第1章

Eight Queen Problem

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 問題を考えてみる. $x_{i,j}$ は,i 行 j 列目のマスを, 0 にするか 1 にするかを表すものとする. 例えば、

- 2 行 1 列目のマスを 1 にする場合, $x_{2,1} = 1$ に、
- 1行3列目のマスを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様になる.

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

(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 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.

$$f_0(x) = \sum_{k} \sum_{l} \left(\sum_{(i,j) \in L_k} x_{i,j} - \sum_{(i,j) \in L_l} x_{i,j} \right)^2$$

$$= \sum_{k} \sum_{l} \left(\sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_k} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2} - 2 \sum_{(i_1,j_1) \in L_k} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2} \right)$$

$$+ \sum_{(i_1,j_1) \in L_l} \sum_{(i_2,j_2) \in L_l} x_{i_1,j_1} x_{i_2,j_2}$$

ただし, L_k 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.

$$L_{1} = \{(1,1), (1,2), \dots, (1,N)\}$$

$$L_{2} = \{(2,1), (2,2), \dots, (2,N)\}$$

$$\vdots$$

$$L_{N} = \{(N,1), (N,2), \dots, (N,N)\}$$

$$L_{N+1} = \{(1,1), (2,1), \dots, (N,1)\}$$

$$L_{N+2} = \{(1,2), (2,2), \dots, (N,2)\}$$

$$\vdots$$

$$L_{2N} = \{(1,N), (2,N), \dots, (N,N)\}$$

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

$$f_1(\mathbf{x}) = \sum_{i} \left(\sum_{j} x_{i,j} - S \right)^2$$

$$= \sum_{i} \left(\sum_{j_1} \sum_{j_2} x_{i,j_1} x_{i,j_2} - 2 \sum_{j} S x_{i,j} + S^2 \right)$$

 $x_{i,j} \in \{0,1\}$ 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

$$f_2(\mathbf{x}) = \sum_{j} \left(\sum_{i} x_{i,j} - S \right)^2$$

$$= \sum_{j} \left(\sum_{i_1} \sum_{i_2} x_{i_1,j} x_{i_2,j} - 2 \sum_{i} S x_{i,j} + S^2 \right)$$

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 盤面の数値の総和は N である

8-queen の場合, N は 8 である.

$$f_4(\mathbf{x}) = \left(\sum_{i} \sum_{j} x_{i,j} - N\right)^2 = \left(\sum_{i} \sum_{j} x_{i,j} - N\right) \left(\sum_{i} \sum_{j} x_{i,j} - N\right)$$

$$= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} x_{i_1, j_1} x_{i_2, j_2} - 2 \sum_{i} \sum_{j} N x_{i,j} + N^2$$

$$= \sum_{i_1, i_2} \sum_{j_1, j_2} x_{i_1, j_1} x_{i_2, j_2} - 2 \sum_{i} \sum_{j} N x_{i,j} x_{i,j}$$

 $x_{i,j} \in \{0,1\}$ 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.

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

或いは、

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

1.3 実装

 $\verb|pip| install dwave-ocean-sdk|$

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, SQASampler | 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 Eight Queen クラスにまとめてたもの. 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NxN
 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.12 = 1.5 # 罰金項の強さ (斜めの総和は0または1)
 self.13 = 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(個人のものを使用)
 self.solver = 'Advantage_system6.4' # 量子アニーリングマシン
 self.machine = False
 Sampler = [SASampler(), SQASampler()]
 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 (f1)
 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.11
         Q[(ij_to_idx[(i, j1)], ij_to_idx[(i, j1)])] = 2 * self.S * self.11
 return 0
def constraint_clmn(self, Q, ij_to_idx):
  # 各列の総和を Sに制限 (f2)
 for j in range(self.N):
     for i1 in range(self.N):
         for i2 in range(self.N):
             \label{eq:Q-def}  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○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.12
         Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx1])] -= 2 * self.S * self.12
  # 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.12
         Q[(ij_to_idx[idx1], ij_to_idx[idx1])] -= 2 * self.S * self.12
 return Q
def constraint_N(self, Q, ij_to_idx):
 # N x 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.13
         Q[(ij_to_idx[(i1, j1)], ij_to_idx[(i1, j1)])] -= 2 * self.N * self.13
```

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 SQASampler 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
          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 = []
  set = self.gen_mat(sset) # Convert to matrix form
  set1 = rotate90(set) # 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 = [set, 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, 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, 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, 1]

4

- [0, 0, 0, 0, 1, 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, 1, 0, 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, 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, 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, 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, 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, 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 ○ で終了しました