とその平行な斜め方向のチェック
    for offset in range(-n + 1, n): # オフセットを考慮
        #print(offset, np.diagonal(matrix, offset=offset))
        diag_sum = np.sum(np.diagonal(matrix, offset=offset))
        if diag_sum > 1: # 条件: 斜めの和が 1
            return False
    # 副対角線とその平行な斜め方向のチェック
    flipped_matrix = np.fliplr(matrix)
    for offset in range(-n + 1, n): # オフセットを考慮
        anti_diag_sum = np.sum(np.diagonal(flipped_matrix, offset=offset))

```

```

        if anti_diag_sum > 1: # 条件：斜めの和が 1
            return False
        return True

def filter_answers(self, all_answers):
    filtered_answers = []
    for energy, ans in all_answers:
        ans = np.array(ans)
        # None を含む行列は除外
        if np.any(ans == None): # Noneチェック
            continue
        # 横方向の和がすべて1
        row_sum_valid = np.all(np.sum(ans, axis=1) == 1)
        # 縦方向の和がすべて1
        col_sum_valid = np.all(np.sum(ans, axis=0) == 1)
        # 斜め方向のすべての和が1
        diagonal_sum_valid = self.check_diagonal_sums(ans)
        # 条件を満たしている場合のみ追加
        if row_sum_valid and col_sum_valid and diagonal_sum_valid:
            filtered_answers.append((energy, ans.tolist()))
    return filtered_answers

def result(self, results):
    # 結果を表示
    print("回転対称、鏡像を除いた結果:\n")
    for idx, (energy, ans) in enumerate(results):
        print(f"\n候補 {idx + 1} (エネルギー: {energy}):")
        for row in ans:
            print(" ".join(map(str, row)))
        print("-" * 16)

if __name__ == "__main__":
    eq = AnotherEQ(N=8, S=1, lambda_1=1, lambda_3=1, lambda_diag=1)
    Q = eq.generate_QUBO()
    results = eq.solve(Q, sampler=0, num_reads=10000)
    # for result in results:
    #     print(result)
    eq.result(results)

```

2.3 実行結果

回転対称、鏡像を除いた結果:

候補 1 (エネルギー: -55.0):

```

0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0

```

```
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0
```

候補 2 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 0 0 0 1
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0
```

候補 3 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 0 0 1 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 1 0 0 0
```

候補 4 (エネルギー: -55.0):

```
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 1 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
```

候補 5 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
```

```
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0
-----
```

候補 6 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
-----
```

候補 7 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 1 0 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 1 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
-----
```

候補 8 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 1 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 1 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0
-----
```


候補 9 (エネルギー: -55.0):

```
0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 1 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0
```

候補 10 (エネルギー: -56.0):

```
0 0 0 0 1 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 1 0 0 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0
```

候補 11 (エネルギー: -57.0):

```
0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 1 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0
```

候補 12 (エネルギー: -57.0):

```
0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0
0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1
1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 1 0 0 0 0
```

```
0 0 0 0 0 1 0 0
-----
```

プロセスは終了コード 0 で終了しました