Vol.2021-QS-4 No.13
2021/10/15

QUBOソルバーによるプリント回路基板の締結点配置設計

松森　唯益[1,a)]　滝　雅人[1]　門脇　正史[1]

概要：
組み合わせ最適化の一つである quadratic unconstrained binary optimization（QUBO）を解くアルゴリズム（QUBO ソルバー）と blackbox 最適化を組合せて、機械構造物の設計を行う。量子アニーリングを始めとする QUBO ソルバーは多数提案されているが、QUBO で定式化できる工学応用は限定的である。この課題を解決するために、近年、blackbox 最適化を使って任意の組合せ最適化問題を QUBO 化する方法が提案された。本稿では、blackbox 最適化に factorization machine を利用する先行研究に基づいて、プリント回路基板の固有振動数の最大化を目的とする締結点配置設計を行う。この設計では、目的関数となる基板の固有振動数が factorization machine で 2 次多項式近似される。数値計算例を通して、この設計法により締結点配置の最適解を求められることや、FM で利用する学習データの追加方法を変更することで最適解が得られやすくなることを示す。

1. はじめに

近年、組み合わせ最適化問題を高速に解くアルゴリズムやハードウェアが盛んに研究されている。組み合わせ最適化問題では、古典コンピュータでは効率的に解くアルゴリズムが発見されていない問題、すなわち、多項式時間内に最適解を導くことが理論的に示されていない（NP 困難）問題がある。このような問題を解くヒューリスティックなアルゴリズムが多数提案されている。量子アニーリング（quantum annealing: QA）[1] は、量子力学を利用してイジングモデルや quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) で表されたコスト関数の基底状態を求める最適化アルゴリズムである。QA は量子コンピュータ [2] を使うことで、組み合わせ数が膨大である大規模な問題で古典コンピュータを上回る性能が期待されている。しかし、現状ではハードウェアが発展途上であるため、QA で解ける問題は限定的である [3,4]。一方、古典コンピュータを使って QUBO を高速に解くアルゴリズムが複数提案されている [5–9]。これらのアルゴリズム（以降、QUBO を解くアルゴリズムを総称して QUBO ソルバーと呼ぶ。）は、FPGA や GPU などの既存のハードウェアを活用して計算の並列化により非常に大規模な問題を扱える特徴がある。

近年、QUBO で表せない最適化問題に blackbox 最適化を利用する方法が提案された [10–13]。Blackbox 最適化では、最適化対象の目的関数や制約関数が陽に記述できない場合に、それらの近似関数を評価値から生成する。先行研究 [10] では、近似関数として factorization machine（FM）、最適化手法として QA を利用する方法（FMQA）が提案され、メタマテリアルの設計が行われた。この設計では、電磁界解析の計算結果を使った目的関数が FM で 2 次関数近似（学習）された。この設計は一般には常微分方程式を制約条件として持つ最適化問題として定式化されるが、blackbox 最適化を用いることで QUBO としての定式化を可能にした。Blackbox 最適化を使った QUBO の定式化では、問題に応じて評価関数を陽に記述する必要がないため、QUBO ソルバーの応用範囲が広がる可能性がある。

本稿では、FMQA を使って車載されるプリント回路基板（printed circuit board: PCB）を対象に固有振動数を最大化する締結点配置設計を行う。PCB は外部から伝わる振動数と基板の固有振動数が一致すると共振が起き、基板上の部品の破損につながる。そのため、PCB の固有振動数（以降、振動数と記す）が高くなるように基板を固定する締結点配置が決定される。振動数は締結点配置を変更するたびに PCB の振動解析をして求められる。振動解析では、PCB を有限要素法で離散化し、固有方程式を解いて、振動数を求める。振動数を求める一連の計算を含めた締結点配置設計を QUBO で定式化することは困難であることから、本稿では、振動解析の結果得られる振動数を FM で二次多項式近似し、QUBO として定式化する。定式化した QUBO を使って PCB の締結点配置設計を行った結果、締結点配置の最適解が求められることを確認するとともに、

1　（株）デンソー
〒 470-0111 愛知県日進市米野木町南山 500-1
a)　tadayoshi.matsumori.j7b@jp.denso.com

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan

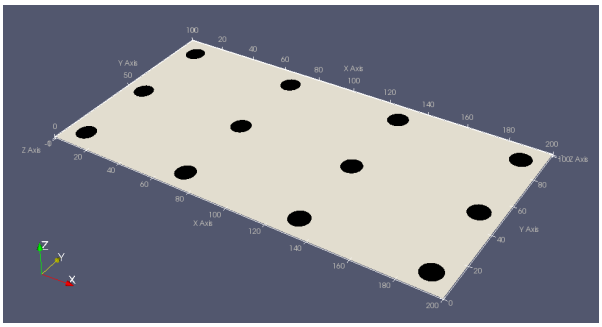


図 1: PCB（100mm×200mm×5mm）の計算モデル。$n = 12$ 個の締結点候補 D_i（黒色で示した半径 5mm の円形領域）が設定される。

学習データの追加方法を工夫することで最適解の得られる確率が高くなることを示す。

2. 方法

2.1 プリント回路基板（PCB）の締結点配置設計

図 1 は設計対象となる PCB の計算モデルである。この計算モデルを有限要素法で離散化し、振動数を求める。離散化にはシェル要素が用いられる。計算モデルには、締結点の候補となる n 個の領域 D_i が予め設定される。D_i 上の締結点の有無は、0-1 変数 $\mathbf{x} \in \{0,1\}^n$ で表される。D_i に締結点が配置されれば $x_i = 1$、そうでなければ $x_i = 0$ とする。締結点が配置される D_i には、計算モデルにおいて変位固定境界条件が設定される。

締結点配置設計は、振動数を最大化する目的関数

$$F(\mathbf{x}) = \omega \tag{1}$$

と、締結点数と振動解析についての制約関数 G_1, G_2 を加えた最適化問題

$$\begin{cases} \underset{\mathbf{x}\in\{0,1\}^n}{\arg\max} & F(\mathbf{x}), \\ \text{subject to} & G_1(\mathbf{x}) = 0, \\ & G_2(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \tag{2}$$

として定義される。目的関数で評価される ω は締結点配置 $\mathbf{x}$ が変更されるたびに、有限要素法に基づく振動解析で求められる。

G_1 は締結点数を制約する関数である。製造コストの観点から締結点数は少ないほうが良い。そこで、締結点数 $\sum_{i=1}^{n} x_i$ の理想値 N を与える制約関数

$$G_1(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i - N \tag{3}$$

が最適化問題に設定される。

G_2 は振動数 ω を計算するための固有方程式である。有限要素法で離散化された基板モデルの運動方程式において、振動数 ω を持つ周期解を仮定するとき、振動数は固有方程式

$$G_2(\mathbf{x}) = \det \left| K(\mathbf{x}) - \omega^2 M(\mathbf{x}) \right| \tag{4}$$

から求められる。ここで、$K, M \in \mathbb{R}^{n_{node}\times n_{node}}$ は剛性マトリクスと質量マトリクス、n_{node} は有限要素の節点数である。M, K の要素値は $\mathbf{x}$ に応じて計算されるため、式 (4) から計算される ω は $\mathbf{x}$ の陰関数となる。したがって、固有方程式やそれを解いて得られる ω を $\mathbf{x}$ で直接表現することは困難である。

2.2 Factorization machine による振動数の近似

先行研究 [10] の方法にしたがって、振動数 ω を factorization machine（FM）で近似し、最適化問題 (2) の QUBO への変換に利用する。ω と固有方程式 (4) を含む最適化問題 (2) は、設計変数 $\mathbf{x}$ を使って QUBO の形式に変換することが困難である。そこで、FM を使って ω が QUBO で利用可能な二次多項式に近似される。FM では、α 個の締結点配置 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_0, \ldots, \mathbf{x}_\alpha\}$ と対応する振動数 $\Omega = \{\omega_0, \ldots, \omega_\alpha\}$ が与えられたときに、Ω を近似する二次多項式 $\mathcal{F}(\mathbf{x})$

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top Q(\kappa)\mathbf{x} \tag{5}$$

の係数 Q が推定（学習）される。ここで κ は FM のハイパーパラメータである。本稿では、先行研究と同じ値 $\kappa = 8$ を利用する。

$\mathcal{F}$ の近似精度を高くするためには、学習に用いるデータ、すなわち、締結点配置とそれに対応する振動数が多数必要である。しかし、ω の計算には一定の時間が必要であるため、一度に多数のデータを用意するには長い計算時間を要する。そこで、まず、既知の締結点配置 $\mathbf{X}$ と振動数 Ω を学習データとして、$Q(\kappa)$ を学習する。次に $Q(\kappa)$ を利用した近似関数 $\mathcal{F}$ を含む QUBO を構築し、その最適解 $\mathbf{x}^*$ を求める。$\mathbf{x}^*$ と対応する ω が、次の学習データとして $\mathbf{X}$ と Ω にそれぞれ加えられ、再度 $Q(\kappa)$ が学習される。この操作を繰り返すことで、近似関数の精度を高めながら、最適解の探索が行われる。本稿では学習に用いるデータ数の上限値を m とし、学習終了時において、振動数 Ω の最大値に対応する締結点配置を最適解とする。

本稿で行う FM の学習では、最適解 $\mathbf{x}^*$ に加えて、その近傍の点 $\boldsymbol{\xi}$ も利用する。学習では、データ数を順次追加するため、計算初期ではデータ数が少ない。一般に、データ数が少ない場合には FM の近似精度は低く、近似関数の最適解と真の最適解は一致しない。このような条件下で最適解のみを学習データとして追加すれば、初期データに依存して局所解しか得られない可能性がある。そこで、我々は、$\mathbf{x}^*$ の要素の値をいくつか反転させた $\mathbf{x}^*$ の近傍解 $\boldsymbol{\xi}$ を定義し、学習ごとに $\mathbf{x}^*$ と $\boldsymbol{\xi}$ を学習データに追加する。

2.3 プリント回路基板の締結点配置設計の QUBO

目的関数の近似関数 $\mathcal{F}(\mathbf{x})$ を使って、最適化問題 (2) を

QUBO に変換する。QUBO は、$\mathcal{F}(\mathbf{x})$ と制約関数 G_1 の線形荷重和

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = -w_F \mathcal{F}(\mathbf{x}) + w_G \left(G_1(\mathbf{x})\right)^2 \tag{6}$$

を最小化する最適化問題

$$\underset{\mathbf{x}\in\{0,1\}^n}{\arg\min} \quad \mathcal{H}(\mathbf{x}), \tag{7}$$

として定義される。w_F と w_G は $\mathcal{F}(\mathbf{x}), (G_1(\mathbf{x}) - N)^2$ の大きさに応じて設定されるべき正のパラメータである。本稿では、$w_F = 0.005, w_G = 1$ とする。

3. 結果

図 1 に示した PCB の計算モデルを対象に、QUBO(7) による締結点配置設計を行った。この問題では、$n = 12$ 個の締結点候補のうち $N = 6$ 個を使うときに、振動数が最大となる締結点配置を決定する。学習データの上限値は、初期条件として用意する 10 のデータを含め、$m = 310$ とした。QUBO ソルバーとして、simulated annealing（SA）、量子アニーリング（QA）とランダムサーチ（RS）を利用した。SA については、FM で利用する学習データとして、最適解だけを追加する場合（SA (1p)）と、最適解に加えてその近傍解を 2 点追加する場合（図 3 の SA と QA）の計算を行った。また、事前に実行可能解を全て計算し、図 2 の締結点配置が最適解であることを確認した。計算モデルの振動解析には有限要素解析ソフトウェア Calculix [14] を利用した。

振動数の平均値は、FM を利用した計算結果（SA、SA(1p)、QA）が RS よりも高かった（図 3a）。SA と QA では、FM の学習データ数の増加とともに、振動数が増加する傾向があり、その傾向はほぼ同じであった。学習データの追加方法が異なる場合（SA、SA(1p)）は、学習データ数が同じであれば、最適解近傍に点を追加する方が高い振動数の締結点配置が得られた。この計算において、最適解が得られた割合は、SA が 95%、SA(1p) が 65%、QA が 100%、RS が 15%であった。したがって、FM を利用したいずれの方法でも最適解は見つかる可能性があるものの、最適解が得られやすいのは最適解の近傍を利用した方法であった。

FM による振動数の近似精度（図 3b）は、学習データの増加とともに高くなった。SA と QA では、学習データが 50 を超えると誤差が急に小さくなり、約 70 以上になると誤差に変化は見られなくなった。SA(1p) は学習データが少ない状態でも誤差が小さくなった。全ての QUBO ソルバーにおいて、誤差の減少が止まっても振動数は改善し続けた。

4. まとめ

本稿では、機械構造物の設計への QUBO ソルバーの応用

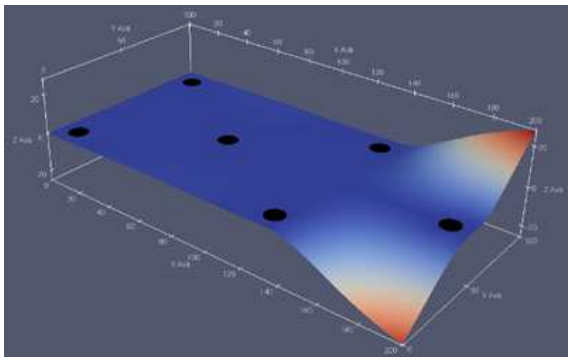
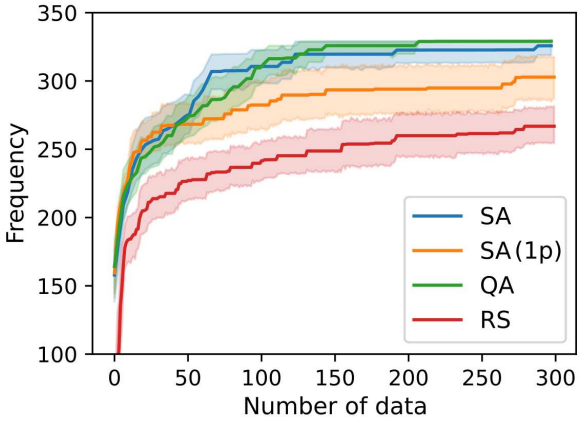
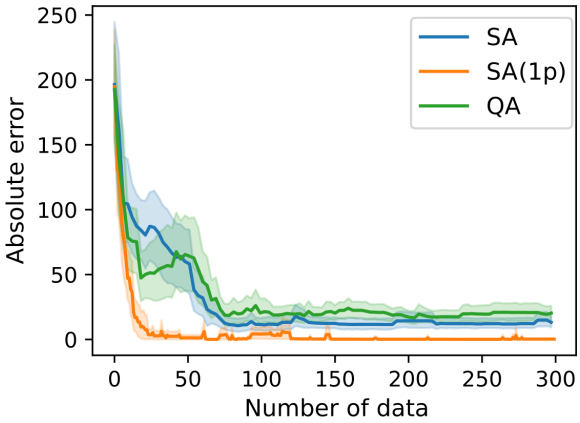


図 2: 最適解の締結点配置（黒色の領域）と変形モード。



(a) 最良解の振動数 ω



(b) FM の近似値 $\mathcal{F}$ と真値 ω の絶対誤差

図 3: 初期データを 20 回変更して最適化計算した結果の平均値（実線）と 95%の信頼区間（色付けした領域）。横軸は学習に利用したデータ数であり、SA は simulated annealing、QA は量子アニーリング、RS はランダムサーチを表す。SA(1p) は学習時に追加するデータ数を 1 点とした結果である。

として、blackbox 最適化を使ってプリント回路基板（PCB）の固有振動数を最大化する締結点配置設計を行った。この設計では、factorization machine（FM）で固有振動数を近似することで、QUBO への定式化を可能にする。定式化し

た QUBO を使って PCB の締結点配置設計を行った結果、QUBO ソルバーの種類によらず最適解が得られたが、最適解が得られる確率は異なった。特に、FM で用いる学習データに最適解だけでなく最適解近傍を加えることで最適解が得られやすくなった。最適解だけを学習データに追加した場合には得られた振動数が低くなったことから、最適解近傍を学習データに加えることが局所解への収束を回避することに有効であったと考えられる。一方、FM の固有振動数の近似誤差は、学習データを最適解のみにした場合には学習データが少なくても小さくなったのに対して、最適解近傍の解を加えた場合には学習データが多くなっても小さくならなかった。FM では近似関数として 2 次多項式が用いられているため、より高次の多項式で表されるような評価関数は正確に近似できない。このような状況は、近似すべきデータの範囲が広くなるほど、現れやすくなると推測される。したがって、今回の計算結果から、最適解のみを学習データに追加した場合には、局所解周辺の締結点配置の振動数のみを近似することになったために、2 次多項式で近似できたのに対して、最適解近傍を学習データに追加した場合には、より広い範囲の振動数を近似する必要があったために、学習データを増やしても近似精度が向上しなかったと考えられる。今後は学習データの追加方法について考察を深めるとともに、組み合わせ数の多い問題に適用して提案手法の有用性を確認する予定である。

参考文献

[1] Kadowaki, T. and Nishimori, H.: Quantum annealing in the transverse Ising model, *Physical Review E*, Vol. 58, No. 5, p. 5355 (1998).

[2] Johnson, M. W., Amin, M. H., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A. J., Johansson, J., Bunyk, P. et al.: Quantum annealing with manufactured spins, *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198 (2011).

[3] 大関真之：量子アニーリングによる組合せ最適化，オペレーションズ・リサーチ，p. 326 (2018).

[4] Ohzeki, M., Miki, A., Miyama, M. J. and Terabe, M.: Control of automated guided vehicles without collision by quantum annealer and digital devices, *Frontiers in Computer Science*, Vol. 1, p. 9 (2019).

[5] Tsukamoto, S., Takatsu, M., Matsubara, S. and Tamura, H.: An accelerator architecture for combinatorial optimization problems, *Fujitsu Sci. Tech. J*, Vol. 53, No. 5, pp. 8–13 (2017).

[6] Goto, H., Tatsumura, K. and Dixon, A. R.: Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems, *Science advances*, Vol. 5, No. 4, p. eaav2372 (2019).

[7] 山岡雅直：CMOS アニーリングマシンの概要，電子情報通信学会論文誌 C，Vol. 103, No. 9, pp. 380–386 (2020).

[8] Inagaki, T., Haribara, Y., Igarashi, K., Sonobe, T., Tamate, S., Honjo, T., Marandi, A., McMahon, P. L., Umeki, T., Enbutsu, K. et al.: A coherent Ising machine for 2000-node optimization problems, *Science*, Vol. 354, No. 6312, pp. 603–606 (2016).

[9] 松田佳希：イジングマシンにおける共通ソフトウェア基盤開発，*IEICE Conferences Archives*, The Institute of Electronics, Information and Communication Engineers (2020).

[10] Kitai, K., Guo, J., Ju, S., Tanaka, S., Tsuda, K., Shiomi, J. and Tamura, R.: Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines, *Physical Review Research*, Vol. 2, No. 1, p. 013319 (2020).

[11] Wilson, B. A., Kudyshev, Z. A., Kildishev, A. V., Kais, S., Shalaev, V. M. and Boltasseva, A.: Machine Learning Framework for Quantum Sampling of Highly-Constrained, Continuous Optimization Problems, *arXiv preprint arXiv:2105.02396* (2021).

[12] Izawa, S., Kitai, K., Tanaka, S., Tamura, R. and Tsuda, K.: Continuous black-box optimization with quantum annealing and random subspace coding, *arXiv preprint arXiv:2104.14778* (2021).

[13] Koshikawa, A. S., Ohzeki, M., Kadowaki, T. and Tanaka, K.: Benchmark test of Black-box optimization using D-Wave quantum annealer, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 90, No. 6, p. 064001 (2021).

[14] Wittig, K.: CalculiX USER’S MANUAL-CalculiX GraphiX, Version 2.17. 1 (2020).

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan