



おわりに

～都市・交通の数理分析の基礎技術（最適化）と研究～

2021/6/18(金)

浦田 淳司



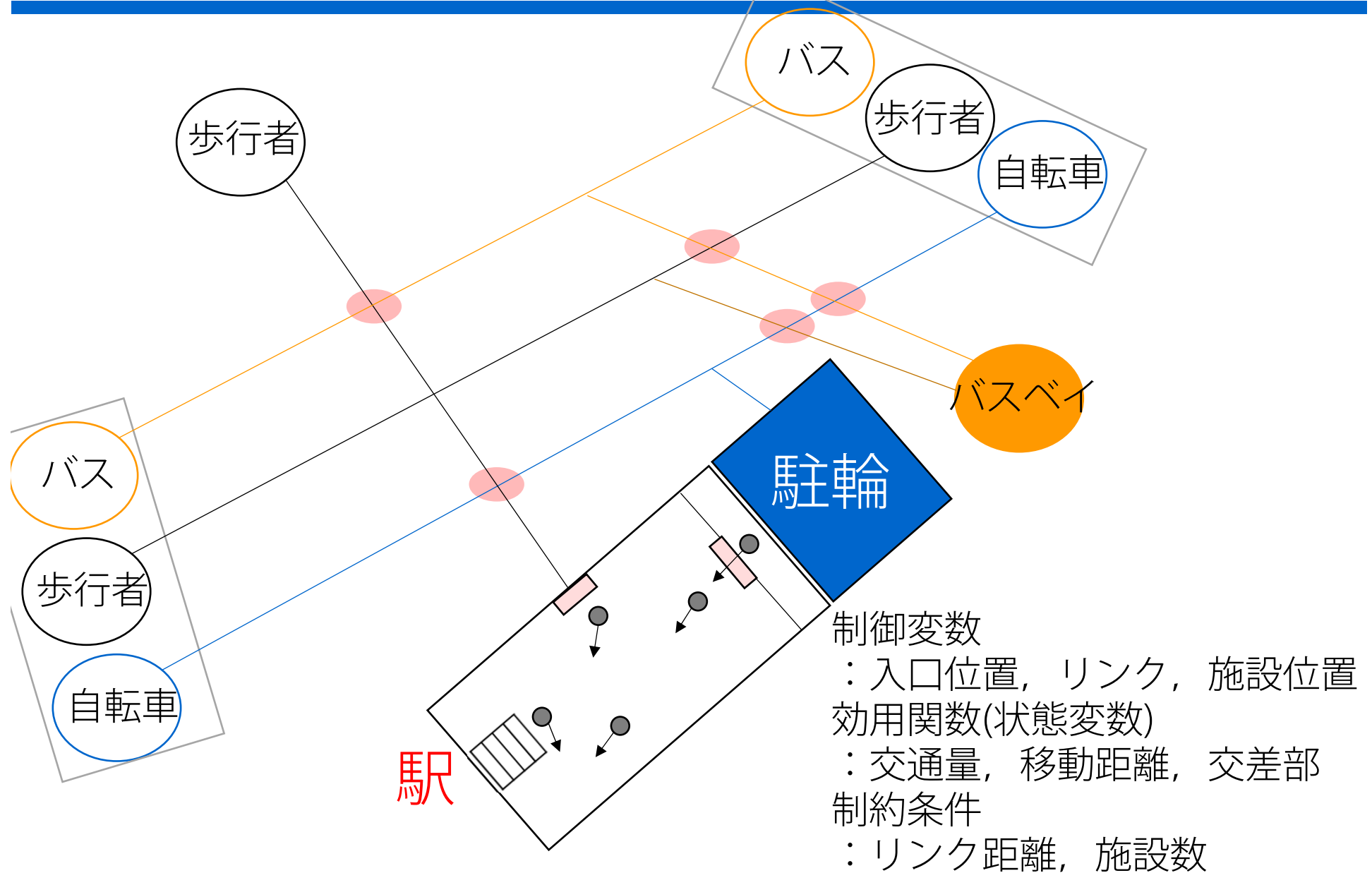
夏学期ゼミ2021

回	日	時間	場所	担当者	タイトル	内容	議事録
#1	4/6(火)	12:30~14:30	セミナーB	羽藤	はじめに		月田
				芝原	プロジェクト紹介：呉市復興計画, 八幡浜市事前復興計画支援から		
				カ村	プロジェクト紹介：道後温泉坂下広場について		
				小林	研究紹介：土地所有形態の選択モデル		
#2	4/9(金)	12:30~14:30	セミナーB	鈴木	プログラミング課題1: 経路探索問題	Dijkstra, A*. ヘルマンフォード法, pythonの基礎	前田
#3	4/13(火)	12:30~14:30	セミナーA	黒	プログラミング課題2: 配分計算	利用者均衡, Dial アルゴリズム	月田
#4	4/16(金)	12:30~14:30	セミナーB	鈴木	RH システム	Xu, Zhengtian, Yafeng Yin, and Jieping Ye. "On I	小島
				増田	ネットワークデザイン	Bell, Michael GH, and Chris Cassir. "Risk-averse	
#5	4/20(火)	10:00~12:00	各自席		豊田中央研究所さんと合同	志賀さま, 日高さま, 大滝さまより話題提供	鈴木
				黒	RH のマッチング問題	Stiglic, Mitja, et al. "The benefits of meeting point	
#6	4/23(金)	12:30~14:30	各自席	2 増橋	交通量配分	佐佐木綱: 吸収マルコフ過程による交通量配分理	近藤
				1 村橋	ヒープ		
#7	4/27(火)	12:30~14:30	各自席	全員	プログラミング課題1, 2発表		次の発表者
				月田	Latexの簡単な説明		
#8	5/7(金)	12:30~14:30	各自席	月田	プログラミング課題3: 行動モデルの推定	MNL, NLモデルの推定: McFadden, Daniel. "Mod RL モデルの推定: Fosgerau, Mogens, Emma Fre	前田
#9	5/11(火)	12:30~14:30	各自席	前田	プログラミング課題4: EMアルゴリズム, 多段階最適化	EMアルゴリズム: Train, Discrete Choice Method NPL: Aguirregabiria, Victor, and Pedro Mira. "Dyr (Advance) MPEC: Su, Che-Lin, and Kenneth L. Ju	鈴木
#10	5/18(火)	12:30~14:30	各自席	北原	調査手法の紹介:		望月
				児玉	調査手法の紹介:		
				萩原	調査手法の紹介:		
#11	5/21(金)	12:30~14:30	各自席	近藤	RLモデル	Västberg, Oskar Blom, et al. "A dynamic discrete e (参考): Fosgerau, Mogens, Emma Frejinger, and A (参考): Zimmermann, Maëlle, and Emma Frejinge	増橋
				村橋	経路選択におけるサンプリング	Lai, Xinjun, and Michel Bierlaire. "Specification of (参考): Flötteröd, Gunnar, and Michel Bierlaire. "M	
#12	5/25(火)	12:30~14:30	各自席	月田	サーチ理論	Mortensen, Dale T. "The matching process as a r (参考): Mortensen, Dale T. "Property rights and e	小島
				前田	Social Network	Helsley, Robert W., and Yves Zenou. "Social netw	
#13	5/28(金)	12:30~14:30	各自席	全員	プログラミング課題3, 4発表		次の発表者
#14	6/1(火)	12:30~14:30	各自席	小林	プログラミング課題5: CNNによるOCR		月田
#15	6/8(火)	12:30~14:30	各自席	望月	深層学習の礎(微分可能プログラミングについて)	Eriksson, Jerry, et al. "Regularization tools for tr Baydin, Atılım Gunes, et al. "Automatic differenti	鈴木
				小川	バンドレット問題とZDD	Sakaue, Shinsaku, Masakazu Ishihata, and Shin-ic (参考): 本多淳也, & 中村麗祥. (2016) 『バンドレ	
#16	6/11(金)	12:30~14:30	各自席	小島	空間経済モデル	Fujita, Masahisa, and Paul Krugman. "When is th (参考): Fujita-Krugman-Venables (2000) 『空間経	増田
				小林	土地利用-交通モデル	"A random bidding and supply land use equilibri	
#17	6/15(火)	12:30~14:30	各自席	仲野	研究紹介:		村橋
				三谷	研究紹介:		
#18	6/18(金)	12:30~14:30	各自席	全員	プログラミング課題5 発表		前田
				浦田	おわりに		
#19	6/29(火)	12:30~14:30	セミナーA	全員	夏研究最終発表@本郷		次の発表者

動学問題と最適化



イメージ：最適施設計画



最適化問題といえば：線形計画問題

線形計画問題の等式標準形

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (\text{線形の目的関数})$$

subject to

$$a_i^T \mathbf{x} = b_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{線形の等式制約})$$

$$x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{非負制約})$$

最適化の変数 $x_j \in R$
定ベクトル $a_i \in R^n$
定数 $b_i, c_j \in R$

線形の不等式制約は、非負のスラック変数の導入により、等式標準形に変換可能

$$a_i^T \mathbf{x} \leq b_i \Leftrightarrow a_i^T \mathbf{x} + s_i = b_i, s_i \geq 0$$



双対問題

主問題 (P)

線形計画問題の等式標準形
(ベクトル表記)

$$\min_x \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

subject to

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} \geq 0$$

↕
等価な変換

双対問題 (D)

線形計画問題の等式標準形
(ベクトル表記)

$$\max_y \mathbf{b}^T \mathbf{y}$$

subject to

$$\mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{c}$$

主問題・双対問題の変形

スラック変数を導入

$$\max_y b^T y \text{ subject to } A^T y + s = c, s \geq 0$$

$y = y^+ - y^-$ と分解. 双対問題は次の等式標準形で表せる.

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & \begin{bmatrix} -b \\ b \\ 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} y^+ \\ y^- \\ s \end{bmatrix} \\ \text{subject to} \quad & \begin{bmatrix} -A^T & A^T & -I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y^+ \\ y^- \\ s \end{bmatrix} = -c \\ & y^+, y^-, s \geq 0 \end{aligned}$$

主問題から双対問題へ \rightarrow 、左辺の操作を行う.

$$\begin{aligned} \text{Max} \quad & -c^T x \\ \text{subject to} \quad & \begin{bmatrix} -A \\ A \\ -I \end{bmatrix} x \leq \begin{bmatrix} -b \\ b \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad \begin{aligned} & \text{-----} \rightarrow \begin{aligned} -Ax &\leq -b \\ Ax &\leq b \\ -Ix &\leq 0 \end{aligned} \rightarrow \begin{aligned} Ax &= b \\ x &\geq 0 \end{aligned} \end{aligned}$$

双対定理

主問題 (P) , 双対問題 (D) の実行可能領域を次とおく

$$F_P = \{x \in R^n \mid Ax = b, x \geq 0\}$$

$$F_D = \{y \in R^m \mid A^T y \leq c\}$$

弱双対定理:

(P)の任意の実行可能解 x と (D)の任意の実行可能解 y に対して,

$$c^T x \geq b^T y$$

が成り立つ.

(証明)

$x \in F_P, y \in F_D$ ならば

(D)の目的関数

\leq (P)の目的関数

$$y^T b = y^T Ax \leq c^T x$$

(P)の制約条件

(D)の制約条件

相補性定理

強双対定理:

主問題と双対問題がともに実行可能解をもつことと、両者に最適解が存在して最適値が一致することとは、同値である

相補性定理:

主問題の実行可能解 x と双対問題の実行可能解 y がそれぞれの問題の最適解であるための必要十分条件は、次が成立することである.

$$x_j(c - A^T y)_j = 0, \quad j = 1, \dots, n$$

(証明)

(P)と(D)の目的関数の差は,

$$c^T x - b^T y = c^T x - (Ax)^T y = x^T (c - A^T y)$$

と書ける. $x \geq 0$ および $c - A^T y \geq 0$ より, 目的関数の差が0となるためには, 全ての要素について, 0となることが必要である.

最適性条件

主問題 (P) $\min_x c^T x$
subject to $Ax = b, x \geq 0$

双対問題 (D) $\max_y b^T y$
※スラック変数を導入
subject to $A^T y + s = c, s \geq 0$

と相補性条件より,
 x と y が主問題と双対問題の最適解であるための必要十分条件は、次となる.

$$Ax = b,$$

$$A^T y + s = c,$$

$$x_j s_j = 0, j = 1, \dots, n, \quad (\Leftrightarrow x^T s = 0)$$

$$x \geq 0, s \geq 0$$

これを最適性条件と呼ぶ.

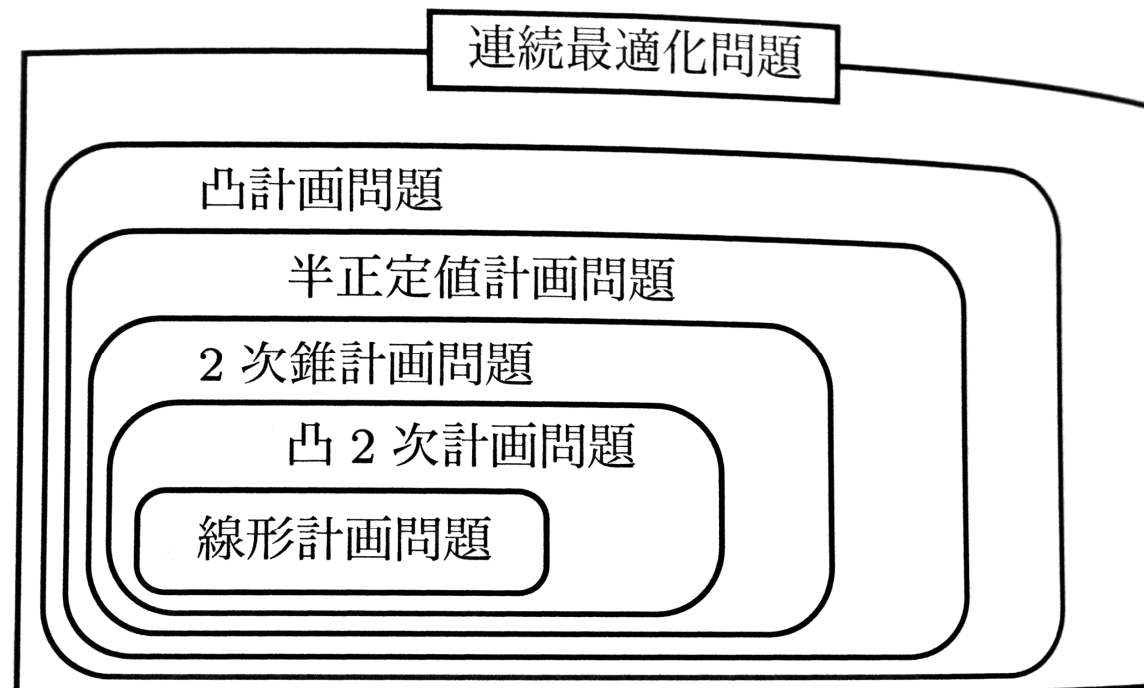
解ける問題にする：半正定値計画問題

線形計画問題：目的関数・制約ともに1次関数である最適化問題

半正定値計画問題：目的関数・制約がとも凸である最適化問題(の代表格)

線形計画と類似の双対性をもち，主双対内点法が適用可能

⇒複雑で非線形の制約を表現でき，求解可能であるため，
応用範囲が広い



半正定値計画問題

半正定値計画問題とは、
対象行列 S^n を変数として、その行列の半正定値性の制約と線形の等式制約の下で線形の目的関数を最小化するような最適化問題

(半正定値計画問題の等式標準形)

$$\min_{X \in S^n} C \cdot X$$

$$\text{subject to } A_i \cdot X = b_i \quad (i = 1, \dots, m),$$

$$X \succcurlyeq 0.$$

(定行列 $A_i, C \in S^n$, 定数 b_i)

線形

線形

半正定値制約(非線形)

なお、 n 次の対称行列 $U, V \in S^n$ の内積を次で定義する.

$$U \cdot V = \text{tr}(U^T V) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n U_{ij} V_{ij}$$

半正定値対称行列 S_+^n と定義する. また、この集合は凸集合である.

$$S_+^n = \{X \in S^n \mid X \succcurlyeq 0\}$$

(参考) 半正定値対称行列の性質

半正定値対称行列 U は、次の4つの条件(互いに等価)を満たす

1. $U \succeq 0$
2. U の全ての固有値が非負である
3. U の任意の主小行列式が非負である
4. $U = VV^T$ かつ $\text{rank } U = \text{rank } V$ を満たす行列 V が存在する

固有値 λ : $\det(A - \lambda E) = 0$ の方程式の解

主小行列: n 次正方行列から同じ番号の行と列を取り出し,
その交差する成分を並べた正方行列のこと

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \Rightarrow \text{主小行列} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{bmatrix}$$

(参考) 半正定値計画問題の双対問題

(双対問題)

$$\max_{y \in \mathbb{R}^m} \sum_{i=1}^m b_i y_i$$

線形

$$\text{subject to } \sum_{i=1}^m y_i A_i + S = C,$$
$$S \succeq 0.$$

線形

半正定値制約(非線形)

最適化の変数 $y \in \mathbb{R}^m, S \in S^m$

また、双対問題の制約は実質的には次で表せる。

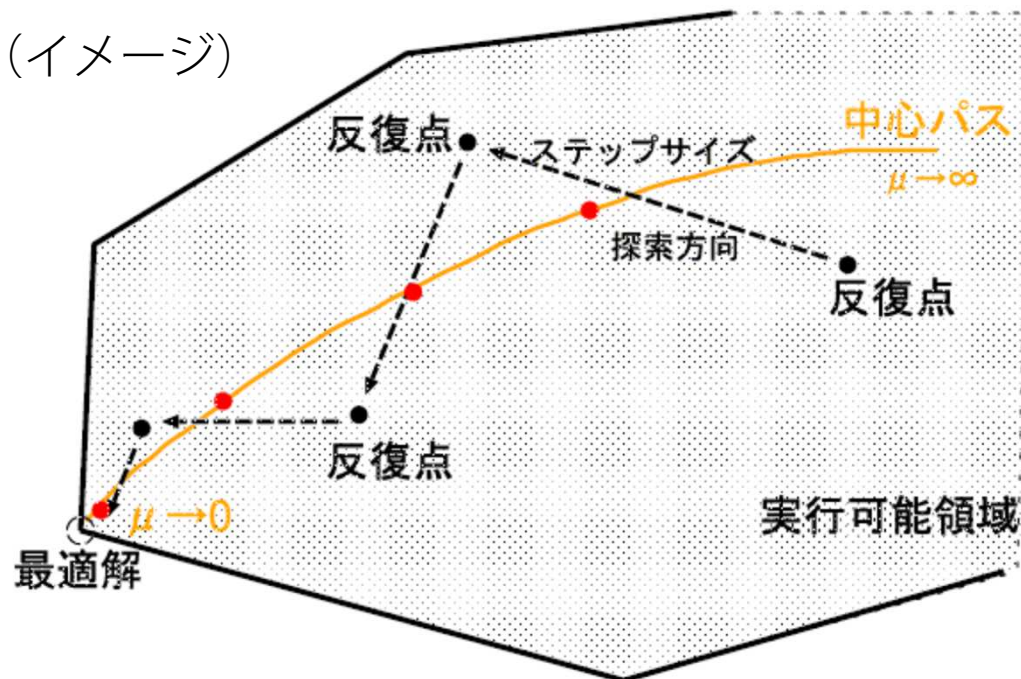
線形行列不等式: $C - \sum_{i=1}^m y_i A_i \succeq 0$ (所謂, スラック変数なしの場合)

- 主問題と双対問題の形式が一致するという性質をもつ
- 比較的緩い仮定の下で、主問題と双対問題の最適値が一致するという性質を持つ
(線形計画, 半正定値計画, 2次錐計画に共通)
- 内点法という多項式時間で大域的最適解を求める解法の裏付け
- 「解きたい最適化問題が与えられたときに、これらの解きやすい形に変形することを試みることは、とても大事なことである」

解くための工夫：アルゴリズム(内点法)

- 最適化問題において、制約条件に含まれる全ての不等式を等号ではなく厳密に不等号で満たす点を(解析的な)内点と呼ぶ
 - 一つの内点の近傍で、不等式制約を考慮せず、等式制約条件のみの中で目的関数を減少させる方向を求め、あるステップサイズだけ進み、内点を更新する
 - 内点法は、初期内点から更新を繰り返すことにより、内点列を生成
- ※線形計画問題では、最適解は、内点ではなく、いくつかの不等式を等号でみたす境界点である。そこで、内点法は最適解以外の境界に近づかないようにしながら、最適解に近づく点列を生成する

(イメージ)



(利点)

- 様々な最適化問題に適用可能
- 計算量が前もって評価可能
- 大規模な問題を高速に求解できる

主内点法（線形計画への適用）

主問題に対して、対数障壁関数を用いて、目的関数を定義

$$\min_x \mathbf{c}^T \mathbf{x} - \nu \sum_{j=1}^n \log x_j$$

subject to

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

$$\mathbf{x} > 0$$

$\nu (> 0)$ に対して、一意に存在する最適解を $x(\nu)$ とおき、
 ν を動かしたときの $x(\nu)$ の軌跡を中心曲線という。

中心曲線は、実行可能領域内に滑らかに枝分かれなく存在し、
 $\nu \rightarrow 0$ で最適解に到達する。

$x \geq 0$ を陽に考慮せずに、内点実行可能解を初期解とし、等式制約付き最適化問題の ν を徐々に小さくしながら、中心曲線を辿り、最適解を得る

主内点法のイメージ

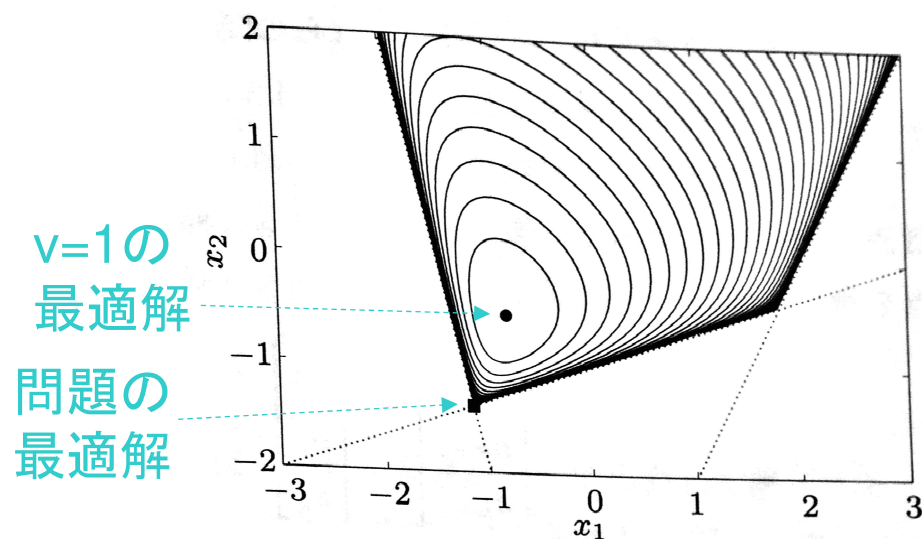
2変数の線形計画問題

$$\left. \begin{array}{l} \text{Minimize } x_1 + 2x_2 \\ \text{subject to } -4x_1 - x_2 \leq 6, \\ \phantom{\text{subject to }} x_1 - 3x_2 \leq 3, \\ \phantom{\text{subject to }} 2x_1 - x_2 \leq 4 \end{array} \right\}$$

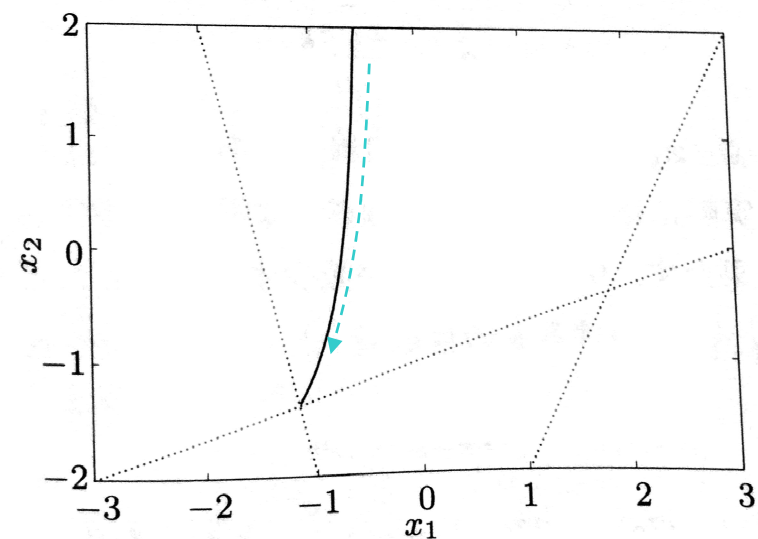
不等式制約を対数障壁関数として加えた目的関数

$$\begin{aligned} \phi_\nu(x) = & (x_1 + 2x_2) - \nu \log(4x_1 + x_2 + 6) \\ & - \nu \log(-x_1 + 3x_2 + 3) - \nu \log(-2x_1 + x_2 + 4) \end{aligned}$$

$\phi_{\nu=1}(x)$ の等高線



中心曲線



解くための工夫 2 :

(博論 3章)

完全合理性を緩和した動的避難開始選択



災害時不確実下の避難開始選択

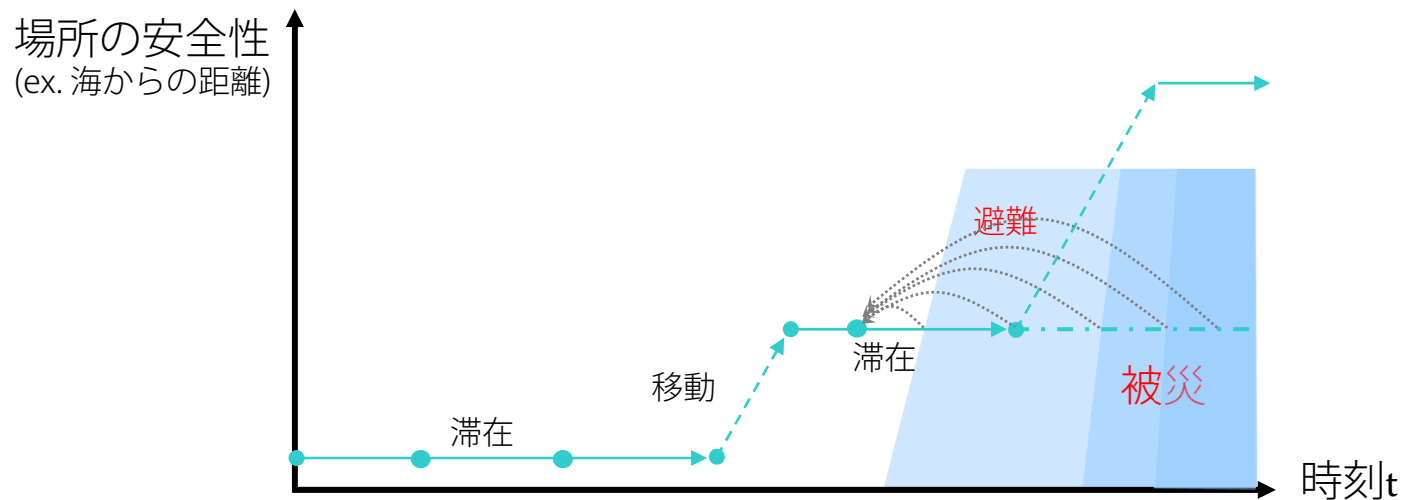
■ 災害時行動の前提



経験と情報の不足のため、将来状態がわからない

■ 避難＝将来リスクの回避

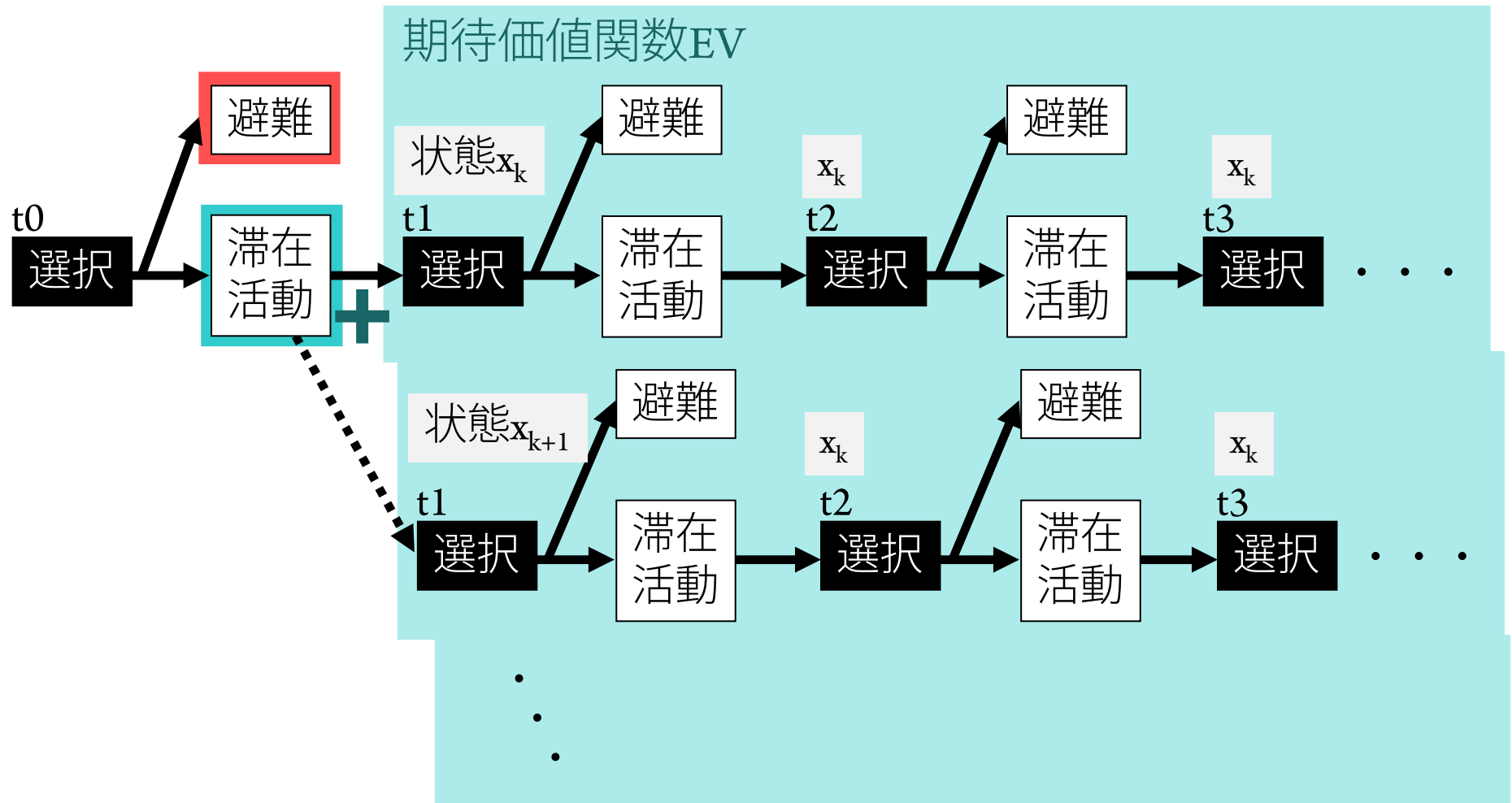
将来状況を想定した避難開始の選択



目的：不確実な将来状況を考慮した行動選択の記述

アプローチ：動的離散選択の導入

動的離散選択モデル： Bellman(1957)
将来の選択から得られる効用を想定

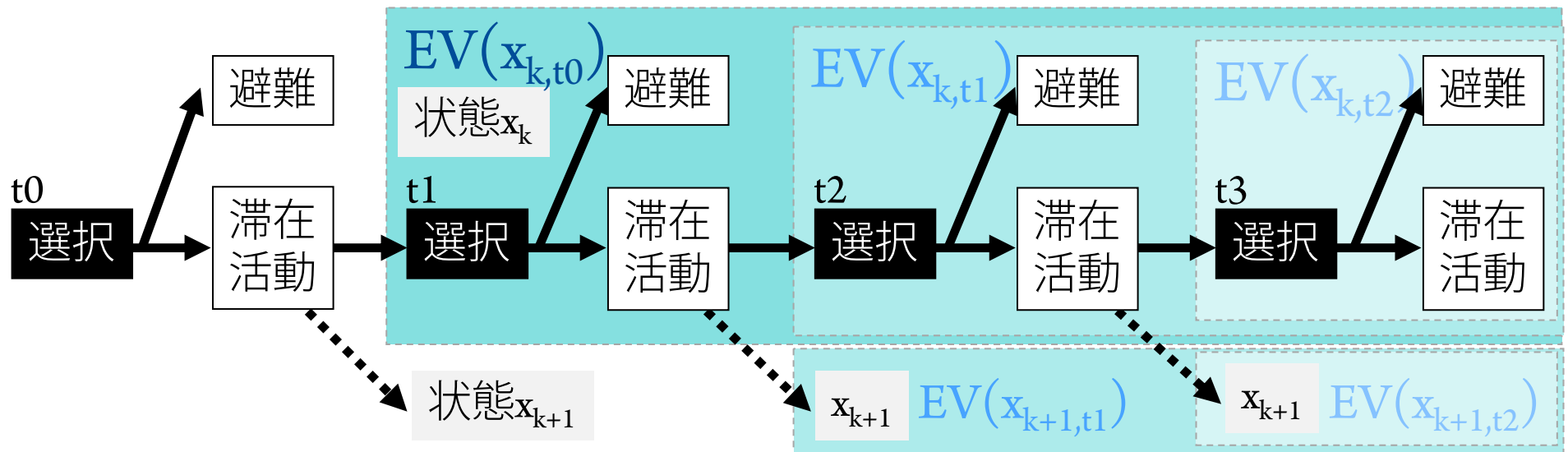


従来の動的離散選択モデル

期待価値関数EVの計算コストは非常に大きい

—Nested Fixed Point algorithm(Rust(1987))では, 非線形のJ次の連立方程式を求解

期待価値関数EVは真値を用いる



制約条件

期待価値
関数EV

$$EV(x_t, d_t) = \sum_{j=0}^J \left\{ \left(\log \left(\sum_{\forall d'} \exp(v(x'_j, d') + \beta EV(x'_j, d')) \right) \right) \times p_3(x'_j | x_t, d_t) \right\}$$

今期の期待価値関数

次期以降の推移より算出した今期の期待価値関数

将来効用に異質性を導入

異質性を導入した定式化

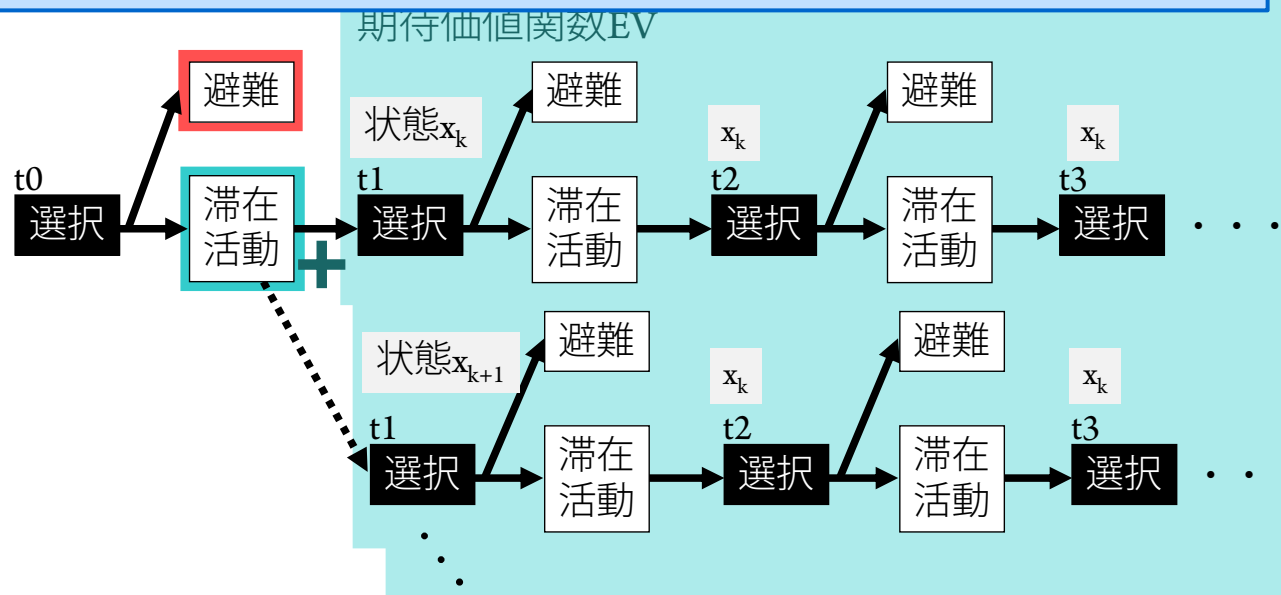
$$\min_{\theta} -L(\theta) \quad \text{subject to } c(\theta, EV') \in \Omega$$

$$c(EV, \theta, x_t, d_t) = \underbrace{EV(x_t, d_t)}_{\text{今期の期待価値関数}} - \sum_{j=0}^J \left\{ \underbrace{\left(\log \left(\sum_{v,d'} \exp(v(x'_j, d') + \beta EV(x'_j, d')) \right) \right)}_{\text{次期以降の推移より算出した今期の期待価値関数}} \times p_3(x'_j | x_t, d_t) \right\} \quad (3)'$$

今期の期待価値関数

次期以降の推移より算出した今期の期待価値関数

災害時に真の期待価値関数EVを持つことは困難



MPEC型の解法の適用

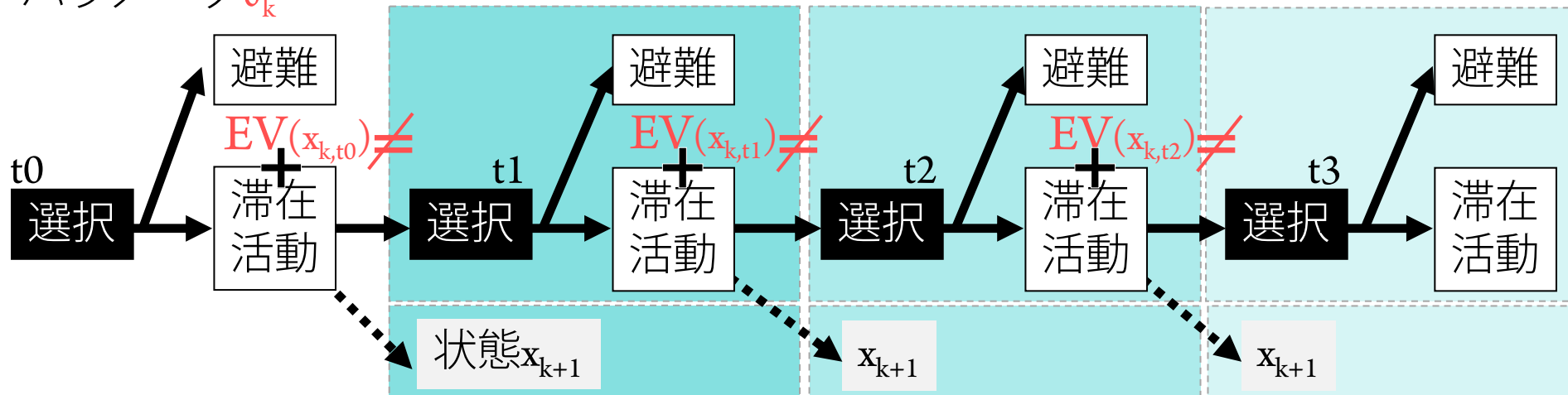
非線形等式制約付き最適化問題

$$\min_{\theta, EV} -L(\theta, EV)$$

$$\text{subject to } c(\theta, EV) = 0$$

Su & Judd(2012)

パラメータ θ_k



パラメータEVを等式制約で評価 (連立方程式を解かない)

異質性評価が可能となる解法&計算性の問題も改善

求解アルゴリズム

非線形制約付き最適化問題：非線形制約数が離散状態 (x_j, d_j) の数
^
パラメータは離散状態数 + 効用関数 θ

Ω の設定 $\frac{\sum_{\forall i} |c_i(\theta, EV')|}{N_c} \leq \tilde{\phi}$
 $\Leftrightarrow \sum_{\forall i} |c_i(\theta, EV')| \leq N_c \tilde{\phi} = \Phi$



逐次二次計画法(SQP)により求解する

主問題：正確なペナルティ関数

k: 解の更新回数 r: ペナルティパラメータ

$$\gamma = (\theta, EV), A = -L$$

$$\min_{\gamma^k} \left(A(\gamma^k) + r^k \max \left(\sum_i |c_i| - \Phi, 0 \right) \right)$$

更新: $\gamma_{k+1} = \gamma_k + \alpha_k S_k$



SQPによる求解

主問題：正確なペナルティ関数による解の更新

$$\min_{\gamma^k} \left(A(\gamma^k) + r^k \max\left(\sum_i |c_i| - \Phi, 0\right) \right)$$

k: 解の更新回数 r: ペナルティパラメータ

更新: $\gamma_{k+1} = \gamma_k + \alpha_k s_k$

$$\gamma = (\theta, EV), A = -L$$

s_k

γ_k

部分問題：最急降下方向の決定

$B^k(\gamma^k)$ 元の問題のラグランジュ関数のヘッセ行列.

$$\min_{s_k} \nabla A(\gamma^k)^T s_k + \frac{1}{2} s_k^T B^k(\gamma^k) s_k$$

subject to $g(\gamma^k) + \nabla g(\gamma^k) s_k \leq 0$

$$(g(\gamma^k) = \sum |c_i(\gamma^k)| - \Phi)$$

2乗のメリット関数を用いて最急降下法により求解

$$Q_b(s_k) = (\nabla A(\gamma^k)^T s_k + \frac{1}{2} s_k^T B^k(\gamma^k) s_k) + \frac{b_1}{2} (\max(g(\gamma^k) + \nabla g(\gamma^k) s_k, 0))^2$$

解の更新

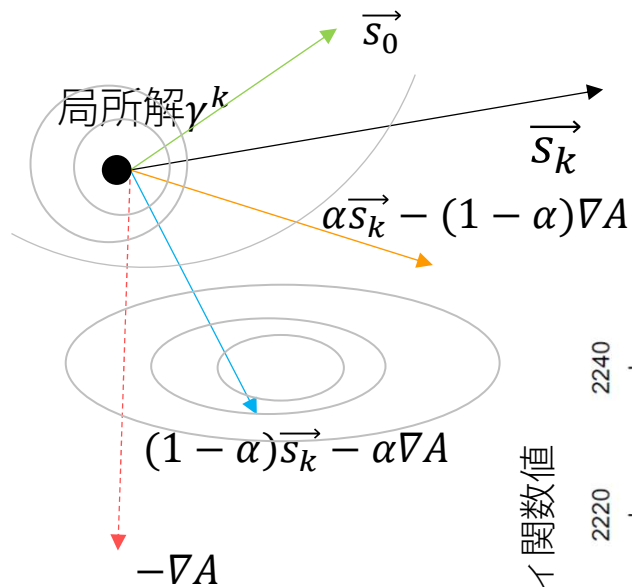
$$d_k = -\nabla Q_b(s_k)$$

$$s_{k+1} = s_k + a_k d_k$$

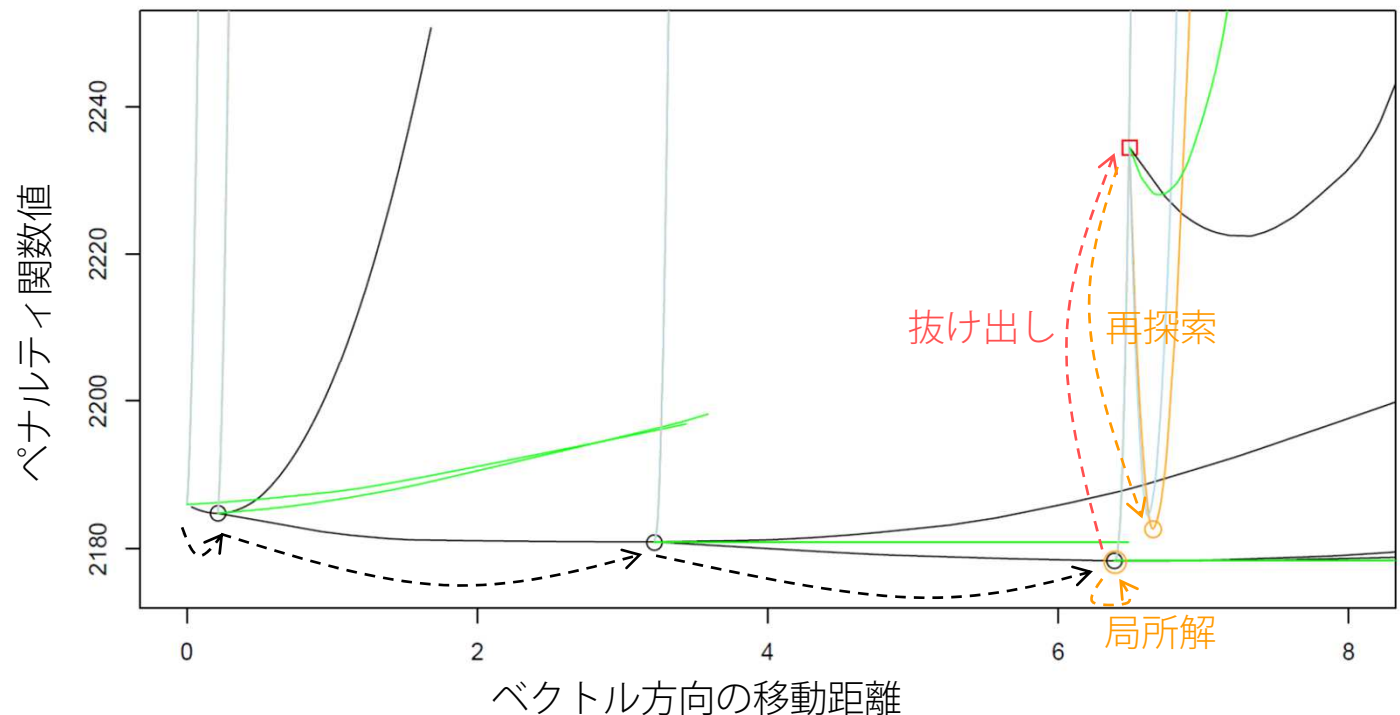
局所収束回避の工夫

パラメータ数が多く，非線形制約を持つため，局所解が多い

降下方向ベクトル s_k を工夫 \Rightarrow 複数のベクトルによる局所解からの離脱



- ヒューリスティックな探索アルゴリズム
- 探索ベクトル方向の設定に正答はない
- 線形探索の計算コストは小さいので，線形探索を増やしたほうが，よい





**解くための工夫3：
量子計算による離散最適化の試み**

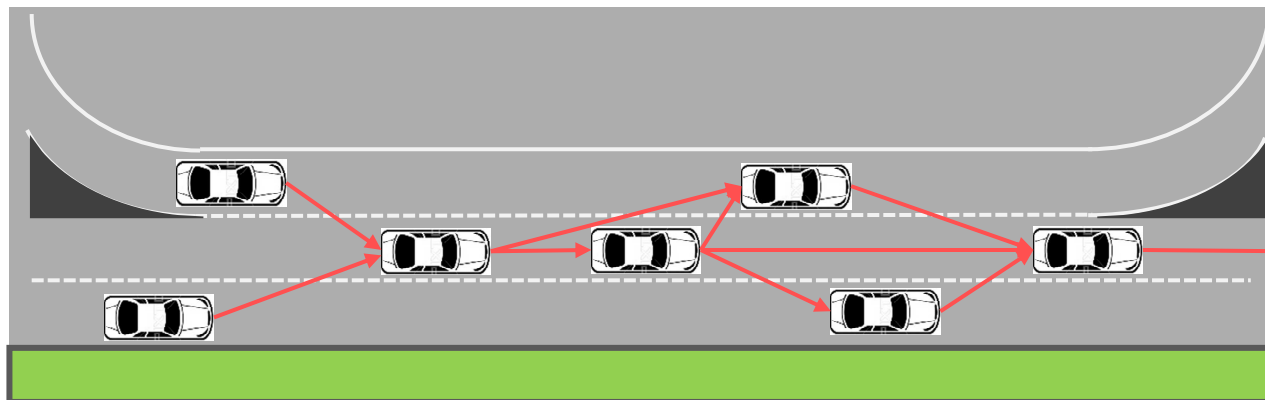
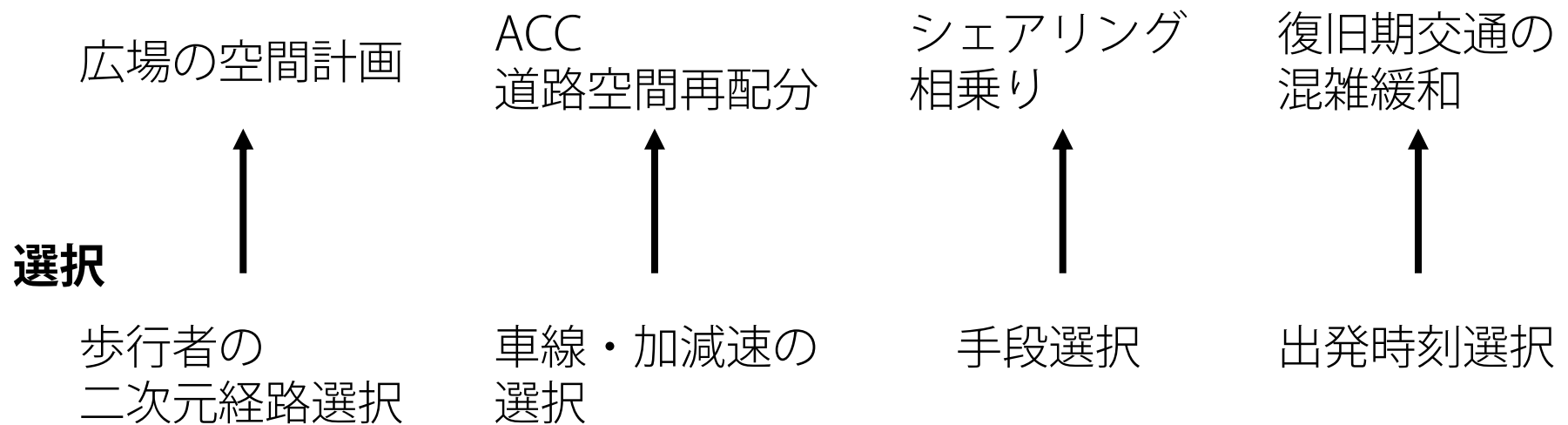


背景：他者の影響をうける交通行動選択

非定常下／ミクロの行動選択は

時々刻々の意思決定モデル + 他者の影響での再現

交通計画・政策・制御

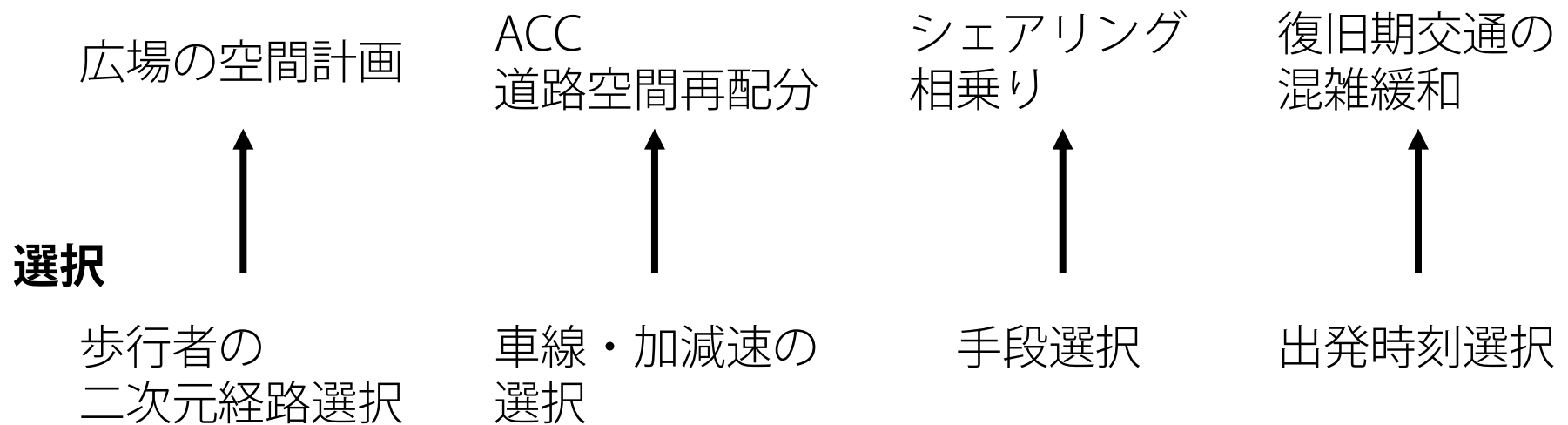


背景：他者の影響をうける交通行動選択

非定常下／ミクロの行動選択は

時々刻々の意思決定モデル + 他者の影響での再現

交通計画・政策・制御



他者影響の評価・分析は、既往研究あり

(Fukuda & Morichi(2007), 伊藤ら(2014), 力石ら(2016), Urata & Hato(2021)など)

計画評価には、他者影響を取り込んだ

アクティビティシミュレーションが必要

他者相互作用を踏まえた選択モデル

Local Interaction Model (Brock and Durlauf (2001))

個人 i , 選択肢 a の効用 V

$$V(a_i, \mu_i(a_{-i}), \varepsilon_i(a_i)) \\ = u(a_i) + S(a_i, \mu_i(a_{-i})) + \varepsilon_i(a_i) \quad (1)$$

S : 社会的効用, $\mu_{it}(a_{-it})$: i 以外の他者の選択, ε : 誤差項

社会的効用 S

$$S(a_i, \mu_i(a_{-i})) = -E \left(\sum_{j \in c_{ij}} J_{ij} h(a_i, a_j) \right)$$

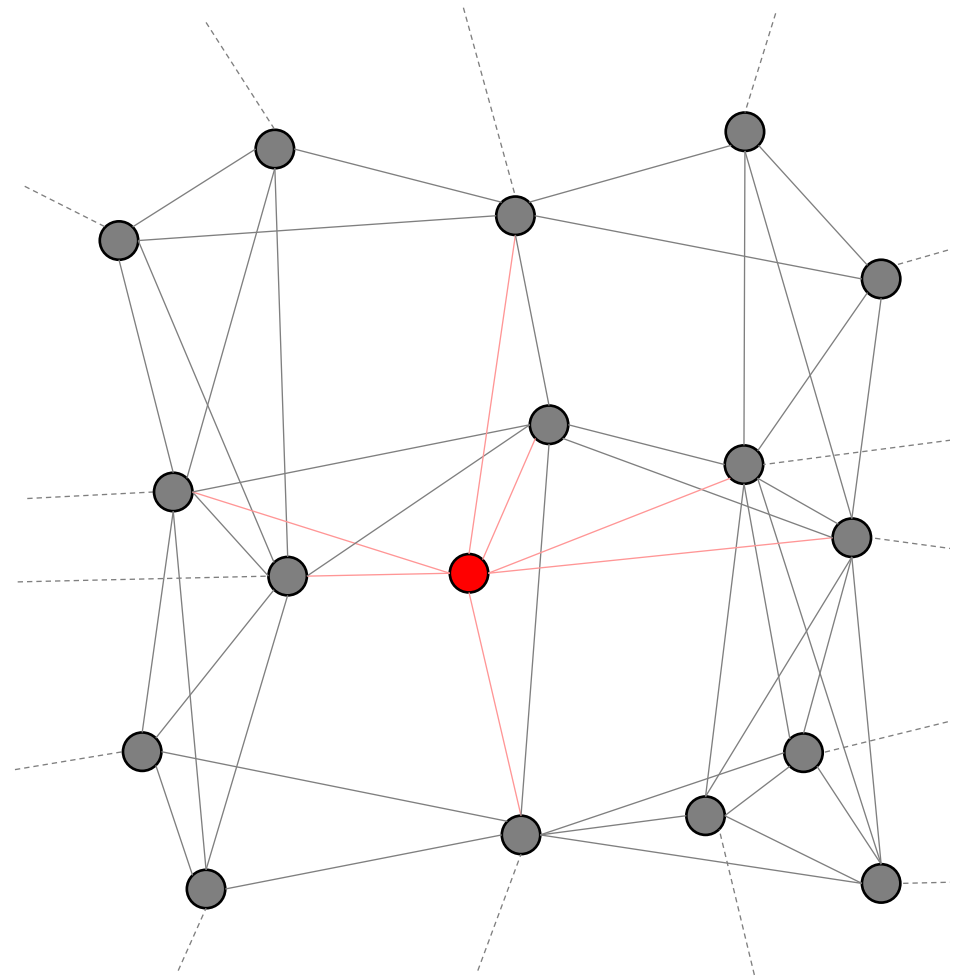
$$h(a_i, a_j) = 1 \text{ when } a_i \neq a_j \\ = 0 \text{ when } a_i = a_j,$$

J_{ij} : 個人 ij 間の影響の重み, c_{ij} : 影響を受ける周辺他者の集合

個人の選択確率 P

$$P(a_i = 1) = \frac{\exp(u(a_i=1) + S(a_i, \mu_i(a_{-i}=-1)))}{\sum_{a_i=1,-1} \exp(u(a_i) + S(a_i, \mu_i(a_{-i})))}$$

(二枝選択, ε : i.i.d ガンベル)



⇒ 尤度最大化によるパラメータ推定・行動分析は可能

シミュレーション計算＝同時生起確率

課題：他者との相関は連鎖する

シミュレーション予測のためには、
全員の行動選択の同時決定が必要

全員の行動選択 $\mathbf{a} (= \{a_i\})$ の同時確率

$$P(\mathbf{a}) = \frac{\exp \omega(\mathbf{a})}{\sum_{\forall \mathbf{z}} \exp \omega(\mathbf{z})}$$

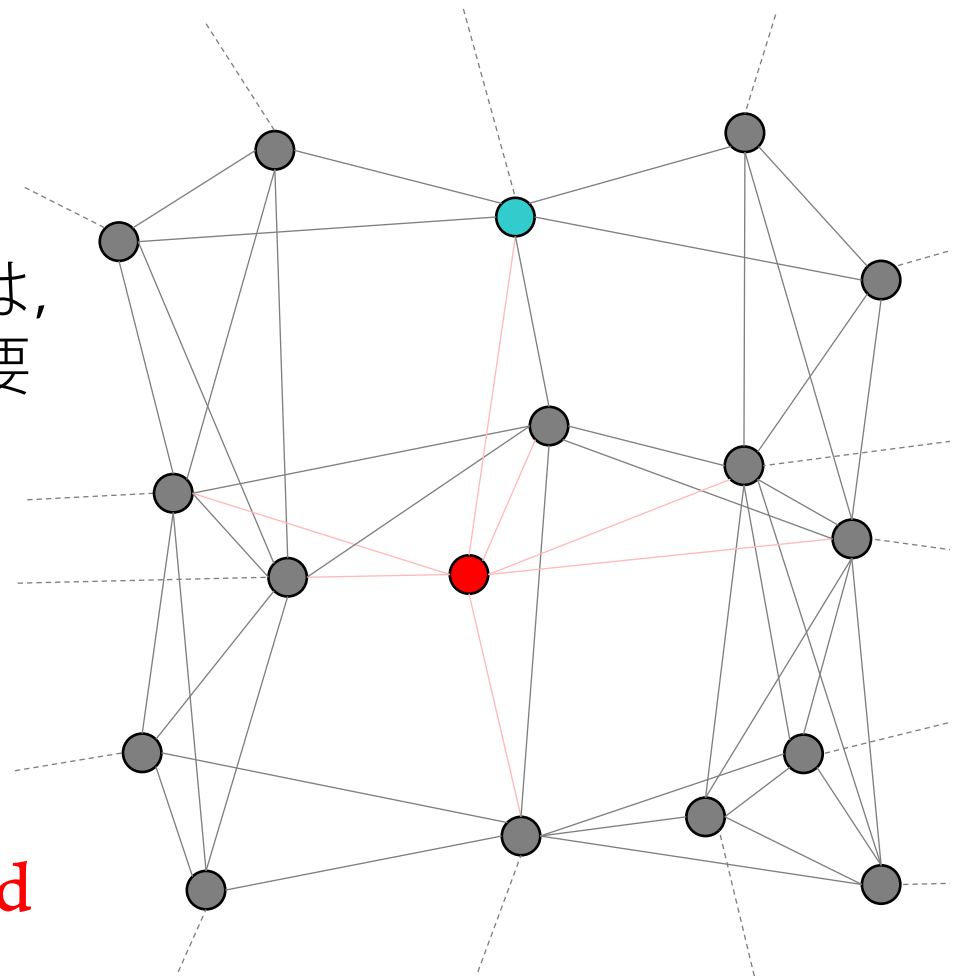
$$\mathbf{a} = \{\operatorname{argmax}_{\forall \mathbf{z}} P(\mathbf{z})\}$$

全列挙の計算量

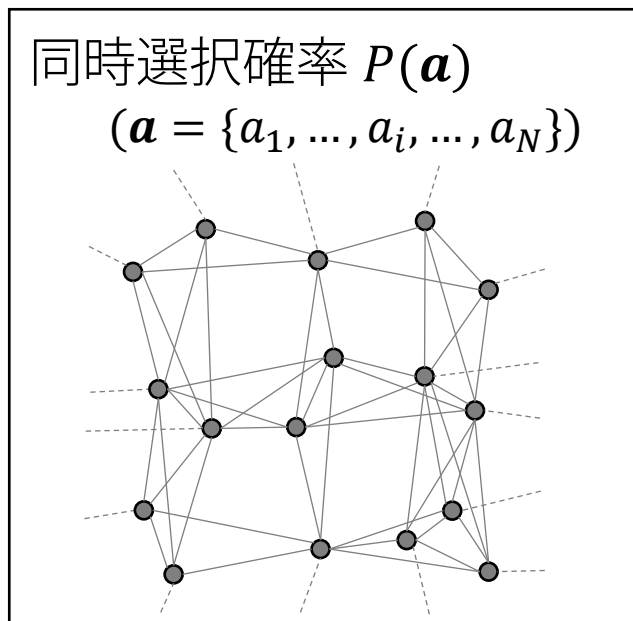
$O(\text{選択肢数}^{\text{人数}})$ **NP-hard**



多項式時間の計算量としたい



相関を考慮した同時行動選択の計算方法



① 近似モデル

個別選択確率の近似解

$$P_i(a_i) \approx Q_i(a_i)$$

他者選択から独立した確率

② 最適ベクトル

同時選択確率の最尤解

$$\hat{\mathbf{a}} = \arg \max P(\mathbf{a})$$

最適解だけを得る

② 同時生起確率の最適化問題

アルゴリズムのアイデア

(a_i, a_j) の相互作用のために、確率計算が煩雑化

⇔ (a_i, a_j) の一次の相互作用のみが存在

⇒ 量子アニーリングによる最適化計算が可能

QUBO : Quadratic Unconstrained Binary Optimization
(制約なし 2 値変数 2 次形式最適化)

$$E_{QUBO}(\{a_i\}) = - \sum_{i \in V} l_i a_i - \sum_{ij \in E} m_{ij} a_i a_j \quad (2)$$

V : ノード, E : 相互作用リンク, m_{ij}, l_i : パラメータ, $a_i \in \{0,1\}$

$$\min_a E = \mathbf{a}^t \mathbf{Q} \mathbf{a} \quad (3)$$

同時選択確率の定式化

投稿原稿



同時確率
の仮定

$$P(\mathbf{a}) = \frac{\prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)}{\sum_{\mathbf{a} \in A} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)} \quad (4)$$

効用関数

$$V(a_{it}, \mu_{it}(a_{-it}), \epsilon_{it}(a_{it})) = \overset{\text{個人効用}}{u(a_{it})} + \overset{\text{相互作用効用}}{S(a_{it}, \mathbf{a})} + \overset{\text{誤差項}}{\epsilon_{it}(a_{it})} \quad (5)$$

相互作用効用
(Brock and Durlauf (2001))

$$S(a_{it}, \mathbf{a}) = -E \sum_{j \in c_{it}} J_{ijt}(a_{it} - a_{jt})^2 \quad (6)$$

個人*i*の
選択確率

$$P_i(a_{it}) = \frac{\exp(u(a_{it}) - E \sum_{j \in c_{it}} J_{ijt}(a_{it} - a_{jt})^2)}{\exp(u(a_{it}) + S(a_{it}, \mathbf{a})) + \exp(u(a'_{it}) + S(a'_{it}, \mathbf{a}))} \quad (7)$$

分子部分の変換

$$\prod_{j \in c_{it}} \exp\left(\frac{u(a_{it})}{|c_{it}|} - \frac{J_{ijt}}{|c_{it}|}(a_{it} - a_{jt})^2\right) \quad (8)$$

(4), (8)が等価となるためのポテンシャル関数の定義

$$W_{ij}(a_i, a_j) = \exp\left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|}\right) \times \exp\left(\frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|}\right) \quad (9)$$

W: ポテンシャル関数, B: 無向リンク集合, J_{ij} : 重みパラメータ, $|c_i|$: *i*のリンク数

QUBOへの変換(1)

$$\begin{aligned}
 \max_{\mathbf{a}} P(\mathbf{a}) &= \max_{\mathbf{a}} \frac{\prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)}{\sum_{\mathbf{z}} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j)} \\
 &\Rightarrow \max_{\mathbf{a}} \prod_{ij \in B} W_{ij}(a_i, a_j) \text{ (分子のみ)} \\
 &\Rightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \log(W_{ij}(a_i, a_j)) \text{ (対数化)} \\
 &\Leftrightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\log \left(\exp \left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|} \right) \right) + \log \left(\exp \left(\frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|} \right) \right) \right) \\
 &\Leftrightarrow \max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\frac{u(a_i) - J_{ij}(a_i - a_j)^2}{|c_i|} + \frac{u(a_j) - J_{ji}(a_i - a_j)^2}{|c_j|} \right) \quad (11)
 \end{aligned}$$

効用関数をaの二次形式で記述 ($\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_{i1} - \mathbf{u}_{i0}$)

$$u(a_i) = a_i u_{i1} + (1 - a_i) u_{i0} = a_i^2 u_{i1} + (1 - a_i^2) u_{i0} = (u_{i1} - u_{i0}) a_i^2 + u_{i0}$$

同時確率を最大化する行動組合せベクトル \mathbf{a} を求める問題

$$\max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\left(\frac{u_i - J_{ij}}{|c_i|} - \frac{J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i^2 + \left(\frac{2J_{ij}}{|c_i|} + \frac{2J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i a_j + \left(\frac{u_j - J_{ji}}{|c_j|} - \frac{J_{ij}}{|c_i|} \right) a_j^2 \right) \quad (13)$$

QUBOへの変換(2)

同時確率を最大化する行動組合せベクトル \mathbf{a} を求める問題

$$\max_{\mathbf{a}} \sum_{ij \in B} \left(\left(\frac{u_i - J_{ij}}{|c_i|} - \frac{J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i^2 + \left(\frac{2J_{ij}}{|c_i|} + \frac{2J_{ji}}{|c_j|} \right) a_i a_j + \left(\frac{u_j - J_{ji}}{|c_j|} - \frac{J_{ij}}{|c_i|} \right) a_j^2 \right)$$

QUBOへの変換

$$\min_{\mathbf{a}} E = \mathbf{a}^t \mathbf{Q} \mathbf{a}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_{ii} = - \sum_{j \in c_{it}} \left(\frac{u_i - J_{ij}}{|c_i|} - \frac{J_{ji}}{|c_j|} \right) \\ Q_{ij} = - \left(\frac{2J_{ij}}{|c_i|} + \frac{2J_{ji}}{|c_j|} \right), \quad (ij \in B) \cap (i < j) \\ Q_{ij} = 0, \quad (ij \notin B) \cup (i > j) \end{array} \right.$$

数値計算の方法

量子アニーリング方式の計算実行環境：DWave Leap

Advantage_system 1.1



Online

QC STATUS



5436

WORKING QUBITS



15.8 ± 0.5

QUBIT TEMP (MK)

Python環境

```
from dwave.system import DWaveSampler, EmbeddingComposite
```

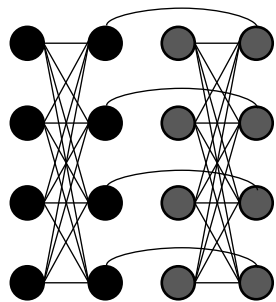
```
~~
```

```
sampleset = EmbeddingComposite(DWaveSampler()).sample_qubo(Q, num_reads=100)
```

```
~~
```

量子アニーリング：組み合わせ最適化問題のメタヒューリスティクス

イジングモデルの最低エネルギー状態（基底）を求める問題



$$E_{ising}(\{s_i\}) = - \sum_{i \in V} h_i s_i - \sum_{ij \in E} J_{ij} s_i s_j$$

局所磁場エネルギー 相互作用エネルギー

イジングスピン $s_i = \pm 1$

- V 個の量子のスピン s が ± 1 を同時にとる状態（横磁場制御）
- 相互作用，局所磁場の影響を強くしていくことで，基底状態に向かって，各スピンが ± 1 どちらかの確定した状態に自律的に到達

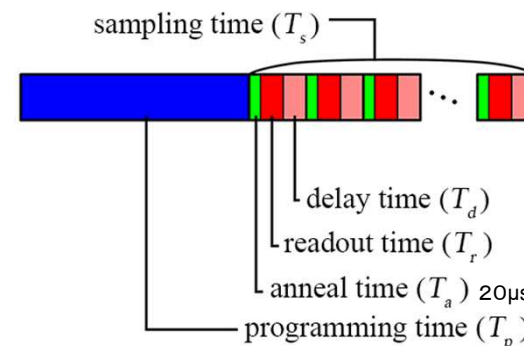
数値計算結果

- 5, 10, 20, 40ノードのクリークネットワークで計算
- u_i, J_{ij} はランダムに付与

※全列挙ソルバー (package: dimod) の最適解との一致を確認 (5, 10, 20ノード)

計算実行時間 (QPU Sampling Time)

ノード数	時間(ms)	#sample
5	8.41	100
10	8.55	100
20	9.45	100
40	12.85	100
100	14.25	100



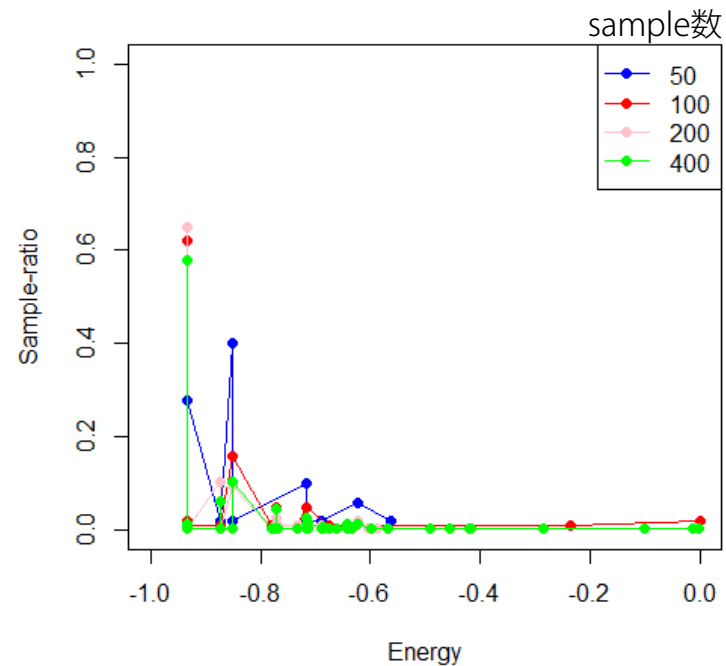
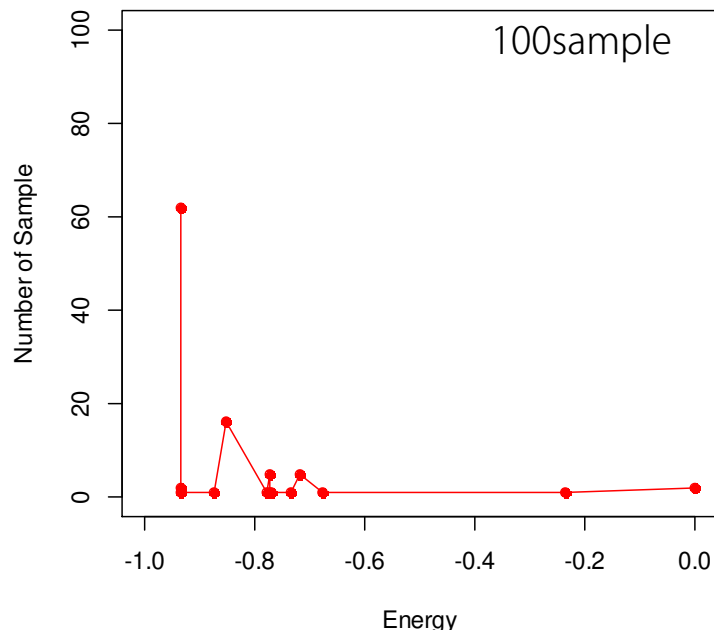
Dwave https://docs.dwavesys.com/docs/latest/timing_qa_cycle_time.html

数値計算結果

計算実行時間 (QPU Sampling Time)

ノード数	時間(ms)	#sample
40	5.07	50
40	12.85	100
40	25.43	200
40	51.24	400

Sampleごとの解の分布



まとめ

あくまで研究の一つのアプローチであるが、

- 工学技術の基礎としての最適化
 - 離散最適化, 連続量最適化 (含むパラメータ推定)

があり、

- 現象をいかに定式化するか
- どう最適化計算を解くのか

の両者は研究 (試行錯誤) の対象である

ご清聴ありがとうございました.