

 $smat1957@gmail.com^{*1}$

2025年4月23日

 $^{^{*1}}$ https://altema.is.tohoku.ac.jp/QA4U3/

第1章

量子ニーリングの基礎

[1] 西森秀稔、大関真之 著「量子アニーリングの基礎」共立出版より 2.6.1

1.1 問題

予め決められた地点を全て1度ずつ訪れて元の地点に戻ってくるための最短経路を探す。

例えば、A,B,C,D,E の 5 つの地点があって、仮に A からスタートすると、次の地点は B,C,D,E の 4 箇所の中から選ばなければならない。B を選んだら次は C,D,E の 3 通り。その次は 2 通り。最終的には $4\times3\times2\times=24$ 通りの選び方がある事になる。訪れる地点の数が N 地点だと、 $(N-1)\times(N-2)\times\cdots\times2\times1=(N-1)!$ 通りになる。N が大きいと総当たりで経路を探すことは困難であり、巡回セールスマン問題は「NP 困難問題」に分類されている。

1.2 巡回セールスマン問題をイジング模型で表す

まず、 $N\times N$ の表を考え、横方向に地点の名前(A,B,C,D,E)、縦方向には何番目に訪れるかを割り当てる。

	A	В	\mathbf{C}	D	\mathbf{E}
1番目	1	0	0	0	0
2番目	0	0	1	0	0
3番目	0	1	0	0	0
4番目	0	0	0	1	0
5番目	0	0	0	0	1
1番目	1	0	0	0	0

表 1.1 表のタイトル

セールスマンが訪れる箇所には 1 を、そうでない所には 0 を置く。上の表の例では、 $A \to C \to B \to D \to E \to A$ という経路に対応している。

式で表現するために、表の各箇所に対応した 2 値変数 $q_{\alpha i}$ を割り当ててセールスマンの辿る経路を表現する。 α は地点名(A,B,C,\cdots)を、i は巡る順番($1,2,3,\cdots$)を表している。

地点 α と β の間の距離 $d_{\alpha\beta}$ が予め与えられているとすると、セールスマンが巡る全経路長 L は、

$$L = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^{N} d_{\alpha\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i+1}$$

 $q_{\alpha,i}$ は 2 値変数(0 か 1)なので、 $q_{\alpha,i}$ と $q_{\beta,i+1}$ の両方が 1 の場合に限り、 $d_{\alpha\beta}$ が L に加算される事になる。この経路長 L を最小にする $\{q_{\alpha,i}\}$ (0 か 1 か)、を選ぶことになる。 ただし、

- ◆ 各地点には1度しか訪れない(表では、各列に1は1つだけ)
 - \longrightarrow 各 α において、 $(\sum_i q_{\alpha,i} 1)^2 = 0$
- 各時点で訪れる地点は1箇所だけ(表では、各行に1は1つだけ)

$$\longrightarrow$$
 各 i において、 $(\sum_{\alpha} q_{\alpha,i} - 1)^2 = 0$

という 2 つの制約が課された上で、L が最小になる様に $\{q_{\alpha,i}\}$ を選ばなければならない。 以上の考察より、目的関数全体の H は次の様になる

$$H = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i} d_{\alpha\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i+1} + \lambda \sum_{\alpha} \left(\sum_{i} q_{\alpha,i} - 1 \right)^{2} + \lambda \sum_{i} \left(\sum_{\alpha} q_{\alpha,i} - 1 \right)^{2}$$

 λ は正の定数。

1.3 式の展開

$$\begin{split} H &= \lambda \sum_{\alpha} \left((\sum_{i} q_{\alpha,i})^{2} - 2 \sum_{i} q_{\alpha,i} \right) + \lambda \sum_{i} \left((\sum_{\alpha} q_{\alpha,i})^{2} - 2 \sum_{\alpha} q_{\alpha,i} \right) + \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i} d_{\alpha\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i+1} \\ &= \lambda \sum_{\alpha} \left(\sum_{i} q_{\alpha,i}^{2} + 2 \sum_{i,j} q_{\alpha,i} q_{\alpha,j} - 2 \sum_{i} q_{\alpha,i} \right) + \lambda \sum_{i} \left(\sum_{\alpha} q_{\alpha,i}^{2} + 2 \sum_{\alpha,\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i} - 2 \sum_{\alpha} q_{\alpha,i} \right) \\ &+ \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i} d_{\alpha\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i+1} \\ &= -\lambda \sum_{\alpha} \left(\sum_{i} q_{\alpha,i} - 2 \sum_{i} \sum_{j} q_{\alpha,i} q_{\alpha,j} \right) - \lambda \sum_{i} \left(\sum_{\alpha} q_{\alpha,i} - 2 \sum_{\alpha} \sum_{\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i} \right) + \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i} d_{\alpha\beta} q_{\alpha,i} q_{\beta,i+1} \end{split}$$

ここで q は 2 値変数なので、 $q^2 = q$ が成り立つ。また、定数は最小化では無視できる。

1.4 実装

```
from openjij import SASampler, SQASampler
from collections import defaultdict, Counter
import numpy as np

class TSP:
    def __init__(self, city, cost_matrix):
        samplers = [SASampler(), SQASampler]
        self.sampler = samplers[0]
        self.cities = len(city)
```

```
self.cost_matrix = np.array(cost_matrix)
def gen_qubo1(self, cities):
   qubo_size = cities * cities
   Q1 = np.zeros((qubo_size, qubo_size))
   #u,vは訪れる都市。i,jは巡回の順番
   indices = [(u, v, i, j) for u in range(cities) for v in range(cities) for i
in range(cities) for j in range(cities)]
   for u,v,i,j in indices:
       ui = u * cities + i
       vj = v * cities + j
       if ui>vj: # 上三角だけ
           continue
       if ui==vj: # 対角要素 \sum_\alpha\sum_i
           Q1[(ui, vj)] -= 2
       if u==v and i!=j: # 都市が同じ(u==v)でタイミングが異なる(i!=j)
           Q1[(ui, vj)] += 2
       if u < v and i == j: # 同一タイミング (i == j) で都市が異なる (u < v)
           Q1[(ui, vj)] += 2
   return Q1
def gen_qubo2(self, cities, cost_matrix):
   qubo_size = cities * cities
   Q2 = np.zeros((qubo_size, qubo_size))
   #u,vは訪れる都市。i,jは巡回の順番
   indices = [(u, v, i, j) for u in range(cities) for v in range(cities) for i
in range(cities) for j in range(cities)]
   for u, v, i, j in indices:
       ui = u * cities + i
       vj = v * cities + j
       k = abs(i - j)
                  # 上三角だけ
       if ui>vj:
           continue
       if (k == 1 or k == (cities - 1)) and u < v: # 隣り合う都市順なら
           for r in range(len(cost_matrix)):
               if cost_matrix[r][0] == u and cost_matrix[r][1] == v:
                   Q2[ui][vj] += cost_matrix[r][2] # 都市の uとvの間のコスト
   return Q2
def gen_qubo(self, lagrange1=1.0, lagrange2=1.0):
   Q1 = self.gen_qubo1(self.cities)
   Q2 = self.gen_qubo2(self.cities, self.cost_matrix)
   Q = lagrange1 * Q1 + lagrange2 * Q2
   return Q
def solv(self, Q, num_reads=1):
   response = self.sampler.sample_qubo(Q, num_reads=num_reads)
   #sample = response.first.sample
   return response
def result(self, sample_frequency):
   solved = []
   for solution in sample_frequency:
       if not tsp.check(np.array(solution).reshape(cities, cities)):
```

```
continue
        else:
            solved.append(solution)
    ans = []
    min_cost = cost_matrix[0][2] * 100
    for item in solved:
        jyun = []
        w = np.array(item).reshape(cities, cities)
        for row in range(cities):
            for clmn in range(cities):
                if w[row][clmn] == 1:
                    jyun.append(city[clmn])
        cost = u = v = 0
        for i, c in enumerate(jyun):
            u = city.index(jyun[i])
            if i == len(jyun) - 1:
                v = city.index(jyun[0])
            else:
                v = city.index(jyun[i + 1])
            for r in range(len(cost_matrix)):
                if cost_matrix[r][0] == u and cost_matrix[r][1] == v:
                    cost += cost_matrix[r][2] # 都市のuとvの間のコスト
                    break
        sol = (jyun, cost)
        if cost<min_cost:</pre>
            min_cost = cost
        ans.append(sol)
    return ans, min_cost
def evaluate(self, sampleset, prn=True):
    # Extract sample solutions, energies, and sort them by frequency
    samples = sampleset.record['sample']
    energies = sampleset.record['energy']
    # Combine solutions and corresponding energies
    sample_data = [(tuple(sample), energy) for sample, energy in zip(samples,
energies)]
    # Sort the results by appearance frequency and then energy
    sample_frequency = Counter(sample for sample, _ in sample_data)
    # Print sorted results by frequency and include energy
    if prn:
        print("\nSorted samples by frequency and energy:")
        for solution, freq in sample_frequency.most_common():
            energy = next(energy for sample, energy in sample_data if sample ==
 solution)
            print(f"Sample: {solution}, Frequency: {freq}, Energy: {energy:+.2f
}")
    return sample_data, sample_frequency
def check(self, w):
    for row in w:
        sum = 0
        for s in row:
            sum += s
        if sum!=1:
```

```
return False
        wt = w.T
        for row in wt:
            sum = 0
            for s in row:
                sum += s
            if sum!=1:
                return False
        return True
if __name__ == '__main__':
    city=["A", "B", "C", "D", "E"]
    cost = np.array([
    [0.0, 3.0, 4.0, 2.0, 7.0],
    [3.0, 0.0, 4.0, 6.0, 3.0],
    [4.0, 4.0, 0.0, 5.0, 8.0],
    [2.0, 6.0, 5.0, 0.0, 6.0],
    [7.0, 3.0, 8.0, 6.0, 0.0]])
    cost_matrix = []
    for i, row in enumerate(cost):
        for j, column in enumerate(cost.T):
            if i!=j:
                row1 = [i, j, cost[i][j]]
                cost_matrix.append(row1)
    tsp = TSP(city, cost_matrix)
    lagrange2=1/15
    Q = tsp.gen_qubo(lagrange2=lagrange2)
    sampleset = tsp.solv(Q, num_reads=100)
    sample_data, sample_frequency = tsp.evaluate(sampleset, prn=False)
    answer, min_cost = tsp.result(sample_frequency)
    for ans, cost in answer:
        if cost==min_cost:
            print(ans, cost)
```

プログラム 1.1 巡回セールスマン問題

[実行結果] A,C,B,E,D が循環している(どこからスタートしたかによる)

['A', 'C', 'B', 'E', 'D'] 19.0 ['E', 'B', 'C', 'A', 'D'] 19.0 ['D', 'E', 'B', 'C', 'A'] 19.0 ['B', 'E', 'D', 'A', 'C'] 19.0 ['D', 'A', 'C', 'B', 'E'] 19.0 ['C', 'B', 'E', 'D', 'A'] 19.0 ['C', 'A', 'D', 'E', 'B'] 19.0 ['A', 'D', 'E', 'B', 'C'] 19.0

	同じコストで、あり得る巡回経路										
	順方向				逆方向						
	A	С	В				Ε		С	A	
	С	В	\mathbf{E}	D	A	A	D	\mathbf{E}	В	С	
	В	\mathbf{E}	D	A	\mathbf{C}	С	A	D	\mathbf{E}	В	
\rightarrow	E	D	A	\mathbf{C}	В	В	\mathbf{C}	A	D	Ε	
	D	A	С	В	E	E	В	С	A	D	

プロセスは終了コード 0 で終了しました

→ 今回、この2つは出ていない(実行の都度変わる)

参考文献

- [1] 西森秀稔、大関真之, 量子アニーリングの基礎, 共立出版, 2.6.1
- [2] https://qiita.com/suzuki_sh/items/32468fbbe3f400edce35
- [3] https://qiita.com/yabish/items/9f42e3752174aef8b79f
- [4] https://qiita.com/yufuji25/items/0425567b800443a679f7
- [5] https://motojapan.hateblo.jp/entry/2017/11/15/082738