第1章

ナップザック問題を量子アニーリングで 解く

1.1 問題

それぞれに価値 v とコスト(例えば体積)c が設定されている N 個の荷物がある。あるナップザックに、それらから荷物を選んで詰めて運ぼうとしている。運ぶ荷物の価値の総和ができるだけ大きくになる様に荷物を選びたいが、ナップザックには許容される容量に限度があり、その値は C である。この決められたコストを上回らない様に、選んだ荷物の価値合計を最大化する様な荷物の選び方を決める問題である。

N 個の荷物にインデックス $\alpha=1,2,\cdots,N$ をつける。ナップザックに入れる荷物に対応する変数には 1 を、入れない荷物には 0 を割り当てる事にすると、この問題は以下の様に書ける。

$$max \qquad \sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha} q_{\alpha} \qquad s.t. \qquad \sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} q_{\alpha} \le C$$
 (1.1)

1.2 定式化 (その1)

イジングモデルのハミルトニアン H は、選択した荷物の価値合計を最大化する項 H_{value} と、コストを C 以下になる様にする制約事項の項 H_{cost} の 2 つからなっている。

$$H = H_{value} + H_{cost} (1.2)$$

 H_{value} は次の通り

$$H_{value} = -\sum_{\alpha}^{N} v_{\alpha} q_{\alpha} , \qquad q_{\alpha} \in \{0, 1\}$$
 (1.3)

価値の合計が最大の時に、 H_{value} は最小値をとる。

一方、制約条件の項だが、選んだ荷物のコスト(各体積)の合計 $\sum_{\alpha} c_{\alpha}q_{\alpha}$ が、ナップザックの最大許容体積である C と等しいとする制約条件ならば、次の様になる

$$H_{cost} = \lambda \left(C - \sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} q_{\alpha} \right)^{2}$$
 (1.4)

ここで、パラメータ λ は正の定数である。

この制約条件を展開する

$$\begin{split} H_{cost} &= \lambda \bigg(C - \sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha}\bigg)^{2} = \lambda \bigg(C^{2} - 2C\sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha} + \bigg(\sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha}\bigg)^{2}\bigg) \\ &= \lambda \bigg(-2C\sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} q_{\alpha} + \sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha}^{2} q_{\alpha}^{2} + 2\sum_{\alpha_{1} < \alpha_{2}} c_{\alpha_{1}} c_{\alpha_{2}} q_{\alpha_{1}} q_{\alpha_{2}}\bigg) \\ &= \lambda \bigg(\sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} (c_{\alpha} - 2C) q_{\alpha} + 2\sum_{\alpha_{1} < \alpha_{2}} c_{\alpha_{1}} c_{\alpha_{2}} q_{\alpha_{1}} q_{\alpha_{2}}\bigg) \\ &= \lambda \bigg(\sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} (c_{\alpha} - 2C) q_{\alpha} + 2\sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta=\alpha+1}^{N} c_{\alpha} c_{\beta} q_{\alpha} q_{\beta}\bigg) \end{split}$$

式の変形にあたっては、以下の性質を利用している.

$$\left(\sum_{i} a_{i} x_{i}\right)^{2} = \sum_{i} a_{i}^{2} x_{i}^{2} + 2 \sum_{i < j} a_{i} a_{j} x_{i} x_{j}$$

また, バイナリ変数に対する $s_k^2 = s_k, \ s_k \in \{0,1\}$ の性質も使っている。

こうして、この問題のハミルトニアン H は、 λ_1 と λ_2 を正の定数として、次の様に書ける。

$$H = H_{cost} + H_{value} = \lambda_1 \left(\sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} (c_{\alpha} - 2C) q_{\alpha} + 2 \sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta=\alpha+1}^{N} c_{\alpha} c_{\beta} q_{\alpha} q_{\beta} \right) - \lambda_2 \sum_{\alpha=1}^{N} v_{\alpha} q_{\alpha}$$

1.2.1 実装

具体的な問題を解いてみる。下表の通り、A,B,C,D,E の N=5 個の荷物がある。それぞれの荷物の価値と体積は表の通りである。また、ナップザックの最大許容体積 C は 12 である。

荷物	A	В	С	D	Е
インデックス (α)	1	2	3	4	5
体積 (c_{α})	3	4	6	1	5
価値 (v_{α})	6	7	8	1	4

プログラムのコードに落としてみると次の通り

```
from openjij import SASampler, SQASampler
from collections import defaultdict, Counter

class MODEL1:
    def __init__(self):
        self.N = 5
        self.C = 12.0
        self.c = [3.0, 4.0, 6.0, 1.0, 5.0]
        self.v = [6.0, 7.0, 8.0, 1.0, 4.0]
        self.L1 = 1.0
        self.L2 = self.L1 / 9.0
```

```
\#self.Q = defaultdict(lambda: 0.0)
    Samplers = [SASampler, SQASampler]
    self.sampler = Samplers[1]()
def cost(self, Q):
    for a in range(self.N):
        Q[(a, a)] += self.L1 * self.c[a] * (self.c[a] - 2.0 * self.C)
    for a in range(self.N - 1):
        for b in range(a + 1, self.N):
            Q[(a, b)] += 2.0 * self.L1 * self.c[a] * self.c[b]
def value(self, Q):
    for a in range(self.N):
        Q[(a, a)] = self.L2 * self.v[a]
def hamiltonian(self, Q):
    self.cost(0)
    self.value(Q)
def print_QUBO(self, Q):
    # Print QUBO matrix (for debugging)
    for i in range(self.N):
        for j in range(self.N):
            print("{:7.1f}".format(Q[(i, j)]), end=" ")
        print()
def sample(self, Q, num_reads=100):
    # Perform sampling
    sampleset = self.sampler.sample_qubo(Q, num_reads=num_reads)
    return sampleset
def evaluate(self, sampleset):
    # 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
    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}")
    # Evaluate each solution
    print("\nEvaluation of solutions:")
    for nth, (solution, freq) in enumerate(sample_frequency.most_common(), 1):
        value = volume = 0.0
        for i, bit in enumerate(solution[:self.N]): # Consider only the first
N bits for w and c
            if bit == 1:
                volume += self.c[i]
```

```
value += self.v[i]
             if volume <= self.C:</pre>
                 energy = next(energy for sample, energy in sample_data if sample ==
      solution)
                 print(f"[{nth:2d}] Frequency={freq}, Energy={energy:+.2f},\n
     Solution={solution}", end="\t")
                 print(f": value={value:4.1f}, cost={volume:4.1f}")
 if __name__ == "__main__":
     model = MODEL1()
     Q = defaultdict(lambda: 0.0)
     model.hamiltonian(Q)
     model.print_QUBO(Q)
     sampleset = model.sample(Q, num_reads=100)
     model.evaluate(sampleset)
 プログラムを実行させた結果
  -62.3
           24.0
                   36.0
                            6.0
                                   30.0
    0.0
          -79.2
                   48.0
                            8.0
                                   40.0
    0.0
            0.0 -107.1
                         12.0
                                   60.0
    0.0
            0.0
                    0.0 -22.9
                                  10.0
    0.0
            0.0
                                  -94.6
                    0.0
                            0.0
Sorted samples by frequency and energy:
Sample: (0, 0, 1, 1, 1), Frequency: 57, Energy: -142.56
Sample: (1, 1, 0, 0, 1), Frequency: 31, Energy: -142.11
Sample: (0, 1, 1, 1, 0), Frequency: 6, Energy: -141.22
Sample: (1, 1, 1, 0, 0), Frequency: 4, Energy: -140.67
Sample: (0, 0, 1, 0, 1), Frequency: 1, Energy: -141.67
Sample: (1, 1, 0, 1, 1), Frequency: 1, Energy: -141.00
Evaluation of solutions:
[ 1] Frequency=57, Energy=-142.56,
 Solution=(0, 0, 1, 1, 1): value=13.0, cost=12.0
[ 2] Frequency=31, Energy=-142.11,
 Solution=(1, 1, 0, 0, 1) : value=17.0, cost=12.0
[ 3] Frequency=6, Energy=-141.22,
 Solution=(0, 1, 1, 1, 0) : value=16.0, cost=11.0
[ 5] Frequency=1, Energy=-141.67,
 Solution=(0, 0, 1, 0, 1) : value=12.0, cost=11.0
```

プロセスは終了コード 0 で終了しました

1.3 定式化 (その2)

しかし今の問題では、総体積は必ずしも C に等しい必要はなく、C より小さい総体積であっても、価値合計が大きいのであれば、そちらの方を最適解だと選ぶ事になる。従ってここでは「コストの合計値が C 以下」になるとする制約条件が必要になる。そこで新たに補助変数(slack 返送鵜と呼ばれる) $s_k \in \{0,1\}, k=1,2,\ldots, C$ を用意して、次の通り定式化する。

$$H_{cost} = \lambda \left[\left(1 - \sum_{k} s_{k} \right)^{2} + \left(\sum_{k} k s_{k} - \sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha} \right)^{2} \right] = \lambda \left(H_{cost}^{(1)} + H_{cost}^{(2)} \right)$$
(1.5)

まずは $H_{cost}^{(1)}$ を展開する.

$$H_{cost}^{(1)} = \left(1 - \sum_{k} s_{k}\right)^{2}$$

$$= 1 - 2\sum_{k} s_{k} + \left(\sum_{k} s_{k}\right)^{2}$$

$$= 1 - 2\sum_{k} s_{k} + \left(\sum_{k} s_{k}^{2} + 2\sum_{k < l} s_{k} s_{l}\right)$$

$$= 1 - \sum_{k} s_{k} + 2\sum_{k < l} s_{k} s_{l}$$

次に、 $H_{cost}^{(2)}$ を展開する.

$$\begin{split} H_{cost}^{(2)} &= \left(\sum_{k} k s_{k} - \sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha}\right)^{2} \\ &= \left(\sum_{k} k s_{k}\right)^{2} + \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha} q_{\alpha}\right)^{2} - 2 \sum_{k} \sum_{\alpha} k c_{\alpha} s_{k} q_{\alpha} \\ &= \left(\sum_{k} k^{2} s_{k} + 2 \sum_{k < l} k l s_{k} s_{l}\right) + \left(\sum_{\alpha} c_{\alpha}^{2} q_{\alpha} + 2 \sum_{\alpha < \beta} c_{\alpha} c_{\beta} q_{\alpha} q_{\beta}\right) - 2 \sum_{k} \sum_{\alpha} k c_{\alpha} s_{k} q_{\alpha} \end{split}$$

こうして、 $H_{cost} = H_{cost}^{(1)} + H_{cost}^{(2)}$ は、次の様になる。

$$\frac{H_{cost}}{\lambda} = 1 + \sum_{k} (k^2 - 1)s_k + 2\sum_{k < l} (kl + 1)s_k s_l + \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 q_{\alpha} + 2\sum_{\alpha < \beta} c_{\alpha} c_{\beta} q_{\alpha} q_{\beta} - 2\sum_{k} \sum_{\alpha} k c_{\alpha} s_k q_{\alpha}$$

ここで, s_k も QUBO 変数の一種と見なす. すなわち,

$$s_k \longrightarrow q_\alpha, \quad \alpha = k + N$$

以上の様にすれば、ハミルトニアンは以下のようになる.

$$\frac{H_{cost}}{\lambda} = 1 + \sum_{k=1}^{C} (k^2 - 1)q_{k+N} + \sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha}^2 q_{\alpha}$$

$$+ 2\sum_{k=1}^{C-1} \sum_{l=k+1}^{C} (kl+1)q_{k+N}q_{l+N} + 2\sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta=\alpha+1}^{N} c_{\alpha}c_{\beta}q_{\alpha}q_{\beta} - 2\sum_{k=1}^{C} \sum_{\alpha=1}^{N} kc_{\alpha}q_{k+N}q_{\alpha}$$

1.3.1 実装

C 個の slack 変数 s_1, \dots, s_{C-1}, s_C を導入して、その中の 1 つだけが 1 になることを許す(複数の 1 は禁止)を課している。

ナップザックの体積(c)	1	2	3	 10	11	12
総体積 (c) になるかどうか (s_n)	0	0	0	 0	0	1
$n \times s_n$	0	0	0	 0	0	12
	1×0	2×0	3×0	 10×0	11×0	12×1

一方、ナップサックの荷物の体積の総和(荷物の総体積)は以下で求められる。

$$c = \sum_{\alpha=1}^{N} c_{\alpha} q_{\alpha} = c_1 q_1 + c_2 q_2 + c_3 q_3 + \dots + c_N q_N$$

 q_n は 0,1 を取る決定変数で、n 番目の荷物をナップサックに詰めるかどうかを決める変数なので、例えば下表のように荷物 C,D,E を選択すれば、荷物の総体積($3\times0+4\times0+6\times1+1\times1+5\times1=12$)を 12 にすることができる.

```
from knapsack import MODEL1
class MODEL2(MODEL1):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.N = 5
        self.C = 12.0
        self.c = [3.0, 4.0, 6.0, 1.0, 5.0]
        self.v = [6.0, 7.0, 8.0, 1.0, 4.0]
        self.L1 = 1.0
        self.L2 = self.L1 / 9.0
        self.Q = defaultdict(lambda: 0.0)
    def slack_unique(self, Q):
        for k in range(self.C):
            Q[(k+self.N, k+self.N)] -= self.L1
        for k in range(self.C - 1):
            for 1 in range(k + 1, self.C):
                Q[(k+self.N, l+self.N)] += 2.0 * self.L1
    def slack_sum(self, Q):
        for k in range(self.C):
            Q[(k+self.N, k+self.N)] += self.L1 * k**2
```

```
for k in range(self.C - 1):
             for l in range(k + 1, self.C):
                 Q[(k+self.N, l+self.N)] += 2.0 * self.L1 * k * 1
         for a in range(self.N):
             Q[(a, a)] += self.L1 * self.c[a] * self.c[a]
         for a in range(self.N - 1):
             for b in range(a + 1, self.N):
                 Q[(a, b)] += 2.0 * self.L1 * self.c[a] * self.c[b]
         for a in range(self.N - 1):
             for b in range(a + 1, self.N):
                 Q[(a, b)] += 2.0 * self.L1 * self.c[a] * self.c[b]
         for k in range(self.C):
             for a in range(self.N):
                 Q[(k+self.N, a)] = 2.0 * self.L1 * k * self.c[a]
     def cost(self, Q):
         self.slack_unique(Q)
         self.slack_sum(Q)
     def hamiltonian(self, Q):
         self.cost(Q)
         self.value(Q)
 if __name__ == "__main__":
     model = MODEL1()
     Q = defaultdict(lambda: 0.0)
     model.hamiltonian(Q)
     model.print_QUBO(Q)
     sampleset = model.sample(Q, num_reads=100)
     model.evaluate(sampleset)
-62.3
         24.0
                 36.0
                          6.0
                                  30.0
  0.0
        -79.2
                 48.0
                          8.0
                                  40.0
  0.0
          0.0 - 107.1
                         12.0
                                  60.0
  0.0
          0.0
                  0.0
                        -22.9
                                 10.0
  0.0
          0.0
                  0.0
                           0.0
                                 -94.6
Sorted samples by frequency and energy:
Sample: (0, 0, 1, 1, 1), Frequency: 66, Energy: -142.56
Sample: (1, 1, 0, 0, 1), Frequency: 25, Energy: -142.11
Sample: (0, 1, 1, 1, 0), Frequency: 6, Energy: -141.22
Sample: (1, 1, 1, 0, 0), Frequency: 3, Energy: -140.67
Evaluation of solutions:
[ 1] Frequency=66, Energy=-142.56,
Solution=(0, 0, 1, 1, 1): value=13.0, cost=12.0
[ 2] Frequency=25, Energy=-142.11,
```

Solution=(1, 1, 0, 0, 1): value=17.0, cost=12.0

[3] Frequency=6, Energy=-141.22,

Solution=(0, 1, 1, 1, 0) : value=16.0, cost=11.0

プロセスは終了コード 0 で終了しました

1.4 定式化 (その3)

slack 変数は、決定変数 q_{α} の後ろに繋げて解く事になるので、不等式の制約条件によっては、slack 変数の数が多くなるという不都合がある。そこで、slack 変数のバイナリエンコーディングを行うことがある。今のナップザックぬ問題の具体例では、ナップザックの最大容量 C が 12 だとしているので、前の例の様な slack 変数の使い方だと、 $s_1, s_2, \cdots, s_{C-1}, s_C$ と、全部で C=12 個の slack 変数を追加していることになる。一方バイナリーエンコーディングでは、例えば 12 なら、次の表の様な 2 進数の 4 桁で表現できるので、4 個の slack 変数を用意すれば良い事になる。

$$12 = (2^{0} \times 0) + (2^{1} \times 0) + (2^{2} \times 1) + (2^{3} \times 1) \to \sum_{n=0}^{3} (2^{n} \times s_{n})$$

s3	s2	s1	s0	値
0	0	0	0	0
0	0	0	1	1
0	0	1	0	2
0	0	1	1	3
0	1	0	0	4
0	1	0	1	5
0	1	1	0	6
0	1	1	1	7
1	0	0	0	8
1	0	0	1	9
1	0	1	0	10
1	0	1	1	11
1	1	0	0	12
1	1	0	1	13
1	1	1	0	14
1	1	1	1	15

※ ただし、この 4 ビットの 2 進符号化は、結局のところ「15 以下」のいずれの場合も許容されるので、「12 以下」の制約にするには更なる工夫が必要になる。ここでは、「15 以下」のやり方を示すにとどめる。

前の例で実施した、バイナリーエンコーディングなしの、通常の slack 変数の場合のハミルトニアンは、

$$H = H_A + H_B = A_1 \left(1 - \sum_{n=1}^{12} s_n \right)^2 + A_2 \left(\sum_{n=1}^{12} n s_n - \sum_{\alpha=1}^{5} c_{\alpha} q_{\alpha} \right)^2 - B \sum_{\alpha=1}^{5} v_{\alpha} q_{\alpha}$$

この様にしていたが、今回はまず A_1 のかかる項はなくなる。(slack 変数の選択は 1 つだけではなくなるから)そして、 A_2 のかかる項では、2 進符号化 $(2^0s_0+2^1s_1+2^2s_2+2^3s_n=\sum_{n=0}^32^ns_n)$ をしなければいけないから、

$$H = H_A + H_B = A_2 \left(\sum_{n=0}^{3} 2^n s_n - \sum_{\alpha=1}^{5} c_{\alpha} q_{\alpha} \right)^2 - B \sum_{\alpha=1}^{5} v_{\alpha} q_{\alpha}$$

4 ビットで 2 進符号化している(0、1、2、3=M)ことから M=3 とし、荷物の数を N=5 として式を変形していく。

$$\begin{split} H &= H_A + H_B \\ &= A_2 \bigg(\sum_{n=0}^3 2^n s_n - \sum_{\alpha=1}^5 c_\alpha q_\alpha \bigg)^2 - B \sum_{\alpha=1}^5 v_\alpha q_\alpha \\ &= A_2 \bigg(\sum_{n=0}^M 2^n s_n - \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha q_\alpha \bigg)^2 - B \sum_{\alpha=1}^5 v_\alpha q_\alpha \\ &= A_2 \bigg(\sum_{n=0}^M 2^n s_n \bigg)^2 + A_2 \bigg(\sum_{\alpha=1}^N c_\alpha q_\alpha \bigg)^2 - 2A_2 \bigg(\sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n s_n c_\alpha q_\alpha \bigg) - B \sum_{\alpha=1}^N v_\alpha q_\alpha \\ &= A_2 \bigg(\sum_{n=0}^M 2^{2n} s_n^2 + 2 \sum_{n_1 < n_2} 2^{n_1} 2^{n_2} s_{n_1} s_{n_2} \bigg) + A_2 \bigg(\sum_{\alpha=1}^N c_\alpha^2 q_\alpha^2 + 2 \sum_{\alpha_1 < \alpha_2} c_{\alpha_1} c_{\alpha_2} q_{\alpha_1} q_{\alpha_2} \bigg) \\ &- 2A_2 \bigg(\sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n s_n c_\alpha q_\alpha \bigg) - B \sum_{\alpha=1}^N v_\alpha q_\alpha \\ &= 2A_2 \bigg(\sum_{n_1 < n_2} 2^{n_1} 2^{n_2} s_{n_1} s_{n_2} + \sum_{\alpha_1 < \alpha_2} c_{\alpha_1} c_{\alpha_2} q_{\alpha_1} q_{\alpha_2} - \sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n s_n c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A_2 \bigg(\sum_{\alpha=1}^N c_\alpha^2 q_\alpha + \sum_{n=0}^M 2^{2n} s_n \bigg) - B \sum_{\alpha=1}^N v_\alpha q_\alpha \\ &= 2A_2 \bigg(\sum_{n_1 = 0} \sum_{n_2 = n_1 + 1}^M 2^{n_1} 2^{n_2} s_{n_1 + N} s_{n_2 + N} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta = \alpha + 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n s_{n + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A_2 \bigg(\sum_{n=0} \sum_{n_2 = n_1 + 1}^M 2^{n_1} 2^{n_2} s_{n_1 + N} q_{n_2 + N} + \sum_{\alpha=1}^{N-1} \sum_{\beta = \alpha + 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n q_{n + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &= 2A \bigg(\sum_{n=1} \sum_{n_2 = n_1 + 1}^M 2^{n_1} 2^{n_2} q_{n_1 + N} q_{n_2 + N} + \sum_{\alpha=1} \sum_{\beta = \alpha + 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n q_{n + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A \bigg(\sum_{n=1} \sum_{n_2 = n_1 + 1}^M 2^{n_1} 2^{n_2} q_{n_1 + N} q_{n_2 + N} + \sum_{\alpha=1} \sum_{\beta = \alpha + 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n=0}^M \sum_{\alpha=1}^N 2^n q_{n + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A \bigg(\sum_{n=1} \sum_{n_2 = n_2 + 1}^M 2^{n_2} q_{n_2 + N} \bigg) - B \sum_{\alpha=1} \sum_{n_2 = n_2 + 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n=0} \sum_{\alpha=1}^M 2^n q_{n_2 + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A \bigg(\sum_{n=1} \sum_{n_2 = n_2 + 1}^M 2^{n_2} q_{n_2 + N} \bigg) - B \sum_{n_2 = 1}^N c_\alpha c_\beta q_\alpha q_\beta - \sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_{n_2 + N} c_\alpha q_\alpha \bigg) \\ &+ A \bigg(\sum_{n_2 = 1} \sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_\alpha + \sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_{n_2 + N} \bigg) - B \sum_{n_2 = 1}^N c_\alpha q_\alpha \bigg(\sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_\alpha + \sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_\alpha \bigg) + \sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_\alpha \bigg(\sum_{n_2 = 1}^M 2^{n_2} q_\alpha \bigg) \bigg)$$

終わりの式の変形では、slack 変数 s_0, s_1, s_2, s_3 のそれぞれが、N 個の決定変数 q の並びの後ろに、 $q_{0+N}, q_{1+N}, q_{2+N}, q_{3+N}$ の 4 個が繋がって来ることを意識して変形させているので要注意!(A_2 は A と

した)

$$s_0 \to s_{0+N} \to q_{0+N},$$

$$s_1 \to s_{1+N} \to q_{1+N},$$

$$s_2 \to s_{2+N} \to q_{2+N},$$

$$s_3 \to s_{3+N} \to q_{3+N}$$

また、この並びによって、LSB の S_0 は左側に、MSB が右に並ぶことも確認しておく必要がある.

1.4.1 実装

```
from knapsack import MODEL1
class MODEL3(MODEL1):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        self.N = 5
        self.C = 12.0
        self.M = 3
        self.c = [3.0, 4.0, 6.0, 1.0, 5.0]
        self.v = [6.0, 7.0, 8.0, 1.0, 4.0]
        self.L1 = 1.0
        self.L2 = self.L1 / 9.0
        self.Q = defaultdict(lambda: 0.0)
    def cost(self, Q):
        for n1 in range(self.M):
            for n2 in range(n1+1, self.M):
                Q[(n1+self.N, n2+self.N)] += 2.0 * self.L1 * 2**n1 * 2**n2
        for a in range(self.N - 1):
            for b in range(a + 1, self.N):
                Q[(a, b)] += 2.0 * self.L1 * self.c[a] * self.c[b]
        for n in range(self.M+1):
            for a in range(self.N):
                Q[(n + self.N, a)] -= 2.0 * self.L1 * 2**n * self.c[a]
        for a in range(self.N):
            Q[(a, a)] += self.L1 * self.c[a] * self.c[a]
        for n in range(self.M + 1):
            Q[(n + self.N, n + self.N)] += self.L1 * 2**(2*n)
    def hamiltonian(self, Q):
        self.cost(Q)
        self.value(Q)
if __name__ == '__main__':
    model = MODEL1()
    Q = defaultdict(lambda: 0.0)
    model.hamiltonian(Q)
    model.print_QUBO(Q)
    sampleset = model.sample(Q, num_reads=100)
    model.evaluate(sampleset)
```

以下の結果の出力では、選ばれた荷物の容積の総和が12を超えるものは表示していない

```
-63.7
         24.0
                 36.0
                           6.0
                                  30.0
        -80.8
                 48.0
                           8.0
  0.0
                                  40.0
  0.0
          0.0 -108.9
                         12.0
                                  60.0
  0.0
          0.0
                  0.0
                        -23.1
                                 10.0
  0.0
          0.0
                  0.0
                           0.0
                                 -95.4
```

Sorted samples by frequency and energy:

Sample: (1, 1, 0, 0, 1), Frequency: 39, Energy: -145.89 Sample: (0, 0, 1, 1, 1), Frequency: 30, Energy: -145.44 Sample: (1, 1, 1, 0, 0), Frequency: 28, Energy: -145.33 Sample: (0, 1, 1, 1, 0), Frequency: 3, Energy: -144.78

Evaluation of solutions:

[1] Frequency=39, Energy=-145.89,
Solution=(1, 1, 0, 0, 1) : value=17.0, cost=12.0

[2] Frequency=30, Energy=-145.44,

Solution=(0, 0, 1, 1, 1): value=13.0, cost=12.0

[4] Frequency=3, Energy=-144.78,

Solution=(0, 1, 1, 1, 0) : value=16.0, cost=11.0

プロセスは終了コード 0 で終了しました