実践的 QUBO

QUBO とは

Quadratic Unconstrained Binary Optimization：2 次形式の制約なし 0-1 変数問題

　量子アニーリングでは制約式を入れることができないので、制約に相当するペナルティ項を評価関数に追加することによって QUBO 形式にする必要がある。

ナップサック問題の QUBO

①よく見かける式

品物数 N，ナップサック許容重量 W

被最適化変数:$x_i \in \{0,1\}$，補助変数:$y_i \in \{0,1\}$，商品の価値 c_i，重さ w_i

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(1 - \sum_{i=0}^{W-1} y_i\right)^2 + A\left(\sum_{i=0}^{N-1} w_i x_i - \sum_{i=0}^{W-1} i y_i\right)^2$$

　右辺第 1 項が選んだ商品の価値の総和、右辺第 2 項がペナルティその 1（ある変数 y_i がただ 1 つだけ 1 になっている）、右辺第 3 項がペナルティその 2(選んだ品物の重さの総和が、ただ 1 つだけ 1 になっている y_i の index である i と等しい）である。

　実際にマシンに投入して計算する場合は x, y などの区別はしないので、1 つにまとめてリナンバーする。つまり、y だったものを新たに x として範囲を 0〜W-1 から N〜N+W-1 へと変更する。見やすくするために$i \geq N$で$w_i = -i + N - 1$とすると、

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(1 - \sum_{i=N}^{N+W-1} x_i\right)^2 + A\left(\sum_{i=0}^{N+W-1} w_i x_i\right)^2$$

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(-\sum_{i=N}^{N+W-1} x_i + 2\sum_{j=i+1}^{N+W-1}\sum_{i=N}^{N+W-1} x_i x_j\right) + A\left(\sum_{i=0}^{N+W-1} w_i^2 x_i + 2\sum_{j=i+1}^{N+W-1}\sum_{i=0}^{N+W-1} w_i w_j x_i x_j\right)$$

　定数項はアニーリングマシンでは考慮できないので省略している。結果確認時に失念しないこと。アニーリングマシンにマッピングする際には、上三角行列形式の場合$(i < j)$は、

$$i < N\text{のとき } Q_{ii} = -Bc_i + Aw_i^2, \qquad Q_{ij} = 2Aw_i w_j$$

$$i \geq N\text{のとき } Q_{ii} = Aw_i^2 - A, \qquad Q_{ij} = 2Aw_i w_j + 2A$$

とすればよい。

②ペナルティ項を簡単にしたもの

わざわざ①のように「ある変数 y_i が 1 つだけ 1 になっていて（右辺第 2 項)、選んだ品物の重さの総和が、y_i の index である i と等しい（右辺第 3 項)」などとせずに、「重さの総和が W 未満の場合に補助変数をそのまま足して補う」ようにすれば良い。

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(\sum_{i=0}^{N-1} w_i x_i + \sum_{i=0}^{W-1} y_i - W\right)^2$$

先ほど同様に変数を x に統一して（$i \geq N$で$w_i = 1$)、

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(\sum_{i=0}^{N+W-1} w_i x_i - W\right)^2$$

展開すると、

$$H = -B\sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i + A\left(\sum_{i=0}^{N+W-1} (w_i^2 - 2Ww_i)x_i + 2\sum_{j=i+1}^{N+W-1}\sum_{i=0}^{N+W-1} w_i w_j x_i x_j\right)$$

$$i < N\text{のとき}\quad Q_{i,i} = -Bc_i + A(w_i^2 - 2Ww_i),\quad Q_{i,j} = 2Aw_i w_j$$

$$i \geq N\text{のとき},\quad Q_{i,i} = A(w_i^2 - 2Ww_i),\quad Q_{i,j} = 2Aw_i w_j$$

まとめ

世に出回っている資料を見てみても、Σ の添え字が無く不明瞭であったり、補助変数を導入しているが実際にはどうしたらいいのかわからなかったりなど、一般人にとっては実践に際してハードルを感じるところであるのでこのメモを作成した。QUBO 行列の(i,i)成分 $Q_{i,i}$ 及び(i,j)成分 $Q_{i,j}$ を for ループで格納していけばよい。体感では①式では右辺第 2 項でペナルティ違反が行われやすく、重量オーバーの解を返すことが大いにあり得るので、右辺第 2 項に独立した係数を追加して調整する必要があるように感じられた。現状では②式の方が①よりも最適解に至りやすいイメージがあるが、問題のサイズや係数によって向き不向きが存在する可能性があることに留意したい。

巡回セールスマン問題の QUBO

都市数 N，被最適化変数:$x_i \in \{0,1\}$，都市 i, j 間の距離 d_{ij},

$$H = \sum_{j=0}^{N-1}\sum_{i=0}^{N-1} d_{i,j} \sum_{t=0}^{N-1} x_{t,i}x_{t+1,j} + A\sum_{i=0}^{N-1}\left(\sum_{t=0}^{N-1} x_{t,i} - 1\right)^2 + A\sum_{t=0}^{N-1}\left(\sum_{i=0}^{N-1} x_{t,i} - 1\right)^2$$

右辺第 1 項が距離の総和（ここではシンプルに記述するため$t+1=N$のとき、$x_{t+1,j} = x_{0,j}$とする）で、右辺第 2 項が「同じ地点には 1 度しか訪問しない」という制約、右辺第 3 項が「同じ時間には 1 つの都市しか訪問しない」という制約である。定式化の詳しい説明は他の資料に譲る。ここでは t 番目に地点 i を訪れているかどうか、t+1 番目に地点 j を訪れているいるかどうか程度に理解すればよい。

計算を行うためには変数を 1 次元的にナンバリングしなければならないので、$x_{t,i} \to x_{Nt+i}$といった風に対応させせる。これにより$x_{0,0}$から$x_{N-1,N-1}$までの N^2 個の変数をx_0からx_{N^2-1}に 1 対 1 対応させせることができた。

さて、面倒だがアニーリングマシンに投入するためには展開しなければならない。ナンバリングしなおした QUBO を下記に示す。

$$H = \sum_{j=0}^{N-1}\sum_{i=0}^{N-1} d_{i,j} \sum_{t=0}^{N-1} x_{Nt+i}x_{N(t+1)+j} + A\sum_{i=0}^{N-1}\left(\sum_{t=0}^{N-1} x_{Nt+i} - 1\right)^2 + A\sum_{t=0}^{N-1}\left(\sum_{i=0}^{N-1} x_{Nt+i} - 1\right)^2$$

ただし$t+1=N$のとき、$x_{N(t+1)+j} = x_j$とする。
展開すると、

$$\begin{aligned} H = &\sum_{j=0}^{N-1}\sum_{i=0}^{N-1} d_{i,j} \sum_{t=0}^{N-1} x_{Nt+i}x_{N(t+1)+j} \\ &+ A\sum_{i=0}^{N-1}\left(-\sum_{t=0}^{N-1} x_{Nt+i} + 2\sum_{t=0}^{N-1}\sum_{k=t+1}^{N-1} x_{Nt+i}x_{Nk+i}\right) \\ &+ A\sum_{t=0}^{N-1}\left(-\sum_{i=0}^{N-1} x_{Nt+i} + 2\sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N-1} x_{Nt+i}x_{Nt+j}\right) \end{aligned}$$

もう少し簡単にできるかもしれないが（主効果項はまとめられるにせよ、行ごとの交互作用項と列ごとの交互作用項をまとめようとするのは無意味であろう）、このまま各項ごとに For 文を用いて QUBO 行列の成分を加算代入演算子+=を使って足し合わせていけば QUBO 行列を作成することができる。

右辺第 1 項から（$t+1=N$のときは$x_{N(t+1)+j}=x_j$となることに注意せよ）、

$$Q_{Nt+i,N(t+1)+j} += d_{i,j}$$

右辺第 2 項から、

$$Q_{Nt+i,Nt+i} += -A, \quad Q_{Nt+i,Nk+i} += 2A$$

右辺第 3 項から、

$$Q_{Nt+i,Nt+i} += -A, \quad Q_{Nt+i,Nt+j} += 2A$$

元の式が仰々しい見た目をしていたのに対して、随分シンプルに表現できた。より面倒そうな問題に対しても、今回同様に評価式とペナルティ項を分けて考え、それぞれ足し合わせていけばよい。

まとめ

巡回セールスマン問題を扱っている記事は多いものの、Σの記載が不明瞭であったりΣを 1 つにまとめたりしていてわかりづらくなっているものがほとんどであるため一般人は頭を抱えてしまう。展開前の QUBO とアニーリングマシンを使った結果のみを記載している記事がとにかく多い。どうやって計算したのだろうか。一部の人たちが参入障壁を上げるために情報を秘匿しているのではないかとつい邪推してしまうが、マイナーな分野や賢い人ばかりが集まっていそうな分野は整備されておらず新参者に不親切であることが世の常である気もする（特にニッチとも言えない大学以降の学問も一般人にとっては不親切に感じるところが多かったため、こんなものなのだろう）。ふと巡回セールスマン問題をアニーリングマシンで解きたいと思い立った人が挫折してしまうことを懸念してこのメモを作成した。