

# QKP-QUBO 変換における Hybrid エンコーディング方式

神保 聡<sup>1</sup> 小此木 大輝<sup>1</sup> 安藤 洸太<sup>1</sup> Chu Thiem Van<sup>1</sup> 劉 載勳<sup>1</sup> 本村 真人<sup>1</sup> 川村 一志<sup>1</sup>

**概要:** 二次ナップサック問題 (QKP) は二次制約無し二値最適化 (QUBO) の形式に変換することで、アニーリング計算を用いて解けることが知られている。変換にあたっては、ナップサック容量制約をエネルギー関数に取り込むための整数変数の導入が求められ、QUBO ではその整数変数を補助的な二値変数でエンコーディングする。エンコーディングの手法は複数あり、用いる手法によってアニーリング計算の結果が大きく異なる。QKP を対象に高品質な解を得るため、本稿ではまず、既存の Binary エンコーディングと Unary エンコーディングを用いた場合のアニーリング過程を可視化し、分析する。続いて、その分析に基づいて、既存のエンコーディング手法の問題点を解消する Hybrid エンコーディングを提案する。シミュレーション結果から、小規模ならびに中規模の QKP を対象とした場合には Hybrid エンコーディングが最も優れた性能を示すことを確認した。

## 1. はじめに

組合せ最適化は多種多様な産業及び研究で遭遇するが [1-3]、近年は様々な組合せ最適化で効率的かつ統一的に最適解を求める需要が高まっている。それらの需要に応えるため、統一されたプラットフォームで近似解を導出するイジングマシン [4-8] が注目を集めている。

イジングマシンは基底状態の探索を行う動作原理によって複数のタイプが存在する。最も有名なものは D-Wave [9] と呼ばれる量子アニーリングマシンだが、極低温環境を用意するための巨大な冷却装置が必要で、実用化の面で課題がある。一方で、シミュレーテッドアニーリング (SA) [10] を動作原理とするアニーリングマシンは、室温環境下で組合せ最適化問題を効率的に解けるものと期待されている [4,6]。本稿では主に SA を原理とするアニーリングマシンに注目する。

組合せ最適化問題をイジングマシンで解くには、対象の問題をイジングモデルに変換する必要がある。イジングモデルは複数のスピンの構成されたグラフで、各スピン  $\sigma_i$  が二つの状態  $\{-1, +1\}$  を表現する。イジングモデルでは、エネルギー関数  $H_{\text{Ising}}$  が以下のように定義される。

$$H_{\text{Ising}}(\sigma) = - \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=i+1}^{N-1} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=0}^{N-1} h_i \sigma_i + C, \quad (1)$$

$N$  はスピン数を、 $J_{i,j}$  は二つのスピン  $\sigma_i, \sigma_j$  間の相互作用を、 $h_i$  は  $\sigma_i$  に対する外部磁場を、 $C$  は定数を示す。エ

ネルギーが最小になった時のスピンの組み合わせを基底状態と呼ぶ。イジングモデルと等価なモデルとして二次制約無し二値最適化 (QUBO) が存在し、これは各変数  $x_i$  が二つの状態  $\{0, 1\}$  を表現する。QUBO のエネルギー関数  $H_{\text{QUBO}}$  は以下のように定義される。

$$H_{\text{QUBO}}(x) = - \sum_{i=0}^{N-2} \sum_{j=i+1}^{N-1} J'_{i,j} x_i x_j - \sum_{i=0}^{N-1} h'_i x_i + C', \quad (2)$$

$J'_{i,j}, h'_i, C'$  はそれぞれ  $J_{i,j}, h_i, C$  に対応する。イジングモデルと QUBO は、関係式  $x_i = (\sigma_i + 1)/2$  を用いることで両者間を自由に変換できることから、QUBO を用いて定式化した場合でもイジングモデルと同様に扱うことができる。これまでに、組合せ最適化問題をイジングモデル・QUBO として定式化する手法が様々な報告されている [11-14]。

アニーリングマシンを用いた解探索において、その解品質は定式化手法に大きく依存することが知られており [15]、各手法の長所・短所を明確にしておくことが重要と言える。また、より高品質な解を得ることができる新たな定式化手法を模索することも重要である。

本稿では、二次ナップサック問題 (QKP) [16] を対象とした QUBO 定式化 (以降、QKP-QUBO 変換) に着目し、定式化手法の違いがアニーリングマシンの解品質に与える影響を詳細に調査する。QKP-QUBO 変換の過程で必要になる整数エンコーディングには、既存手法として Binary エンコーディング (BE) と Unary エンコーディング (UE) が存在することから、先述した課題の探究に最適だと言える。先行研究 [15] では、この二つのエンコーディング手法

<sup>1</sup> 東京工業大学  
Tokyo Institute of Technology

がアニーリングマシンの実験結果に基づいて比較されている。しかしながら、アニーリングマシンではアニーリング過程を観測できない為、ある手法が優れている（劣っている）要因は解明されていない。

そこで我々は初めにアニーリング過程を可視化することのできる SA シミュレータを用意することで BE および UE の長短を明確化し、QKP を効果的に解くために必要な条件について議論する。その議論に基づいて Hybrid エンコーディング (HE) と名付けた新たな整数エンコーディング手法を提案する。SA のシミュレーション結果から、1) 提案した HE を用いて効果的な探索が行えること、2) QKP の特徴量によって適切なエンコーディング方式が異なること、を確認した。

本稿の主な貢献は以下の通りである。

- QKP-QUBO 変換に用いる既存の整数エンコーディング手法の長短を明確にした。
- 新たな整数エンコーディング手法として HE を提案し、SA シミュレータを通して高品質な解を得られることを実証した。
- 様々な QKP インスタンスを対象に BE, UE, HE を用いて QKP-QUBO 変換を実施し、SA によって得られる解品質を比較した。その結果、最適な整数エンコーディング手法が QKP の特徴量に依存することを確認した。

本稿の構成は以下の通りである。2 章では QKP の定式化と、SA のアルゴリズムを紹介する。3 章では既存の整数エンコーディング手法 (BE, UE) を用いた QKP-QUBO 変換を紹介し、各エンコーディング手法の長短を明確にする。4 章では新たな整数エンコーディング手法として HE を提案する。5 章では実験結果を示し、それに基づいた議論を行う。最後に、6 章で本稿を締め括る。

## 2. 事前知識

### 2.1 二次ナップサック問題 (QKP)

QKP は重量制約  $c$  の中で、ナップサックに詰め込む荷物の価値  $P$  を最大化するのが目的の組合せ最適化問題である。QKP では問題の入力として、品物の個数  $K$ 、ナップサック容量  $c$ 、 $i$  番目の品物の重量  $w_i$  と価値  $p_{i,i}$ 、 $i$  番目と  $j$  番目の品物を同時に入れた時に得られる相乗価値  $p_{i,j}$  が与えられる。

ここで二値変数  $x_i$  を用意し、“1” ならば  $i$  番目の品物がナップサックに詰め込まれたことを、“0” ならば詰め込まれていないことを指す変数として定義する。この二値変数を用いた時、ナップサックに詰め込まれた品物の合計重量  $W$  は以下のように表される。

$$W = \sum_{i=0}^{K-1} w_i x_i. \quad (3)$$

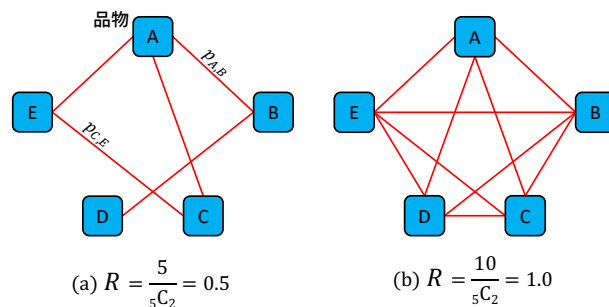


図 1  $K = 5$  の QKP インスタンスの例. 品物間を結ぶ赤線は相乗価値を表し、(a) と (b) では相乗価値密度  $R$  が異なる。

そして、QKP で最大化されるべき目的関数  $P$  は、

$$P = \sum_{i=0}^{K-1} \sum_{j=i}^{K-1} p_{i,j} x_i x_j \quad (4)$$

で表される。ただし、以下の制約式を満たさなければならない。

$$W \leq c. \quad (5)$$

本稿の実験では、品物数  $K$ 、重量制約  $c$ 、相乗価値密度  $R$  が特徴量として与えられた QKP インスタンスをランダムに生成し使用する。相乗価値密度  $R$  は、全ての品物ペアに対する相乗価値を持つ商品ペアの割合として定義される。 $P$  の定義を明確化するために、図 1 に QKP インスタンスの例を二通り示す。全ての QKP インスタンスにおいて、品物の重量  $w_i$  と価値  $p_{i,i}$ 、 $p_{i,j}$  はそれぞれ  $[1, 10]$  と  $[0, 10]$  の一様乱数として設定した。

### 2.2 シミュレーテッドアニーリング (SA)

SA はイジングモデルの基底状態探索を行うアルゴリズムとしてよく知られていて、CMOS アニーリングマシン [4] やデジタルアニーラ [6] の動作原理として利用されている。ランダムに選択したスピンを確率的に反転させる ( $+1 \rightarrow -1$  または  $-1 \rightarrow +1$ ) 動作を、マルコフ連鎖モンテカルロ法に従って各モンテカルロ (MC) ステップで実行し、基底状態を探索する。SA の特徴として、擬似温度と呼ばれるパラメータ  $T$  で反転確率を制御し、スピンの組み合わせが局所解に捉われないようにしていること点がある。 $T$  は最初、大域的な探索のため大きな値に設定され、時間が経つにつれて局所的な探索をするために値を徐々に小さくするように制御される。

既存のアニーリングマシンは結果のみを出力するため、アニーリング過程が観察できず、基底状態探索がどのように行われているかをよく観察し検証するには向いていない。従って、我々は Python ベースの SA シミュレータを実装することでアニーリング過程を可視化できるようにした。本稿における全ての実験結果は、この SA シミュレータを用いて取得したものである。

### 3. 既存の整数エンコーディング手法を用いた QKP-QUBO 変換

#### 3.1 QKP-QUBO 変換

QKP-QUBO 変換を行うために、全体のエネルギー関数  $H_{\text{QUBO}}$  を、二つのエネルギー項  $H_a$ ,  $H_b$  の和として定義する。  $H_a$  は式 (3), (5) を含む制約項で、  $H_b$  は目的関数を変換した項で式 (4) を含む。式の詳細は以下の通りである。

制約項  $H_a$  は、

$$H_a = (E - W)^2 = \left( E - \sum_{i=0}^{K-1} w_i x_i \right)^2 \quad (6)$$

で表される。式 (6) はナップサックに詰め込んだ品物の総重量  $W$  と  $[0, c]$  の範囲で動く変数  $E$  の差分を 2 乗することで構成される。この計算により、  $W \leq c$  ならば  $H_a = 0$  を満たす  $E$  が必ず存在し、逆に  $W > c$  ならば  $H_a$  は必ず 0 より大きくなることから、式 (6) は制約式  $W \leq c$  を表す。一方、適切な  $E$  の値はアニーリング過程で自動的に調整される必要があり、そのために  $E$  を二値変数で表現する方法が必要になる。

既存のエンコーディング手法として BE と UE の 2 通りがあり、採用する手法によってアニーリングの結果得られる解品質に差が生じることが確認されている [15]。BE, UE の詳細は 3.2 節で紹介する。

次に、目的関数をエネルギー項に変換した  $H_b$  は以下の式で表される。

$$H_b = -P = - \sum_{i=0}^{K-1} \sum_{j=i}^{K-1} p_{i,j} x_i x_j. \quad (7)$$

QKP は総価値  $P$  を最大にする組み合わせを探索する問題なので、負号を付けて  $H_b$  を構成する。

式 (6), (7) に基づいて、全体のエネルギー関数  $H_{\text{QUBO}}$  を、

$$H_{\text{QUBO}} = \alpha H_a + H_b \quad (8)$$

で表現し、  $\alpha$  は正の定数とする。  $\alpha$  の設定値は一般に、アニーリングマシンが  $H_a = 0$  を満たすことができるよう十分に大きく取る必要がある。しかし、  $\alpha$  が大きすぎると  $H_b$  の最小化に悪い影響を与えてしまうため、  $H_a = 0$  を高確率で満たせる範囲でなるべく小さな値を設定することが望ましい。

#### 3.2 既存の整数エンコーディング手法

BE と UE で異なるのは補助二値変数に与える重みの違いで、BE はそれぞれ 2 の累乗、UE は全て 1 を与える。そのため、  $E$  を表現するために必要な補助二値変数の数も異なる。  $D$  を補助二値変数の数、  $y_d$  を  $d$  番目の補助二値変数とすると ( $0 \leq d \leq D-1$ )、  $E$  はそれぞれ

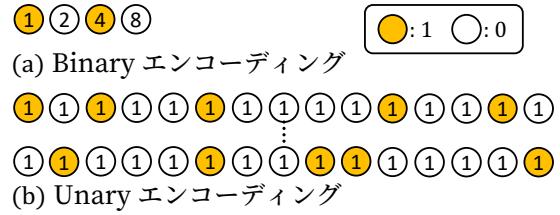


図 2 既存のエンコーディング手法を用いた  $E = 5$  の表現 ( $c = 15$ ). 各丸が補助二値変数  $y_d$  を表し、中の数字が与えられた重みを表す。

$$E_{\text{binary}} = \sum_{d=0}^{D-1} 2^d y_d - (2^D - 1 - c), \quad (9)$$

$$E_{\text{unary}} = \sum_{d=0}^{D-1} y_d, \quad (10)$$

と表せる。ただし、先述した重みの与え方より、BE では  $D = \lceil \log_2 c \rceil$ 、UE では  $D = c$  とする。式 (9), (10) はそれぞれ全ての補助二値変数が “1” となった時に  $E = c$  となる。

図 2 は、BE と UE を用いた場合の  $E = 5$  の表現を例示する。本図において、  $E$  が表すことのできる上限値  $c$  は 15 である。BE は  $E$  を用意する際に UE よりも少量の補助二値変数で済む一方で、各重量を表現する方法は、UE が複数通りを有しているのに対して BE は 1 通りである。

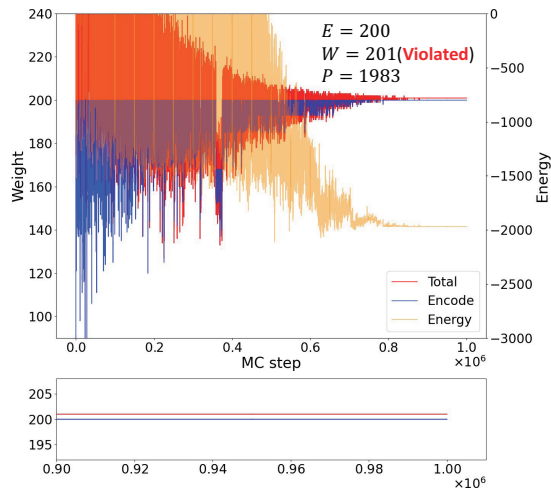
#### 3.3 SA シミュレーション

本シミュレーションでは、  $(K, c, R) = (100, 200, 0.25)$  の QKP インスタンスを使用し、式 (8) の  $\alpha$  は 15 とした。

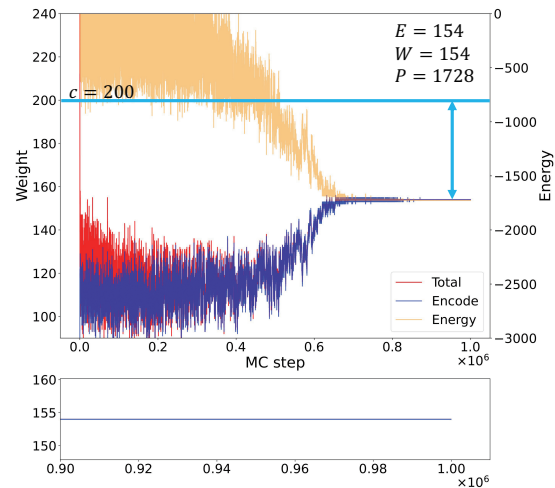
BE と UE を用いて QKP-QUBO 変換した QKP インスタンスに対する SA シミュレーションの結果を、図 3 (a), (b) にそれぞれ示す。横軸は SA の MC ステップ数で、右に進むにつれてアニーリングが進行している。図 3 の赤・青・オレンジの線はそれぞれ、式 (3) の総重量  $W$ 、式 (9) 又は (10) の  $E$ 、式 (8) のエネルギー関数  $H_{\text{QUBO}}$  の値を指す。

(a) を見ると、ナップサック容量限界まで探索されているが、制約に違反した解空間 ( $W > c$  の領域) も頻繁に探索しているため、効果的な探索とは言い切れない。更に、  $W \approx c$  の領域を重点的に探索することで最終的に制約違反解を導出してしまうことが危惧される。実際、(a) 下のグラフを見ると総重量が 200 を超えて探索を終えていることから、この実行では制約  $W \leq c$  を満たす解を得られていない。この場合、  $H_a = 0$  を満たしやすくするために  $\alpha$  を大きな値に修正する必要があるが、この修正により、  $H_b$  を最小化するのが困難になると推測される。

(b) を見ると、UE を用いた場合、探索中の  $W$  が常に  $c$  を下回っていると同時に、  $W$  が徐々に増加していることを示している。ここから、BE よりも  $W \leq c$  を満たした有効な解のみを効果的に探索できることが期待できる。しか



(a) Binary エンコーディング (BE).



(b) Unary エンコーディング (UE).

図 3  $(K, c, R) = (100, 200, 0.25)$  の QKP インスタンスに対して  $\alpha = 15$  で QUBO 変換し, SA シミュレータで実行した結果. 赤が品物の総重量  $W$ , 青が補助変数の重みの合計値  $E$ , オレンジがエネルギー関数  $H_{\text{QUBO}}$  の値を示す. BE は制約  $W \leq c$  を違反し, UE は  $W$  が  $c$  に近づく遥か手前で更新が止まっている.

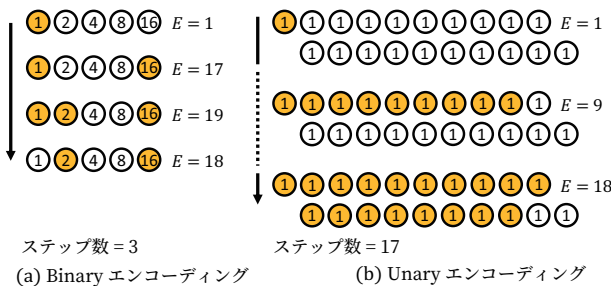


図 4  $E$  を 1 から 18 まで増加させるのに必要な最小ステップ数.

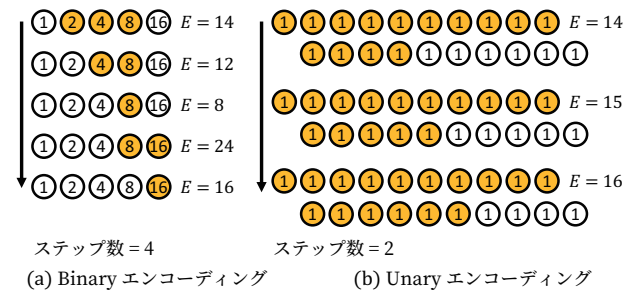


図 5  $E$  を 14 から 16 まで増加させるのに必要な最小ステップ数.

し, 総重量  $W$  がナップサック容量  $c$  に届く遥か手前で探索が終了していることも確認できるので, まだ詰めていない品物をさらに詰め込めば  $W \leq c$  を満たす中でより良い解が得られることが明白で, シミュレーションで得られた解の品質が明らかに悪いと言える.

以上の結果から, BE を用いると制約条件  $W \leq c$  を違反しやすく, UE を用いるとナップサックの容量を使い切る前に探索が終了することを確認した. 重量遷移の挙動を踏まえると, BE よりも UE の方が効率的な探索を期待できるが, UE の弱点を克服し, 解品質を改善する必要がある. 従って, 次章では UE の総重量  $W$  が増加しなかった原因を考察し, 問題解決に向けた新たな手法を提案する.

## 4. Hybrid エンコーディング手法

### 4.1 既存手法の挙動

まず, BE, UE それぞれの  $E$  が  $E_s$  から  $E_d$  まで遷移するのに必要なステップ数を考えることで両者の特徴を明らかにする. 図 4, 5 はそれぞれ  $(E_s, E_d) = (1, 18)$  と

$(E_s, E_d) = (14, 16)$  を表すが, どちらも BE と UE で動きが明らかに異なり, UE は単調に  $E$  を増加させるが, BE は増減を経て遷移している.

これらの動きは SA の探索プロセスに大きな影響を与えると考えられる. 図 6 は図 3 (b) のアニーリング終盤で起こりうる状態遷移の一例を表している. (a) では品物が追加されたことで, 総重量  $W$  はその品物の分だけ増加し,  $H_a$  の値も大きくなる. この後, アニーリングはエネルギーを最小にする方向に動くが, UE では (b) と (c) の過程を経て  $W = 10$  に戻ってしまうと推測される. そして (a), (b), (c) の流れを繰り返すことが, 総重量は多少変化するが同レベルに留まってしまう現象につながり, 図 3 (b) で見られた挙動もこれに起因するものと考えられる.

ここで仮に  $E$  を増加させるような遷移が発生すれば, 品物を取り除くことなく  $H_a = 0$  を満たせる. しかし, すでに言及した通り, UE は各補助変数の重みが 1 しかない為,  $E$  を大幅に増加させるには増加量と同じだけのステップ数が必要になる. 結果,  $E$  を増加させる動作はほとんど起き

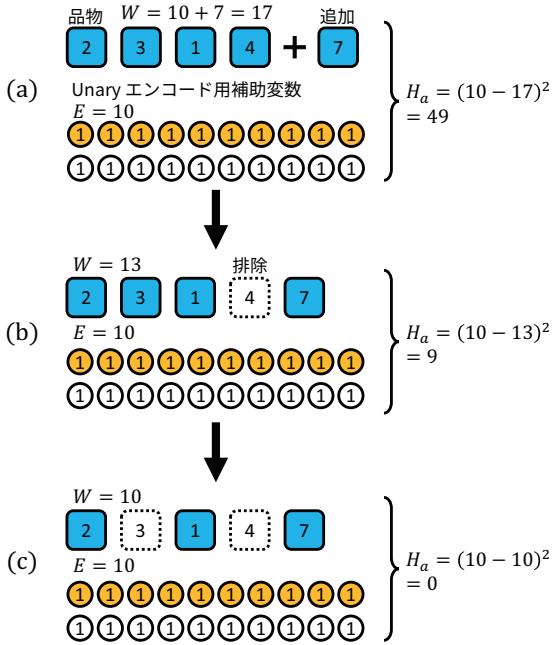


図 6 UE を用いた場合に起こりうるアニーリング中の挙動。(a) で重量が 7 の品物が新たに詰め込まれ、 $H_a$  が一時的に増加するが、 $H_a$  を 0 にするために、その後の (b) と (c) で次々とナップサックから品物を取り除いてしまう。

ず、総重量  $W$  が増加しなくなる。

以上の議論を経て、我々は新たな整数エンコーディング手法を、1)  $E$  を UE よりも少ないステップ数で変化させられる、2) UE と同様に  $E$  の変化が連続的である、ことを目標に考案した。

#### 4.2 Hybrid エンコーディング (HE)

既存手法では補助二値変数には 1 (UE) か 2 の累乗 (BE) が重みとして与えられていた。HE では、複数の変数に 1 の重みを与えることで UE の強みを活かし、それ以外の変数には 2 以上の重みを与えることで BE の強みを加える。HE を用いた場合の  $E$  は、

$$E_{\text{hybrid}}^{(m)} = \sum_{d=0}^{D-1} Y_d y_d, \quad (11)$$

$$Y_d \in \{2^a \mid 0 \leq a \leq m, a \in \mathbb{Z}\}, \quad \sum_{d=0}^{D-1} Y_d = c, \quad (12)$$

で表現する。 $m$  は重みの最大値を定義するパラメータで、 $D$  は補助変数の数を示す。例えば、 $m = 1$  の時、各補助変数に与えられる重みは  $\{1, 2\}$  のいずれかになり、 $m = 2$  の時は  $\{1, 2, 4\}$  のいずれかが与えられる。補助変数に与える重みは  $\{Y_d\}_{0 \leq d \leq D-1}$  で柔軟に決定できるが、式 (12) の通り、与えた重みの総和は容量制約  $c$  と等しい必要がある。補助変数の個数  $D$  は、BE より多く UE より少なくなるが、 $m$  や重みの配分方法で変動する。

図 7 に、(a)  $m = 1$  ならびに (b)  $m = 2$  の HE を用い

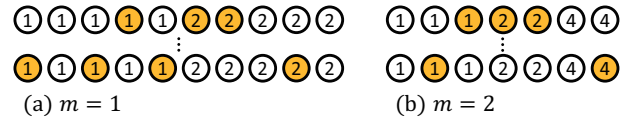


図 7 HE を用いた  $E = 5$  の表現 ( $c = 15$ )。

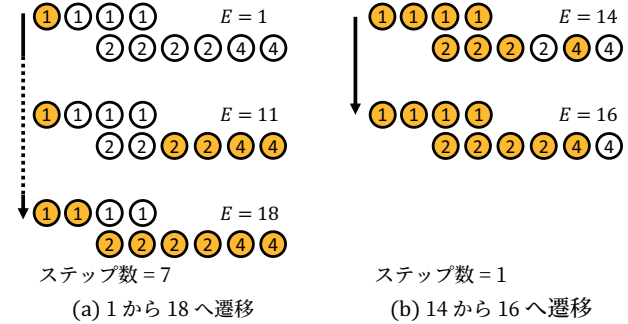


図 8  $m = 2$  の HE を用いた場合に、 $E$  を (a) 1 から 18、(b) 14 から 16 まで増加させるのに必要な最小ステップ数。

て  $E = 5$  を表現する一例を示す。HE は UE 同様、同一重量を複数の方法で表現可能である。図 4、5 と同様に、 $E_{\text{hybrid}}^{(2)}$  が  $E_s$  から  $E_d$  へ遷移するのに必要な最小ステップ数を表している。(a) では  $(E_s, E_d) = (1, 18)$  の場合の状態遷移の一例を挙げているが、UE より少ないステップ数で  $E$  の遷移が可能になっている。また、(a)、(b) 両方の事例で、UE のような単調な遷移になる。このように、HE は UE と BE 両者の利点を兼ね備えた整数エンコーディング手法になると同時に、QKP-QUBO 変換に HE を用いることで、高品質な解が得られると期待される。

#### 4.3 SA シミュレーション

HE を用いて QUBO に変換した QKP インスタンスに対する SA シミュレーションの結果を図 9 に示す。本シミュレーションでは、3.3 節と同様に、 $(K, c, R) = (100, 200, 0.25)$  の QKP インスタンスを対象に  $\alpha = 15$  として生成した QUBO を用いた。HE は  $m = 2$  を想定し、補助変数の重みの分配は  $\{1, 2, 4\}$  それぞれの数が極力均等になるようにした。

図 9 は (a) が図 3 と同様にアニーリング過程を可視化したもので、(b) は各変数が更新された過程を示すものになる。黒い部分はその変数が“0”の状態にあることを意味し、白い部分は変数が“1”であることを意味する。図の QUBO では、0 から 99 番目の変数が品物用の変数で、100 番目以上の変数は補助変数  $y_d$  を指す。

(a) を見ると、HE の挙動が UE と類似していることに加え、アニーリングの終盤には探索が  $W \approx c$  の解空間まで到達していることを確認できる。すなわち、HE を用いた場合、 $W \leq c$  を満たす状態で効果的な探索が行えたと判断できる。

(b) の  $\{y_d\}_{0 \leq d \leq D-1}$  に該当する補助変数に注目すると、

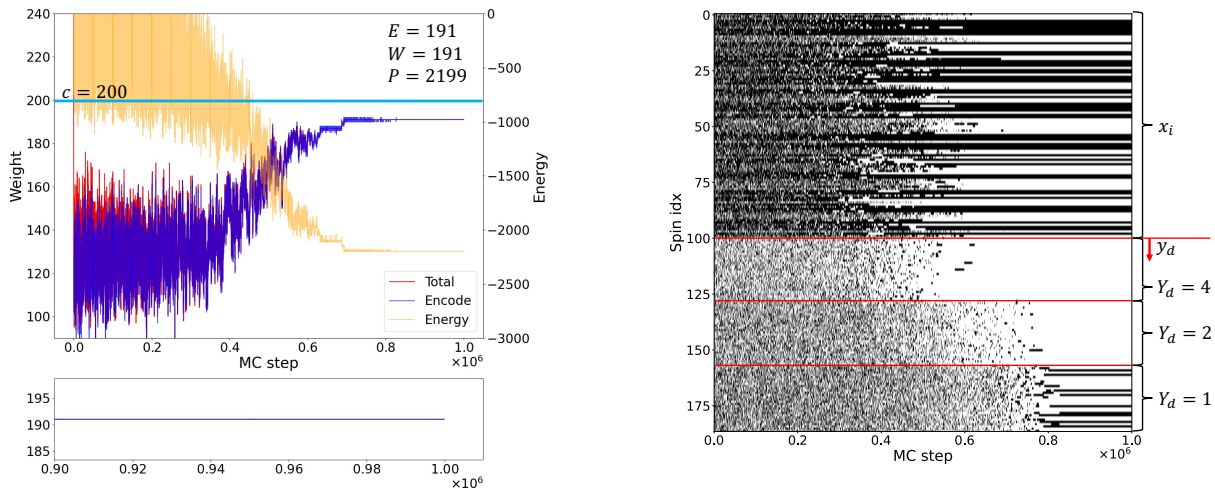


図 9  $(K, c, R) = (100, 200, 0.25)$  の QKP インスタンスに対して HE を用いて QUBO 変換し ( $\alpha = 15$ ), SA シミュレータで実行した結果. 左図から, 制約  $W \leq c$  を満たし, 終盤で  $W$  が  $c$  に近づくような探索となっていることを確認できる. 右図から,  $Y_d = 4$  の補助変数が最初に使用され, 続けて  $Y_d = 2, 1$  の順に使用されていることを確認できる.

表 1 必要な二値変数の数.

$2^*(K, c)$	Encoding settings				
	BE	UE	HE(1)	HE(2)	HE(3)
(50, 100)	57	150	117	94	79
(100, 200)	108	300	234	187	156
(200, 300)	209	500	400	330	280

表 2 SA の実行条件.

Notation	Description	Value
$S$	# of MC steps	$1.0 \times 10^6$
$M$	# of trials	100
$T_{\text{init}}$	Initial temperature	$0.01N \times \max( J_{i,j} )$
$T_{\text{fin}}$	Final temperature	$0.1 \times \min_{J_{i,j} \neq 0} ( J_{i,j} )$

反転のタイミングによって 3 つのグループに分けられる. 最初に  $Y_d = 4$  の補助変数が使用され, その後  $Y_d = 2, 1$  の順で反転が起きている. この振る舞いは, HE が  $E$  の増加に多大なステップ数を要するという UE の短所を克服するものと考えられる. 実際, 本シミュレーションの結果を見ると, HE は UE よりも高品質な解を得ることに成功している.

## 5. 評価

### 5.1 実験準備

本実験では, 以下に示す 12 種類の特徴量の組  $(K, c, R)$  を持つ QKP を想定し, 特徴量の組ごとにそれぞれ 5 個のインスタンスを用意した.

$$(K, c, R) \in \{(50, 100), (100, 200), (200, 300)\} \\ \times \{0.25, 0.50, 0.75, 1.00\}$$

ここでは HE として  $m = 1, 2, 3$  を想定し, それぞれを  $\text{HE}(m)$  と表記する. すなわち, 本評価に用いる整数エンコーディング手法は BE, UE, HE(1), HE(2), HE(3) の 5 種類である. 表 1 に QKP-QUBO 変換で必要となる二値変数の数をまとめる. HE は BE よりも必要な変数が多いが, UE よりも少ない. HE の中では,  $m$  の値が増えるほど必要な変数の数は少なくなる.

SA シミュレーションの実行に必要な各種パラメータは表 2 の通りとした. 1 回のアニーリングにつき 100 万 MC ステップの更新試行を行い, これを 100 回実行した. 擬似温度  $T$  は  $T_{\text{init}}$  から  $T_{\text{fin}}$  まで指数的に減衰させた.

本稿では, エンコーディング手法  $A$  と QKP インスタンス  $I$  の組に対して, 式 (8) 中の  $\alpha$  を以下の手順で決定した.

- (1) すべての  $A$  と  $I$  の組に対して,  $\alpha$  の初期値を 15 としてステップ 2-3 を実行する\*1.
- (2) SA を実行し, 制約充足率を計算する. ただし, ここでの制約は  $W \leq c$  を満たすことを指す.
- (3) 制約充足率が 0.8 以上であれば, その時点の  $\alpha$  ならびに制約充足解の総価値  $P$  の平均値  $\bar{P}$  を記録し終了する. 一方, 0.8 を下回った場合には  $\alpha = \alpha + 5$  として再度ステップ 2 を実行する.

なお, ステップ 3 で  $\alpha = 100$  に到達しても制約充足率が 0.8 以上とならない  $A$  と  $I$  の組については, 高品質な解を得られないと判断し上記の手順を打ち切った.

### 5.2 実験結果

表 3 から 5 はそれぞれ小・中・大規模 QKP に対する平

\*1 [14] より,  $\alpha$  は少なくとも  $\alpha > \max(p_{i,j})$  を満たす必要がある.

表 3 小規模 QKP :  $(K, c) = (50, 100)$  に対する結果.

Inst. $R$	Inst. idx	Average total profit $\bar{P}/\alpha$				
		BE	UE	HE(1)	HE(2)	HE(3)
0.25	1	683 / 20	545 / 15	611 / 15	<b>685</b> / 15	673 / 15
	2	659 / 20	572 / 15	631 / 15	<b>684</b> / 15	669 / 15
	3	<b>502</b> / 15	376 / 15	406 / 15	455 / 15	468 / 15
	4	<b>614</b> / 15	464 / 15	516 / 15	558 / 15	577 / 15
	5	<b>536</b> / 15	394 / 15	438 / 15	492 / 15	500 / 15
0.50	1	<b>784</b> / 25	572 / 15	660 / 15	759 / 15	779 / 15
	2	1071 / 30	1003 / 15	1098 / 15	<b>1187</b> / 15	1184 / 15
	3	854 / 25	714 / 15	830 / 15	<b>906</b> / 15	827 / 20
	4	1188 / 30	1179 / 15	1288 / 15	<b>1361</b> / 15	1210 / 25
	5	1395 / 30	1334 / 15	1474 / 15	<b>1583</b> / 15	1517 / 20
0.75	1	1404 / 35	1325 / 15	1459 / 15	<b>1586</b> / 15	1489 / 20
	2	1585 / 50	1765 / 15	1864 / 15	<b>1880</b> / 20	1746 / 25
	3	1704 / 40	1891 / 15	<b>2067</b> / 15	1946 / 30	1800 / 30
	4	1364 / 40	1304 / 15	1464 / 15	<b>1495</b> / 20	1381 / 25
	5	1240 / 30	1068 / 15	1251 / 15	<b>1288</b> / 20	1255 / 20
1.00	1	2097 / 50	2214 / 15	<b>2390</b> / 15	2322 / 25	2200 / 30
	2	1807 / 50	1848 / 15	<b>2009</b> / 15	1998 / 25	1884 / 30
	3	1930 / 50	2035 / 15	<b>2224</b> / 15	2186 / 25	1983 / 35
	4	1817 / 55	1891 / 15	<b>2067</b> / 15	1969 / 25	1899 / 30
	5	1668 / 40	1647 / 15	1829 / 15	<b>1861</b> / 20	1691 / 30

表 4 中規模 QKP :  $(K, c) = (100, 200)$  に対する結果.

Inst. $R$	Inst. idx	Average total profit $\bar{P}/\alpha$				
		BE	UE	HE(1)	HE(2)	HE(3)
0.25	1	1812 / 30	1721 / 15	1912 / 15	<b>2120</b> / 15	2075 / 15
	2	2019 / 40	2100 / 15	2390 / 15	<b>2547</b> / 15	2468 / 15
	3	1828 / 30	1745 / 15	1955 / 15	<b>2173</b> / 15	2088 / 15
	4	1835 / 35	1872 / 15	2061 / 15	<b>2283</b> / 15	2084 / 20
	5	1843 / 30	1713 / 15	1924 / 15	<b>2155</b> / 15	2137 / 15
0.50	1	3002 / 60	3088 / 15	3467 / 15	<b>3767</b> / 15	3531 / 20
	2	3101 / 65	3440 / 15	3792 / 15	<b>3863</b> / 20	3608 / 25
	3	2820 / 55	3190 / 15	3520 / 15	<b>3535</b> / 20	3271 / 25
	4	2776 / 40	2967 / 15	3310 / 15	<b>3517</b> / 15	3069 / 25
	5	3334 / 45	3491 / 15	3862 / 15	<b>4171</b> / 15	3806 / 25
0.75	1	-	6142 / 15	6683 / 15	<b>6805</b> / 20	6624 / 25
	2	4502 / 70	5110 / 15	<b>5569</b> / 15	5388 / 25	5143 / 30
	3	5511 / 80	<b>7322</b> / 15	7268 / 20	7091 / 30	6348 / 45
	4	5314 / 85	6510 / 15	7046 / 15	<b>7137</b> / 20	6546 / 35
	5	5045 / 100	6624 / 15	<b>7110</b> / 15	6881 / 25	6239 / 40
1.00	1	7320 / 95	9589 / 15	<b>9604</b> / 20	9153 / 35	8666 / 45
	2	-	8127 / 15	<b>8773</b> / 15	8400 / 30	7706 / 50
	3	5702 / 90	<b>7555</b> / 15	7523 / 20	7261 / 30	6545 / 45
	4	6594 / 85	<b>8603</b> / 15	8202 / 25	8246 / 35	7620 / 45
	5	5763 / 85	<b>7705</b> / 15	7146 / 25	7025 / 40	6480 / 45

均総価値  $\bar{P}$  と  $\alpha$  をまとめたものである。各インスタンスで最も高い平均総価値  $\bar{P}$  の結果を太字で示す。データの無いセルは  $\alpha = 100$  で制約充足率が 0.8 未満であった場合を示す。

小規模の QKP では、表 3 の通り、 $R = 0.25$  では BE が優れた結果を示したが、それ以上の密度になると 0.50 と 0.75 では HE(2) が、1.00 では HE(1) が優位であった。詳細に注目すると、 $R = 0.25$  と 0.50 では BE が UE より優位になるが、1.00 では UE が BE より良い結果をもたらす。この BE と UE の結果は文献 [15] と一致する。中規模 QKP では、表 4 の通り、 $R = 0.25$  と 0.50 では HE(2) が、 $R = 1.00$  では UE と HE(1) が優位になった。大規模な QKP では、表 5 の通り、 $R = 0.50$  から 1.00 までは UE が優れた結果を残した。一方で BE は制約充足率で 80% を超えたものが無い結果となった。 $P = 0.25$  のみ、HE(1) が優れた結果となった。

表 5 大規模 QKP :  $(K, c) = (200, 300)$  に対する結果.

Inst. $R$	Inst. idx	Average total profit $\bar{P}/\alpha$				
		BE	UE	HE(1)	HE(2)	HE(3)
0.25	1	5218 / 80	7510 / 15	<b>7931</b> / 15	7260 / 30	7001 / 25
	2	4434 / 75	6469 / 15	<b>6904</b> / 15	6709 / 20	6022 / 25
	3	4446 / 75	6360 / 15	<b>6774</b> / 15	6323 / 25	5908 / 25
	4	4245 / 70	5951 / 15	<b>6359</b> / 15	6126 / 20	5562 / 25
	5	5100 / 90	7632 / 15	<b>8030</b> / 15	7654 / 25	7168 / 25
0.50	1	-	<b>14682</b> / 15	14140 / 25	13233 / 45	11980 / 50
	2	-	<b>13233</b> / 20	12860 / 30	11976 / 50	11055 / 50
	3	-	<b>15054</b> / 15	14365 / 25	13543 / 40	12405 / 50
	4	-	<b>12976</b> / 15	12798 / 20	12120 / 35	10949 / 45
	5	-	<b>14760</b> / 15	14171 / 25	13203 / 45	12277 / 50
0.75	1	-	<b>19333</b> / 25	18767 / 35	17906 / 50	16116 / 70
	2	-	<b>16532</b> / 25	16492 / 30	15267 / 50	13426 / 75
	3	-	<b>18376</b> / 20	17726 / 30	16926 / 55	15440 / 65
	4	-	<b>17556</b> / 20	16794 / 30	15602 / 55	13679 / 75
	5	-	<b>18282</b> / 30	17829 / 45	16634 / 65	15183 / 75
1.00	1	-	<b>25954</b> / 25	24861 / 40	23789 / 65	21926 / 85
	2	-	<b>28393</b> / 35	27050 / 60	25469 / 85	23150 / 100
	3	-	<b>28627</b> / 30	28103 / 40	26044 / 75	24138 / 90
	4	-	<b>23806</b> / 35	23290 / 35	22628 / 45	21636 / 60
	5	-	<b>29855</b> / 25	28307 / 45	26799 / 75	24506 / 90

以上から、BE や UE だけでなく HE を用いることでより高品質な解が得られることを確認した。また、QKP-QUBO 変換において適切な整数エンコーディング手法は QKP の規模  $(K, c)$  と相乗価値密度  $(R)$  に依存することを確認した。

### 5.3 考察

実験結果は、QKP の規模と相乗価値密度によって適切なエンコーディング手法が異なることを示していたが、これは 1 個の品物を詰めることで得られる価値の増加量が大きく影響しているものと考えられる。 $H_a = 0$  の状態で新しい品物を詰め込むと、式 (4) から (7) より、エネルギー関数の変化量  $\Delta H$  は、

$$\Delta H = \alpha \Delta H_a + \Delta H_b = \alpha (\Delta W)^2 - \Delta P, \quad (13)$$

で求まる。 $\Delta W$  は新たに追加した品物の重さを指す。QKP の規模が大きくなると、品物を 1 個詰めた際に得られる相乗価値が大きくなるため  $\Delta P$  が大きくなり、重量増加の影響が薄くなる。

QKP の規模が小さい場合、 $\Delta W$  の影響が相対的に強く、UE では  $E$  を変更する前にナップザックから品物を取り除き、 $H_a$  を補正する。一方、QKP の規模が大きいと、 $\Delta P$  の影響が強くなるため、 $E$  を変更するために多くのステップ数をかけても品物をナップザック内に留めようとする。これが、大規模 QKP において、UE が  $W \approx c$  の解を得る理由であり、表 5 で UE が他を圧倒した理由になる。

QKP の規模と同様に相乗価値密度  $R$  は、得られる価値の大きさ  $\Delta P$  に関与することで  $H_a$  に影響を与える。例えば、 $(K, c, R) = (50, 100, 0.25)$  の QKP は、平均  $12.25 (= 49 \times 0.25)$  個の品物から相乗価値を得ることができる。一方、 $(K, c, R) = (50, 100, 1.00)$  の QKP は、 $49 (= 49 \times 1.00)$  個の品物から相乗価値を得ることができ

る。したがって、相乗価値密度  $R$  も同様に重量遷移に影響すると予想できる。

以上のことから、イジングマシンは、 $x_i$  の反転によって  $\Delta H_b$  が  $-\alpha\Delta H_a$  より大きくなったとき、目的項  $H_b$  を制約項  $\alpha H_a$  より重要視し、制約項  $\alpha H_a$  を無視する振る舞いで BE, UE, HE の重量を増加させるメカニズムであると推論できる。すなわち、イジングマシンは、 $x_i$  を “1” に反転させることによる価値増加がペナルティの増加を上回る場合、全体のエネルギー関数を減少させるために  $x_i$  を “0” に戻さず、新しい補助変数を “1” に反転させる傾向があることがわかる。

## 6. まとめ

本論文ではまず、QUBO で QKP を定式化したときの SA の挙動を既存の手法で解析した。可視化に基づく解析により、SA はエンコード手法によって高温から低温まで異なる重み範囲を探索することが確認された。同時に、Unary エンコーディングでは、モデルによっては収束が未熟になる可能性があることを指摘した。

次に、Hybrid エンコーディングを提案し、既存の Binary エンコーディング、Unary エンコーディングと比較した。3つの手法のうち、Hybrid エンコーディングは小・中規模のモデルで有望な結果を示し、特定の条件下で優位性を示した。実験結果に基づく考察では、項目の重みと価値のバランスによって SA の振る舞いの変化し、それゆえ最適なエンコーディング手法が異なることを指摘した。この知見により、今後、アニーリングにより QKP を解く際に、与えられたパラメータに基づいて適切なエンコーディング手法を選択することが可能になると考えられる。

**謝辞** 本研究の一部は JST CREST JPMJCR18K3 の支援を受けて実施したものである。

## 参考文献

- [1] A. M. Fathollahi-Fard, K. Govindan, M. Hajiaghahi-Keshteli, and A. Ahmadi, “A green home health care supply chain: New modified simulated annealing algorithms,” *Journal of Cleaner Production*, vol. 240, pp. 118200:1–19, 2019.
- [2] W. Zhang, A. Maleki, M. A. Rosen, and J. Liu, “Optimization with a simulated annealing algorithm of a hybrid system for renewable energy including battery and hydrogen storage,” *Energy*, vol. 163, pp. 191–207, 2018.
- [3] L. Wei, Z. Zhang, D. Zhang, and S. C. Leung, “A simulated annealing algorithm for the capacitated vehicle routing problem with two-dimensional loading constraints,” *European Journal of Operational Research*, vol. 265, no. 3, pp. 843–859, 2018.
- [4] M. Yamaoka, C. Yoshimura, M. Hayashi, T. Okuyama, H. Aoki, and H. Mizuno, “A 20k-spin Ising chip to solve combinatorial optimization problems with CMOS annealing,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 51, no. 1, pp. 303–309, 2016.
- [5] T. Okuyama, T. Sonobe, K. Kawarabayashi, and M. Yamaoka, “Binary optimization by momentum annealing,” *Physical Review E*, vol. 100, pp. 1–9, Jul 2019.
- [6] M. Aramon, G. Rosenberg, E. Valiante, T. Miyazawa, H. Tamura, and H. G. Katzgraber, “Physics-inspired optimization for quadratic unconstrained problems using a digital annealer,” *Frontiers in Physics*, vol. 7, pp. 48:1–14, 2019.
- [7] H. Goto, K. Tatsumura, and A. R. Dixon, “Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear hamiltonian systems,” *Science Advances*, vol. 5, no. 4, pp. 1–9, 2019.
- [8] K. Yamamoto, K. Kawamura, K. Ando, N. Mertig, T. Takemoto, M. Yamaoka, H. Teramoto, A. Sakai, S. Takamaeda-Yamazaki, and M. Motomura, “STATICA: A 512-spin 0.25M-weight annealing processor with an all-spin-updates-at-once architecture for combinatorial optimization with complete spin-spin interactions,” *IEEE Journal of Solid-State Circuits*, vol. 56, no. 1, pp. 165–178, 2021.
- [9] M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk *et al.*, “Quantum annealing with manufactured spins,” *Nature*, vol. 473, no. 7346, pp. 194–198, 2011.
- [10] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, “Optimization by simulated annealing,” *Science*, vol. 220, no. 4598, pp. 671–680, 1983.
- [11] K. Ikeda, Y. Nakamura, and T. S. Humble, “Application of quantum annealing to nurse scheduling problem,” *Scientific Reports*, vol. 9, no. 1, pp. 1–10, 2019.
- [12] D. Venturelli, D. Marchand, and G. Rojo, “Job shop scheduling solver based on quantum annealing,” in *Proc. of ICAPS-16 Workshop on Constraint Satisfaction Techniques for Planning and Scheduling (COPLAS)*, 2016, pp. 25–34.
- [13] M. Parizy and N. Togawa, “Analysis and acceleration of the quadratic knapsack problem on an Ising machine,” *IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences*, vol. E104.A, no. 11, pp. 1526–1535, 2021.
- [14] A. Lucas, “Ising formulations of many NP problems,” *Frontiers in Physics*, vol. 2, pp. 1–15, 2014.
- [15] K. Tamura, T. Shirai, H. Katsura, S. Tanaka, and N. Togawa, “Performance comparison of typical binary-integer encodings in an Ising machine,” *IEEE Access*, vol. 9, pp. 81032–81039, 2021.
- [16] A. Caprara, D. Pisinger, and P. Toth, “Exact solution of the quadratic knapsack problem,” *Informatics Journal on Computing*, vol. 11, no. 2, pp. 125–137, 1999.