

量子コンピュータ時代のプログラミングセミナー

～ ブラックボックス最適化を活用した材料探索 ～



本日の予定

第一部

- 本セミナーのゴール
- 会社紹介
- Fixstars Amplify の紹介
- 組合せ最適化事例
- ワークショップ事前準備

第二部

- 組合せ最適化の基本
 - 数の分割ハンズオン

第三部

- ブラックボックス最適化とは
- FMQAの概要とフロー
- FMQAによる材料探索ハンズオン
 - 問題の説明
 - FM
 - FMQA
- Amplify-BBOpt
- まとめ

質問は随時 Zoom の Q&A へお願いします

本セミナーのゴール

組合せ最適化に関する次の項目を実感していただく

- 身の回りに組合せ最適化問題は多い。一方で、複雑で非線形な物理・社会現象の場合、組合せ最適化に必要な定式化が困難なものもある。
- 機械学習と量子アニーリング・イジングマシンを活用するブラックボックス最適化により、複雑現象に対する最適化を実施可能。
- ブラックボックス最適化を Fixstars Amplify により実施できる。

質問は随時ZoomのQ&Aへお願いします

会社紹介

フィックスターズグループの基本情報

会社名	株式会社フィックスターズ
本社所在地	東京都港区芝浦3-1-1 msb Tamachi 田町ステーションタワーN 28階
設立	2002年8月
上場区分	東証プライム（証券コード：3687）
代表取締役社長	三木 聡

資本金	5億5,446万円
社員数（連結）	292名（2023年9月現在）
主なお客様	キオクシア株式会社 ルネサスエレクトロニクス株式会社 トヨタグループ（トヨタ自動車株式会社・ 豊田通商株式会社・株式会社デンソー） みずほ証券株式会社 キヤノン株式会社

グループ会社

Fixstars Solutions, Inc.

完全子会社
米国での営業及び開発を担当

(株) Fixstars Autonomous Technologies

株式会社ネクスティ エレクトロニクスとのJV
自動運転向けソフトウェアを開発

(株) Fixstars Amplify

完全子会社
量子コンピューティングのクラウド事業を運営

2021/10/1 設立

(株) Sider

完全子会社
開発支援SaaS「Sider」を運営

(株) Smart Opinion

連結子会社
乳がんAI画像診断支援事業を運営

オスカーテクノロジー (株)

連結子会社
ソフトウェア自動並列化サービスを提供

フィックスターズの量子技術への取り組み

次世代技術を先取りし
今ある課題の解決を目指す

2018年

NEDOのプロジェクトに採択
「イジングマシン共通ソフトウェア
基盤の研究開発」

2017年

日本で初めて
D-Wave Systems社と提携

2019年

SIPの研究開発に参画
「光・量子を活用したSociety 5.0実現化技術：
光電子情報処理」

2021年

2月：量子アニーリングクラウドサービス「**Fixstars Amplify**」提供開始
10月：株式会社 Fixstars Amplify 設立
11月：Q-STAR 量子技術による新産業創出協議会に特別会員として加入

2022年

5月：Fixstars Amplify がGurobi, IBM-Quantumをサポート
6月：東洋経済主催シンポジウム「ビジネスを劇的に変える量子コンピューティングの可能性」に登壇
7月：累計実行回数1,000万回突破

量子技術とFixstars Amplify

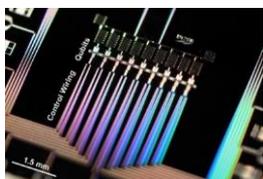
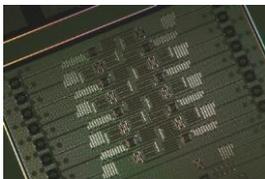
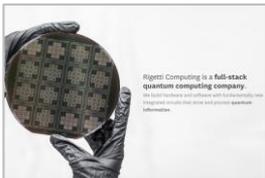
量子技術とFixstars Amplifyの対応領域

1. 量子コンピュータ

量子ゲート方式

古典汎用コンピュータの上位互換。
量子力学の重ね合わせ状態を制御する量子ゲートを操作し、特定の問題を汎用的かつ高速に処理する。

QAOAにより**組合せ最適化問題 (QUBO)**を取り扱うことが可能。



1
量子コンピュータ

IBM/Google/Rigetti/IonQ

2
量子
アニーリング

D-Wave/NEC

3
イジングマシン

富士通/日立/東芝/Fixstars

3. イジングマシン

二値二次多項式模型

二次の多変数多項式で表される目的関数の**組合せ最適化問題 (QUBO)**を扱う専用マシン。

変数は0,1または ± 1 。統計物理学におけるイジング模型（磁性体の性質を表す模型）に由来。様々な実装により実現されている。



Amplify AE

2. 量子アニーリング方式

量子焼きなまし法

イジングマシンの一種であり、量子焼きなまし法の原理に基づいて動作する。量子イジング模型を物理的に搭載したプロセッサで実現する。自然計算により低エネルギー状態が出力される。**組合せ最適化問題 (QUBO)**を扱う専用マシン。

組合せ最適化問題 (QUBO)

数理最適化問題

- 連続最適化問題
 - ・ 決定変数が連続値 (実数など)
- 決定変数が離散値 (整数など)
 - ・ 整数計画問題 (決定変数が整数)
 - ・ 0-1整数計画問題 (決定変数が二値)

QUBO目的関数 (0-1整数二次計画問題)

$$f(\mathbf{q}) = \sum_{i < j} Q_{ij} q_i q_j + \sum_i Q_{ii} q_i$$

f: 目的関数

q: 決定変数

Q: 係数

量子アニーリング・イジングマシン

Q uadratic	二次形
U nconstrained	制約条件なし
B inary	0-1整数 (二値)
O ptimization	計画 (最適化)



$f(\mathbf{q})$ を最小化するような \mathbf{q} を求める



クラウドサービス : **Fixstars Amplify**

組合せ最適化の具体例

- お遍路巡り最短経路問題
 - どの順序でお寺を巡ると最短経路でお遍路を達成できるか？
- 以下のような決定変数行列 q (88x88) を定義
 - お寺 i を j 番目に巡る場合のみ、 $q_{i,j} = 1$
- 定式化
 - q とお寺間の距離を用いて、巡回距離 $f(q)$ を定式化
$$f(q) = \sum \sum \sum d_{i,j} q_{n,i} q_{n+1,j} \dots$$
- 求解 (アニーリング)
 - $f(q)$ が最小となる q の要素の組合せを求解

q	1 番目	2 番目	3 番目	...	88 番目
お寺 1	0	1	0	...	0
お寺 2	1	0	0	...	0
お寺 3	0	0	1	...	0
...
お寺 88	0	0	0	...	1

求解後の q の例

Fixstars Amplify とは

- いつでも **開発環境** と **実行環境** がセット
すぐにアプリ開発と実行が出来る
- 誰でも ハードウェアや専門的な知識が不要
無料で開発がスタート可能
多くの解説、サンプルコード
- 高速に 26万ビットクラスの大規模問題の
高速処理と高速実行が可能
- あらゆる 一般に公開されている全てのイジング
マシンを利用可能

Japanese お問い合わせ

デモ&チュートリアル 製品紹介 リソース セミナー お客様事例 会社紹介 スケジュール最適化

NEWS Amplify SDKバージョン1.0をリリースしました →

利用可能なすべての量子アニーリング・イジングマシン、数値最適化ソルバー
ゲート式量子コンピュータに対応した

量子コンピューティング プラットフォーム

```
$ pip install amplify
```

無料でアクセストークン入手

ドキュメントを見る →

- シンプルで効率的なアプリ開発**
複雑で専門性の高いプロセスを自動化し、
効率的にイジングマシンを使うための学習
コストを圧倒的に低くします。
- PoCから実問題まで**
大規模問題の入力と高速実行が可能で、
PoCや実問題を視野に入れたアプリケー
ション開発が行えます。
- 様々なマシン・ソルバーに対応**
利用可能なすべての量子アニーリング・イ
ジングマシンや数値最適化ソルバー、ゲ
ート式量子コンピュータの組合せ最適化を解
くアルゴリズムなど幅広くサポートしてい
ます。
- すぐに開発をスタート**
開発環境と実行環境がセットで提供される
ため、すぐに始めることができます。

Fixstars Amplify の対応マシンの一例

<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>標準マシン</p> <p>フィックスターズ Amplify Annealing Engine</p>	<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>標準マシン</p> <p>D-Wave Systems 2000Q / Advantage</p>	<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>標準マシン</p> <p>東芝 デジタルソリューションズ SQBM+</p>	<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>標準マシン</p> <p>NEC Vector Annealing</p>
<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>富士通 デジタルアニーラ</p>	<p>量子アニーリング・イジングマシン</p>  <p>日立製作所 CMOSアニーリングマシン</p>	<p>数値最適化ソルバー</p>  <p>Gurobi Gurobi Optimizer</p>	<p>ゲート式量子コンピュータ</p>  <p>IBM IBM Quantum</p>
<p>量子回路シミュレータ</p>  <p>Qulacs Qulacs</p>	<p>様々なソルバーも 順次追加予定！</p>		

標準マシン は、

- ベンダ各社と個別マシン利用契約なし、
 - 評価・検証用ベーシックプランなら無料、
- で利用可能！ ←「いつでも」、「誰でも」

今後も幅広い対応マシンの追加が続々と行われる予定です！ ←「あらゆる」

Fixstars Amplify の内容と特徴

- 開発環境 : Amplify SDK
- 実行環境 : Amplify Annealing Engine (AE)

開発環境 : Fixstars Amplify SDK

Fixstars Amplify SDK なら最適化アプリ開発のプログラミングが圧倒的に短縮されます

通常のプログラミング

1. 課題を定式化

マシンのSDKやAPI仕様に合わせて物理モデルをデータ化

2. 論理モデルへ変換

目的関数をマシンの動作モデルで再定義

3. 物理モデルへ変換

マシン仕様や制約を考慮した物理モデルに再変換

4. マシンにデータを入力

マシンのSDKやAPI仕様に合わせて物理モデルをデータ化

5. マシンを実行

特定マシンのみで実行可能

Fixstars Amplifyを用いたプログラミング

1. 課題を定式化

定式化された数式をプログラムコードで表現

SDKが提供するAPIが、自動で各マシンに合った形式へ多段変換をして入力。実行結果は逆変換をして、ユーザーにとって結果の解釈が容易な形式で返却されます。

2. マシンを実行

複数マシンの中から選択可能

開発環境インストール

```
$ pip install amplify
```

最適化コード例

```
1 from amplify import VariableGenerator, FixstarsClient, solve
2
3 # 入力モデルの構築
4 q = VariableGenerator().array("Binary", 2)
5 f = 1 - q[0] * q[1]
6
7 # 実行マシンの設定
8 client = FixstarsClient()
9 client.parameters.timeout = 1000
10
11 # アニーリングの実行
12 result = solve(f, client)
13
14 # 結果の解釈
15 solution = q.evaluate(result.best.values)
16
17 print(f"result: {q} = {solution}")
18 # result: [q_0, q_1] = [1. 1.]
```

実行環境 : Fixstars Amplify Annealing Engine (AE)

NVIDIA GPU V100/A100 で動作

- 独自の並列化シミュレーテッドアニーリングアルゴリズム

WEB経由で計算機能を提供

- 社会実装・PoC・検証が加速
- Amplify SDK の実装を直ぐに実行可能

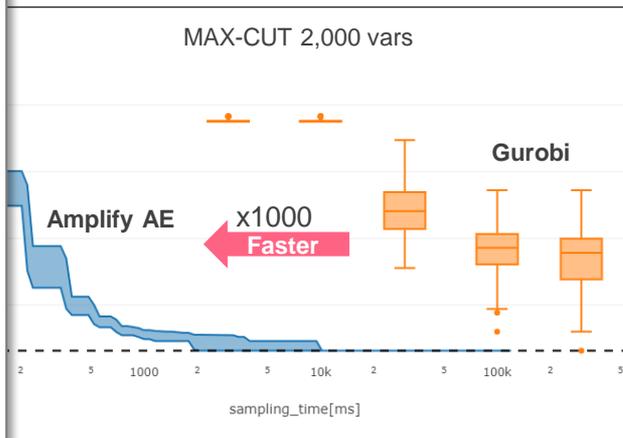
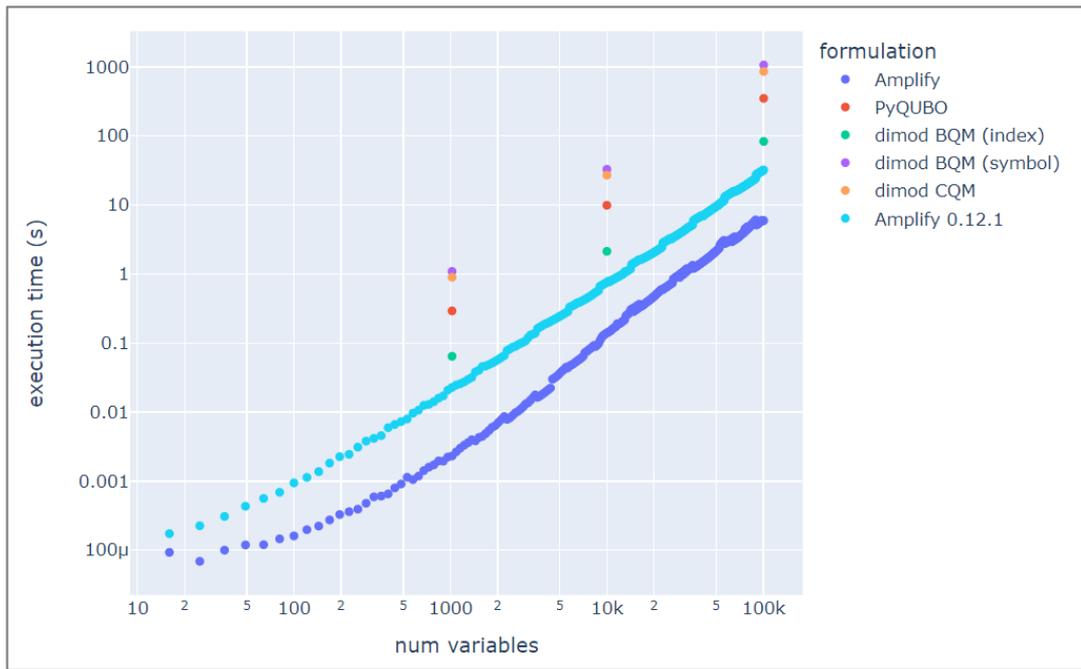
商用マシンでは最大規模・最高速レベル

- 120,000 ビット (全結合)
- 260,000 ビット超 (疎結合)

	標準マシン Fixstars Amplify AE	標準マシン D-Wave 2000Q/Advantage	標準マシン 東芝 SQBM+	日立 CMOS Annealing	富士通 Digital Annealer
装置型式	GPU	量子回路	GPU	デジタル回路	デジタル回路
最大ビット数	<u>262,144以上</u>	2,048 (16x16x8)/ 5,760 (16x15x24)	100,000 (SQBM+)/ 10,000 (SBM PoC 版)	61,952 (352x176)	8,192 (DA2)/ 100,000 (DA3)
係数パラメータ	デジタル (32/64bit)	アナログ (5bit程度)	デジタル (32bit)	デジタル (3bit)	デジタル (16/64 bit)
結合グラフ	全結合	キメラグラフ/ ペガサスグラフ	全結合	キンググラフ	全結合
全結合換算ビット 数	131,072	64/124	31,000程度 (SQBM+) ^(*) / 1,000 (SBM PoC 版)	176	8,192 (DA2)/ 100,000 (DA3)
APIエンドポイント	Fixstars Amplify	D-Wave Leap	Fixstars Amplify / AWS	Annealing Cloud Web	DA Cloud

Fixstars Amplify SDK/AE パフォーマンス

Fixstars Amplify は最速レベルの定式化・求解速度を達成しています ←「高速に」



AE 求解性能・速度

オンラインデモ & チュートリアル

Amplify デモ

検索

<https://amplify.fixstars.com/ja/demo>



デモアプリケーション

ピクロスパズルの求解

プログラミング難易度 ★★★★★
複雑な定式化の例として、数字で与えられるヒントを元に数字を塗り、絵を完成させるパズルゲーム、ピクロスを解くアプリケーションを開発します。

デモアプリ サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (1)

プログラミング難易度 ★★★★★
複雑で未知な目的関数にも適用可能な、機械学習と組み合わせ最適化を組み合わせたブラックボックス最適化手法を紹介し、Amplifyを用いて実装します。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (2)

プログラミング難易度 ★★★★★
機械学習と量子アニーリング・インジマンを活用するブラックボックス最適化の適用例として、発光性高圧誘電体を実現する材料探索を取り扱います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (3)

プログラミング難易度 ★★★★★
化学プラントにおける生産量を最大化するための運転条件最適化を行います。最適化には、機械学習モデルに基づくブラックボックス最適化と流体シミュレーションを用い、真の最適化を最大化するように異型の探索を行います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (4)

プログラミング難易度 ★★★★★
流体機器設計に不可欠な異型の最適化問題を取り上げます。最適化には、組み合わせ最適化と機械学習に基づくブラックボックス最適化と流体シミュレーションを用い、真の最適化を最大化するように異型の探索を行います。

サンプルコード



デモアプリケーション

容量制約つき運搬経路問題 (CVRP)

プログラミング難易度 ★★★★★
運送業における効率的な配達計画の策定やごみ回収や道路清掃における巡回順序の最適化等での応用が期待される容量制約つき運搬経路問題 (CVRP) を取り扱います。

デモアプリ サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (5)

プログラミング難易度 ★★★★★
ブラックボックス最適化により、高度発展による交通集中が生じる都市における第一別と変化する交通状況に反応し、組合せ最適化を用いてリアルタイムに信号機の最適制御を実施します。最適化の実施及び実証には、マルチ・エージェント・シミュレーションによる交通シミュレーションを用います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

定式化による交通信号機の最適化

プログラミング難易度 ★★★★★
都市における渋滞を最小化するために、第一別と変化する交通状況に反応し、組合せ最適化を用いてリアルタイムに信号機の最適制御を実施します。また、その様な信号機制御を実施した際の都市の交通量をシミュレーションします。

サンプルコード



チュートリアル応用編

10. 整数長ジョブスケジューリング問題

プログラミング難易度 ★★★★★
あらかじめ決まった数のジョブとマシンがあり、それぞれのジョブにかかる時間が分かっているとする。それぞれのジョブをいくつかのマシンに割り当てます。ジョブスケジューリング問題では、最も早く全ジョブが完了するような割り当て方を求めます。

サンプルコード



チュートリアル基礎編

画像のノイズ除去

プログラミング難易度 ★★★★★
画像のノイズ除去を行うアプリケーションを開発します。

サンプルコード



チュートリアル応用編

会議室割当問題

プログラミング難易度 ★★★★★
制約条件を用いて定式化するアプリケーションの例として会議室割当問題のアプリケーションを開発します。

サンプルコード

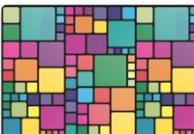


チュートリアル応用編

タクシーマッチング問題

プログラミング難易度 ★★★★★
目的関数と制約条件を用いて定式化するアプリケーションの例としてタクシーマッチング問題のアプリケーションを開発します。

サンプルコード



デモアプリケーション

グラフ彩色問題

Fixstars Amplifyによる、グラフ彩色問題の定式化を体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

巡回セールスマン問題

Fixstars Amplifyによる、巡回セールスマン問題の定式化を体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

数独

Fixstars Amplifyによる、数独の定式化を体験します。

デモアプリ サンプルコード

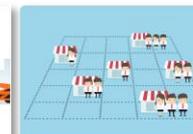


デモアプリケーション

ライドシェア

集合型ライドシェアの最適化アプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

タスク割当問題

店舗とタスクに従業員を割り当てる組合せ最適化問題のアプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

ポートフォリオ最適化

リスクとリターンを考慮した株式ポートフォリオの最適化アプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード

様々な分野で利用が拡大しています



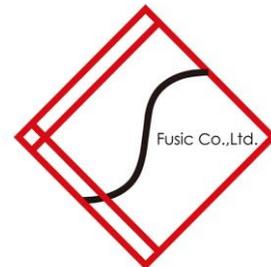
NTT DATA



住友商事株式会社



登録社・組織数: 約700



累計実行回数: 4,500万回超



Fixstars Amplify ユーザー様インタビュー

Amplify インタビュー 検索

amplify.fixstars.com/ja/customers/interview

・ 業務・研究開発利用



パートナー事例 2022年10月

通販向け物流倉庫の人員最適配置自動作成サービス
住友商事株式会社と、物流倉庫での実運用を開始



ユーザーインタビュー 2023年6月

住友商事株式会社
現場で愛されて育つ、量子コンピュータ技術活用



ユーザーインタビュー 2023年11月

食品製造業A社
従業員が納得する最適な人員シフトを実現



ユーザーインタビュー 2023年8月

東京大学
ブラックボックス最適化手法 (FMQA) の開発に成功



有識者インタビュー 2023年2月

慶應義塾大学
量子コンピュータの活用を促進する「量子パイリンガル」というキャリアデザイン



ユーザーインタビュー 2023年5月

株式会社野村総合研究所
量子コンピュータの有効活用による最適化ソリューション「Fiboat」の価値向上



ユーザーインタビュー 2023年11月

株式会社アパールデータ
生産計画の属人化解消と設備投資計画への活用を目指して



ユーザーインタビュー 2023年11月

株式会社タアフ
多品種少量生産の工程にマッチした生産計画アプリを開発



ユーザーインタビュー 2022年11月

慶應義塾大学
Fixstars Amplifyを使って、次世代技術を活用した高速な解析手法の開発に成功



ユーザーインタビュー 2023年4月

早稲田大学
情報工学領域で進む量子コンピュータ・イジングマシンの活用

Fixstars Amplify を活用した研究事例

	大学	研究室	論文タイトル
量子アニーリング/イジングマシンに関する研究	早稲田大学	戸川研究室	イジングマシンによる制約付きグラフ彩色問題の彩色数最小化手法 (リンク)
	東京大学	Prof. Codognet	Modeling the Costas Array Problem in QUBO for Quantum Annealing (リンク)
	名古屋大学	片桐研究室	Amplifyを用いたCMOSアニーリングマシンの特性の分析 (リンク)
	東北大学	小松研究室	組み合わせクラスタリングによるアニーリングマシンの評価 (リンク)
応用研究	慶應大学	村松研究室 (材料工学)	Phase-fieldモデルの量子アニーリングシミュレータ (リンク)
	東京大学	長谷川研究室 (量子ゲート)	ISAAQ:イジングマシンを活用した量子コンパイラ (リンク)
	山梨大学	鈴木研究室 (情報工学)	量子アニーリングによる疎行列直接解法向けフィルイン削減オーダリング (リンク)
	東京大学	津田研究室 (MI)	Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines (リンク)
	京都大学	野田研究室 (電子工学)	量子アニーリングを活用したフォトニック結晶レーザーの構造最適化 (リンク)
	東京大学	津田研究室 (MI)	Chemical Design with GPU-based Ising Machines (リンク)

Fixstars Amplify ご利用プラン

料金のご紹介

<https://amplify.fixstars.com/ja/pricing>

	ベーシック 評価・検証用の無料プラン	スタンダード 実用レベルの計算環境	プレミアム 高性能な計算環境	Sプレミアム 最高性能の計算環境
	使い始める	見積りを依頼	見積りを依頼	見積りを依頼
利用料金	無料	月額10万円 (1名) (税込11万円) 月額20万円 (最大5名) (税込22万円)	月額20万円 (1名) (税込22万円) 月額60万円 (最大5名) (税込66万円)	月額30万円 (1名) (税込33万円) 月額90万円 (最大5名) (税込99万円)
計算環境 ⁺	スモール	ミディアム	ラージ	スーパーラージ
D-Waveマシンの無料実行	3分/月	3分/月 [!]	3分/月 [!]	3分/月 [!]
SQBM+オプション [!]	無料	月額30万円 (1名) (税込33万円) 月額90万円 (最大5名) (税込99万円)	月額30万円 (1名) (税込33万円) 月額90万円 (最大5名) (税込99万円)	月額30万円 (1名) (税込33万円) 月額90万円 (最大5名) (税込99万円)
サポート ⁺	ベーシック	スタンダード	プレミアム	プレミアム
評価・検証フェーズでの利用	✓	✓	✓	✓
実運用フェーズでの利用		✓	✓	✓

開発支援サービス(個別見積り)

コンサル・システム開発等
数百万円～数千万円



月額利用料
百万円～

定式化や実装を
手厚く
支援します！

セミナー・トレーニングのご紹介

<https://amplify.fixstars.com/ja/news/seminar>

お客様の実際の課題解決をご支援するために、**無料セミナー**や**有償トレーニング**を提供しています。

無料セミナー・ワークショップ

ビジネス向け、エンジニア向けに分けて開催しています！

ビジネス向け

製造業向け量子コンピュータ時代のDXセミナー 見える化、予測・分析、その先の最適化へ

組合せ最適化問題や量子アニーリング・イジングマシンの概要をご紹介したのち、製造業における組合せ最適化を活用したDX推進の一例として、生産計画最適化や生産ラインのシフト最適化などの事例とデモをご紹介いたします。「Fixstars Amplify」を通じて量子アニーリング・イジングマシンを活用することで、どのようなビジネス上の効果が期待できるのかを感じていただきたいと思います。

エンジニア向け

製造業向け量子コンピュータ時代のDXセミナー 最適化の中身を覗いてみよう

製造業における組合せ最適化を活用したDX推進の一例として、生産計画最適化、勤務シフト最適化などの事例を用いて、問題設定の考え方、目的関数や制約条件の定式化、実装のポイントなどを実際のコードを見ながら解説します。また、サンプルコードを用いて、ご自身の環境で実際に量子アニーリング・イジングマシンを動かす体験をしていただけます。

企業向けプライベートトレーニング

お客様が抱える実際の課題やデータを使った**カスタムメイド**のトレーニングです！

全4回のレクチャーとお客様に実施いただく「課題」を含む約1.5か月のコースです。コースの前半では、量子アニーリング・イジングマシン専用の開発／実行環境であるFixstars Amplifyを用いてPython言語による組合せ最適化アプリケーション開発方法を学びます。後半では、お客様が抱える実際の課題やデータを使ったトレーニングを実施します。量子アニーリング・イジングマシンを使って実課題の解決に取り組んでみたい方に最適なコースです。

第1回
3時間

…
1週間

第2回
3時間

課題
2週間

第3回
1.5時間

…
2週間

第4回
1.5時間

ワークショップ

事前準備（事前メールの内容）

ワークショップの事前準備 (1)

- 【事前メールに記載】ご自身のPC (ブラウザ上) で Python プログラミングを行います。Google Colaboratory を使うので、事前にログイン出来ることを確認をお願いします (要 Google アカウント)

Google Colab 検索

<https://colab.research.google.com/>

- 【事前メールに記載】 Fixstars Amplify ホームページよりユーザ登録の上、無料トークンの取得をお願いします (1分で終わります)

Fixstars Amplify 検索

<https://amplify.fixstars.com/>



質問は随時ZoomのQ&Aへお願いします



ワークショップの事前準備 (2)

【事前メールに記載】

- 取得されたトークンを用いて、トークンチェック用サンプルコードが動くか確認をお願いします。

https://colab.research.google.com/drive/1bg2Ql3McJck_Sto8uvxtmPUMWtRFhf7a (※URLはZoomのチャット欄を参照)

- サンプルコードは閲覧のみ可能な状態です。「ファイル」→「ドライブにコピーを保存」の上、ご自身のトークンを入力してください。その後、Shift + Enterで実行下さい。

```
! pip install amplify
```

```
token = "AE/*****" # ご自身のトークンを入力
```

- ご自身のトークン番号は、Amplifyウェブページ → よりご確認いただけます。
- 実行後、以下の結果が出力されればOKです。

```
result: [q_0, q_1] = [1. 1.] (f = 0.0)
```



ワークショップ^o

通常の組合せ最適化

(ブラックボックス最適化への導入)

サンプルコード

サンプルコードを開き、「ファイル」→「ドライブにコピー」の上、**トークンを入力**し実行して下さい。

- 数の分割サンプルコード

<https://colab.research.google.com/drive/1bl6BGPwnpd3N0AveoDMGb8egprEdQMqU>

(※URLはZoomのチャット欄を参照)

質問は随時 Zoom の Q&A へお願いします

数の分割問題（概要）

- 与えられた n 個の整数 a_0, \dots, a_{n-1} を二つの集合に分ける。
集合内の数の和が、もう一方の集合内の数の和と等しくなることができるか？
 - NP完全問題: とても難しい問題として知られている → 全通り試すしか方法は無い
 - 問題のバリエーション
 - 判定問題: 完全に等しく出来るか？または等しい組合せは何か？
 - 最適化問題: 完全に等しいか、または最も惜しい組合せは何か？



数の分割問題（具体例と解法の方針）

具体例

{2, 10, 3, 8, 5, 7, 9, 5, 3, 2} の10個の数の完璧な分割は見つけられるか？

答え

- 存在する
 - {2, 3, 5, 7, 10} と {2, 3, 5, 8, 9}
 - どちらも和は 27
- 分割方法は 23 通り存在する (対称を除く)

どうやって解くか？

• ひとつの『数』がどちらの集合に分割されるか全通り試す → $2^{10} = 1024$ 通り

• 効率のよい厳密な方法は知られていない・・・ (もし発見されたら大騒ぎ)



数の分割問題（定式化）

最適化問題：数の分割において最も惜しい組合せは何か？

- 目的関数

{集合1の和} - {集合2の和} の絶対値を最小化

- 決定変数

数 a_i がどちらの集合に属するかを s_i で表す

- $a_i = \{ 2, 10, 3, 8, 5, 7, 9, 5, 3, 2 \}$

- $s_i = \{-1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1, 1, 1\}$

数理モデル

- 目的関数

$$f = \left| \sum_{i=0}^{N-1} s_i a_i \right| \quad (s_i \in \{-1, +1\})$$

$\sum s_i a_i$ は、自然と
{『1』の集合の和} - {『-1』の集合の和}
となる！

数の分割問題（バイナリへの式変形）

- 0-1整数二次計画問題への変換
 - Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) 式

$$f = \left| \sum_{i=0}^{N-1} s_i a_i \right| \quad (s_i \in \{-1, +1\})$$

$\sum s_i a_i$ は、自然と
{『1』の集合の和} - {『-1』の集合の和}
となる！

$$\rightarrow \left(\sum_{i=0}^{N-1} s_i a_i \right)^2 \quad (s_i \in \{-1, +1\})$$

絶対値を二次式で表す

$$\rightarrow \left(\sum_{i=0}^{N-1} (2q_i - 1) a_i \right)^2 \quad (q_i \in \{0, +1\})$$

± 1 をバイナリで表す

数の分割問題（定式化の具体例）

問題

- $a_i = \{2, 10, 3, 8, 5, 7, 9, 5, 3, 2\}$ の10個の数の完璧な分割は見つけれられるか？

決定変数

- $q_i = \{q_0, q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6, q_7, q_8, q_9\} (q_i \in \{0, 1\})$ で集合0又は集合1、どちらに所属するかを表す

目的関数

$$f = \left(\sum_{i=1}^N (2q_i - 1)a_i \right)^2$$

目的関数を展開

$$f = \left(\begin{array}{l} 2(2q_0 - 1) + 10(2q_1 - 1) + 3(2q_2 - 1) + 8(2q_3 - 1) + 5(2q_4 - 1) \\ + 7(2q_5 - 1) + 9(2q_6 - 1) + 5(2q_7 - 1) + 3(2q_8 - 1) + 2(2q_9 - 1) \end{array} \right)^2$$

数の分割問題（プログラムコード）

- 問題の定義と決定変数生成器による決定変数の生成

```
a = [2, 10, 3, 8, 5, 7, 9, 5, 3, 2]
q = amplify.VariableGenerator().array("Binary", len(a))
```

1. 定式化

- 目的関数、 $f = (\sum_{i=1}^N (2q_i - 1)a_i)^2$ 、の定式化（①②③は同等）

① `f = ((2 * q - 1) * a).sum() ** 2`

② `f = 0`
`for i in range(len(a)):`
 `f += (2 * q[i] - 1) * a[i]`
`f **= 2`

③ `f = amplify.sum((2 * q - 1) * a) ** 2`

色々な書き方が出来る

2. 実行

```
result = amplify.solve(f, client)
```

得られた目的関数の値0

各集合の合計値27

3. 結果

```
q = [1, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0], f = 0.0, w = 27
```

各数字に対して、集合0か、集合1か

オンラインデモ & チュートリアル

Amplify デモ

検索

<https://amplify.fixstars.com/ja/demo>



デモアプリケーション

ビクロスパズルの求解

プログラミング難易度 ★★★★★
複雑な定式化の例として、数字で与えられるヒントを元にマスを塗り、絵を完成させるパズルゲーム、ビクロスを解くアプリケーションを開発します。

デモアプリ サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (1)

プログラミング難易度 ★★★★★
複雑で未知な目的関数にも適用可能な、機械学習と組み合わせ最適化を組み合わせたブラックボックス最適化手法を紹介し、Amplifyを用いて実装します。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (2)

プログラミング難易度 ★★★★★
機械学習と量子アニーリング・イジングマンを適用するブラックボックス最適化の適用例として、磁気炉の高温超伝導を実現する材料探索を取り扱います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (3)

プログラミング難易度 ★★★★★
化学プラントにおける生産量を最大化するための運転条件最適化を行います。最適化には、機械学習モデルに基づくブラックボックス最適化と流体シミュレーションを用い、真の最適化に関する物理シミュレーションを用います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (4)

プログラミング難易度 ★★★★★
流体機器設計に不可欠な翼型の最適化問題を取り上げます。最適化には、組み合わせ最適化と機械学習に基づくブラックボックス最適化と流体シミュレーションを用い、翼の揚抗比を最大化するように翼型の探索を行います。

サンプルコード



デモアプリケーション

容量制約つき運搬経路問題 (CVRP)

プログラミング難易度 ★★★★★
運送業における効率的な配達計画の策定やごみ回収や道路清掃における巡回順序の最適化等での応用が期待される容量制約つき運搬経路問題 (CVRP) を取り扱います。

デモアプリ サンプルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (5)

プログラミング難易度 ★★★★★
ブラックボックス最適化により、高度発展による交通集中が生じる都市における第一級と変化する交通状況に似し、組合せ最適化を用いてリアルタイムに信号機の最適制御を実施します。最適化の実施及び実証には、マルチ・エージェント・シミュレーションによる交通シミュレーションを用います。

サンプルコード



チュートリアル応用編

定式化による交通信号機の最適化

プログラミング難易度 ★★★★★
都市における渋滞を最小化するために、第一級と変化する交通状況に似し、組合せ最適化を用いてリアルタイムに信号機の最適制御を実施します。また、その様な信号機制御を実施した際の都市の交通量をシミュレーションします。

サンプルコード



チュートリアル応用編

10. 整数長ジョブスケジューリング問題

プログラミング難易度 ★★★★★
あらかじめ決まった数のジョブとマシンがあり、それぞれのジョブにかかる時間が分かっているとする。それぞれのジョブをいくつかのマシンに割り当てます。ジョブスケジューリング問題では、最も早く全ジョブが完了するような割り当て方を求めます。

サンプルコード



チュートリアル基礎編

画像のノイズ除去

プログラミング難易度 ★★★★★
画像のノイズ除去を行うアプリケーションを開発します。

サンプルコード



チュートリアル応用編

会議室割当問題

プログラミング難易度 ★★★★★
制約条件を用いて定式化するアプリケーションの例として会議室割当問題のアプリケーションを開発します。

サンプルコード



チュートリアル応用編

タクシーマッチング問題

プログラミング難易度 ★★★★★
目的関数と制約条件を用いて定式化するアプリケーションの例としてタクシーマッチング問題のアプリケーションを開発します。

サンプルコード



デモアプリケーション

グラフ彩色問題

プログラミング難易度 ★★★★★
Fixstars Amplifyによる、グラフ彩色問題の定式化を体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

巡回セールスマン問題

プログラミング難易度 ★★★★★
Fixstars Amplifyによる、巡回セールスマン問題を体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

数独

プログラミング難易度 ★★★★★
Fixstars Amplifyによる、数独の定式化問題を体験します。

デモアプリ サンプルコード

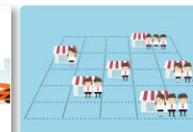


デモアプリケーション

ライドシェア

プログラミング難易度 ★★★★★
集合型ライドシェアの最適化アプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

タスク割当問題

プログラミング難易度 ★★★★★
店舗とタスクに従業員を割り当てる組合せ最適化問題のアプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション

ポートフォリオ最適化

プログラミング難易度 ★★★★★
リスクとリターンを考慮した株式ポートフォリオの最適化アプリケーションを体験します。

デモアプリ サンプルコード

組合せ最適化と ブラックボックス最適化

組合せ最適化とブラックボックス最適化

通常の場合の最適化

- 課題に対し、2次定式化 (QUBO) を実施

- 数の分割

$$f = [\sum(2q_i - 1)a_i]^2$$

- 生産計画最適化

$$f = \sum \sum (\sum a_i p_i q_{m,i,t} + \sum \sum b_i s_i q_{m,i,t} q_{m,i-1,f}) \dots$$

- TSP問題 (お遍路巡り最短経路探索)

$$f = \sum \sum \sum d_{i,j} q_{n,i} q_{n+1,j} \dots$$

- QUBO式に対し、直接アニーリングを行う
(量子アニーリング・イジングマシン)

ブラックボックス最適化

- 課題が複雑で直接の定式化が不可能。

例) 最も計測精度が高くなるセンサー群の配置は？

→ 実験かシミュレーション (コスト大)

- シミュレーションや実験の試行回数の削減

→ シミュレーションや実験が楽になる

- 逆問題に対するアプローチとしても適用化

例) ある計測値を実現する実験条件を見つける

FMQAの紹介

ブラックボックス最適化

目的関数値 $f(x)$ のみ観測可能

- 目的関数の形状や勾配などは何も分からない。

目的関数の評価回数に限りがある

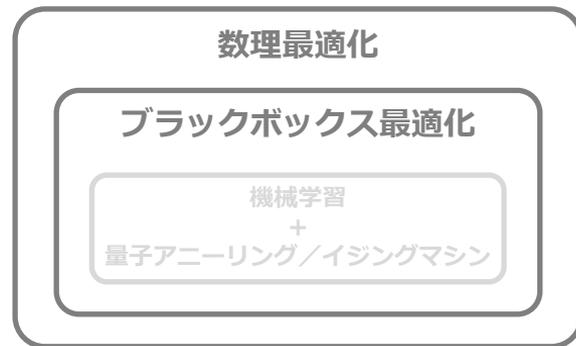
- 入力集合 Ω が有限集合であっても全検索できない。

イメージ

- 5種類の材料から、いくつかの材料を選択・合成し、最も電気抵抗の小さな物質を作る。
 - 決定変数（材料の選択肢） $x \cdots$ 5桁の01ビットでどの材料を選択するかを記述

$$x = [1,0,0,0,0], [1,1,0,0,0], [1,0,1,0,0], \dots, [1,1,1,1,1] \rightarrow (2^5 - 1) \text{ 通り}$$

- 目的関数 $f(x) =$ 合成物質の電気抵抗（実験又は数値シミュレーション）



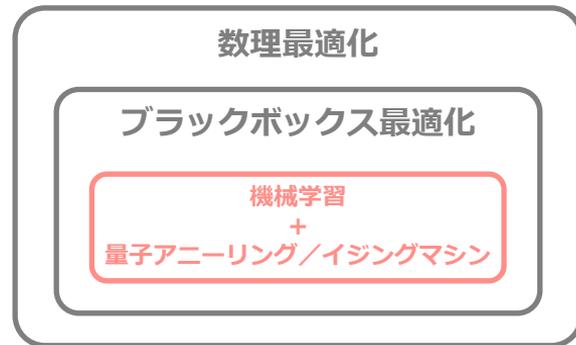
ブラックボックス最適化アプローチ

ブラックボックス関数 $f(x)$ に対して、以下サイクルを繰り返す
(実験・シミュレーション)

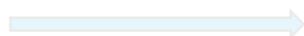
- ① 初期教師データを構築 (N_0 回の目的関数の評価)
- ② 教師データからモデル関数 $g(x)$ を構築
- ③ モデル関数 $g(x)$ が最小となる点 \hat{x} を推定
- ④ 目的関数の評価結果 ($\hat{x}, f(\hat{x})$) を教師データに追加
(実験・シミュレーション)



②～④を N 回繰り返す



課題： 1. $g(x)$ の構築？



Factorization Machine (機械学習モデル)

2. $g(x)$ 最小化を実現する \hat{x} の推定？



学習モデルをQUBOとしてAmplifyで求解

ブラックボックス最適化アプローチ

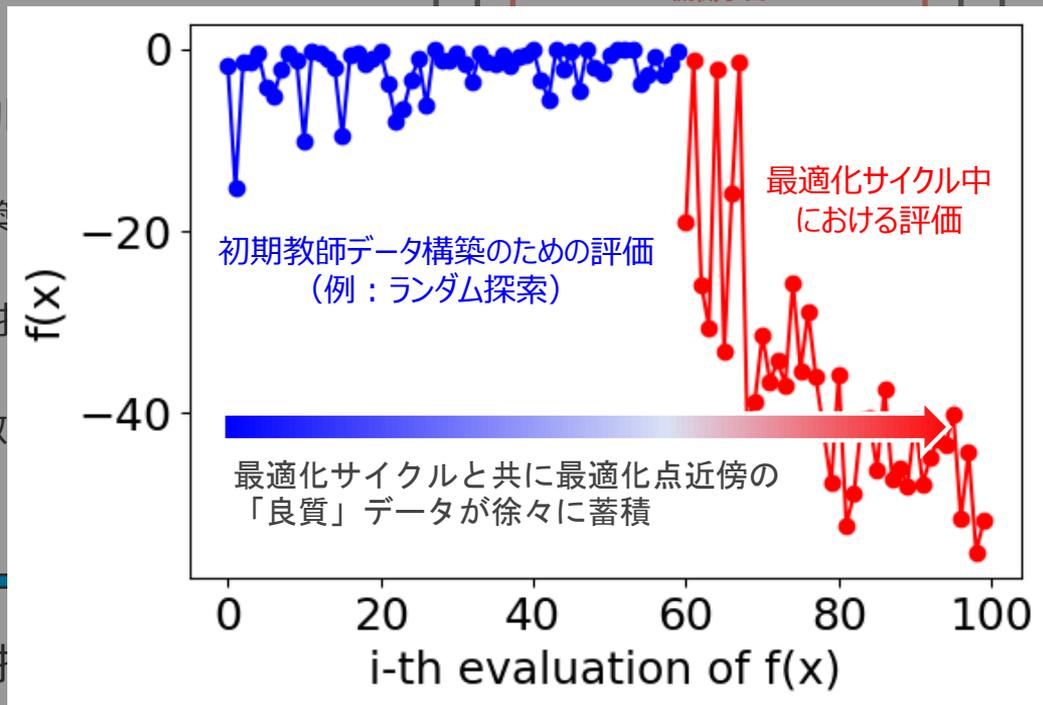
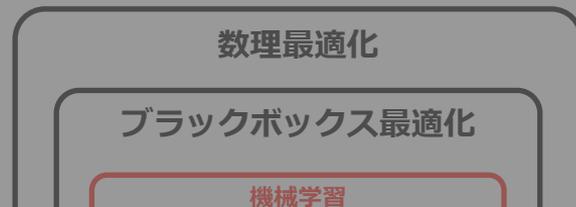
ブラックボックス関数 $f(x)$ に対して、以下サイクルを繰り返す

(実験・シミュレーション)

- ① 初期教師データを構築 (N_0 回の目的関数評価)
- ② 教師データからモデル関数 $g(x)$ を構築
- ③ モデル関数 $g(x)$ が最小となる点 \hat{x} を推定
- ④ 目的関数の評価結果 $(\hat{x}, f(\hat{x}))$ を教師データに追加

実験
シミュレーション

- 課題：
1. $g(x)$ の構築？
 2. $g(x)$ 最小化を実現する \hat{x} の推定？



獲得関数としての Factorization Machine (FM)

- モデル関数 $g(\mathbf{x})$ に機械学習モデルの一種である Factorization Machine (FM) を用いると、次のように変数 \mathbf{x} に対する2次式での記述ができる。

$$g(\mathbf{x}|\mathbf{w}, \mathbf{v}) = w_0 + \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j$$
$$= w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{f=1}^k \left(\left(\sum_{i=1}^n v_{if} x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n v_{if}^2 x_i^2 \right) \quad \rightarrow \text{QUBO式}$$

- k はハイパーパラメータ、 \mathbf{w} 及び \mathbf{v} は FM 学習後に取得される FM パラメータ。
- FM パラメータ数は k に依存。 $k = n$ のときは QUBO の相互作用項と同じ自由度がある一方、 k を小さくすることでパラメータ数を減らし過学習を抑制する効果
- このようなブラックボックス最適化手法を **FMQA** と呼ぶ場合がある。

ブラックボックス最適化 活用例

材料分野に限らず、幅広い分野へ適用可能

FMQAの活用例

- デモ・チュートリアルページやセミナー等で公開の活用例

Amplify デモ 検索

<https://amplify.fixstars.com/ja/demo>



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (1)

プログラミング難易度 ★★★★★

複雑で未知な目的関数にも適用可能な、機械学習と組み合わせ最適化を組み合わせたブラックボックス最適化手法を紹介し、Amplifyを用いて実装します。

サンプルコード

FMQA入門



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (2)

プログラミング難易度 ★★★★★

機械学習と量子アニーリング・イジングマシンを活用するブラックボックス最適化の活用例として、疑似的な高温超電導を実現する材料探索を取り扱います。

サンプルコード

物理・材料



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (3)

プログラミング難易度 ★★★★★

化学プラントにおける生産量を最大化するための運転条件最適化を行います。最適化には、機械学習モデルに基づくブラックボックス最適化と化学反応に関する物理シミュレーションを用います。

サンプルコード

プラント工学



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (4)

プログラミング難易度 ★★★★★

流体機器設計に不可欠な翼型の最適化問題を取り上げます。最適化には、組み合わせ最適化及び機械学習に基づくブラックボックス最適化と流体シミュレーションを用い、翼の揚抗比を最大化するように翼型の探索を行います。

サンプルコード

流体工学



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (5)

プログラミング難易度 ★★★★★

ブラックボックス最適化により、商業施設による交通集中が発生し得る都市における、交通渋滞を軽減するような信号機群の最適制御を実施します。最適化の実施及び実証には、マルチ・エージェント・シミュレーションによる交通シミュレーションを用います。

サンプルコード

交通制御



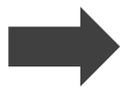
機械学習への
応用

機械学習

FMQAの活用例

- その他の活用事例

- 大学、国研、化学、製薬、自動車、電機、重工、等



10月23日（水） 9:30～ **自動車技術会秋季大会 @ 仙台**
“FMQAを用いた複数車種の車体構造同時設計最適化”

ブラックボックス最適化

1. 機械学習 (FM) ハンズオン
2. FMQA ハンズオン

ブラックボックス最適化のデモプログラム

模擬超電導材料の臨界温度の FM 機械学習

<https://colab.research.google.com/drive/1T74GyN07bhvfMzNltloEgBS0fW4bxtGu>

ブラックボックス関数

- ブラックボックス関数 $f(x)$ として、与えられた材料組合せによる模擬超電導材料の臨界温度を返却するモデル関数を考慮

※本関数はいくまでも実験やシミュレーションの代用であり、その中身やパラメータについては未知であるとして扱い、関数評価の回数にも制限があるものとして取り扱います。

最適化サイクル

1. 教師データから獲得関数 $g(x)$ を構築 (FM) ←
2. 獲得関数 $g(x)$ が最小となる点 \hat{x} を推定 (QA)
3. 評価結果 $(\hat{x}, f(\hat{x}))$ を教師データに追加

↑のサイクルにより、最適化点近傍におけるFMの予測精度が向上し、組合せ最適化により、より良い \hat{x} の推定が期待される

FM デモプログラム 1/5 (ブラックボックス関数の定義)

```
def make_blackbox_func(d: int) -> Callable[[np.ndarray], float]:
    """ 入力 が長さ d のバリエーション値のベクトルで出力が float であるような関数を返却する """

def set_properties(size: int) -> tuple[np.ndarray, np.ndarray, np.ndarray]:
    """ (ランダムに決定した) 材料物性係数を返却する """
    mu, sigma, ratio = 0.0, 1.0, 0.2
    table1 = rng.random(size) * 1e5 * (0.1 * math.log(size) - 0.23)
    table2 = rng.lognormal(mu, sigma, size) * ratio
    table3 = rng.lognormal(mu, sigma, size) * ratio
    return table1, table2, table3

def supercon_temperature(x, debye_table, state_table, interaction_table):
    """ 与えられた材料の組合せ (長さ d のバリエーション値のベクトル) に対し、臨界温度を計算し返却する """
    debye_temperature = np.sum(x * debye_table) / np.sum(x)
    state_density = np.sum(x * state_table) / np.sum(x)
    interaction = np.sum(x * interaction_table) / np.sum(x)
    crit_temp = debye_temperature * math.exp(-1.0 / state_density / interaction)
    return crit_temp

# 係数テーブルの準備
debye_temperature_table, state_density_table, interaction_table = set_properties(d)

# ブラックボックス関数の定義
def blackbox(x: np.ndarray) -> float:
    """ 与えられた材料の組合せ (長さ d のバリエーション値のベクトル) に対し、超電導臨界温度の負値を返却する """
    assert x.shape == (d,) # x は要素数 d の一次元配列
    t_c = supercon_temperature(
        x, debye_temperature_table, state_density_table, interaction_table
    )
    return -t_c

return blackbox
```

関数の利用例 :

```
▶ num_materials = 100 # 決定変数のサイズ (材料選択肢の数)
  blackbox_func = make_blackbox_func(num_materials)
  critical_temp = blackbox_func(x)
```

FM デモプログラム 2/5 (FMの定義)

```
class TorchFM(nn.Module):
    def __init__(self, d: int, k: int):
        """モデルを構築する

        Args:
            d (int): 入力ベクトルのサイズ
            k (int): パラメータ k
        """
        super().__init__()
        self.d = d
        self.v = nn.Parameter(torch.randn((d, k)))
        self.w = nn.Parameter(torch.randn((d,)))
        self.w0 = nn.Parameter(torch.randn(()))

    def forward(self, x: torch.Tensor) -> torch.Tensor:
        """入力 x を受け取って y の推定値を出力する

        Args:
            x (torch.Tensor): (データ数 × d) の 2 次元 tensor

        Returns:
            torch.Tensor: y の推定値 の 1次元 tensor (サイズはデータ数)
        """
        out_linear = torch.matmul(x, self.w) + self.w0
        out_1 = torch.matmul(x, self.v).pow(2).sum(1)
        out_2 = torch.matmul(x.pow(2), self.v.pow(2)).sum(1)
        out_quadratic = 0.5 * (out_1 - out_2)

        out = out_linear + out_quadratic
        return out
```

- FM モデルを PyTorch で定義する

$$f(\mathbf{x}|\mathbf{w}, \mathbf{v}) = \underbrace{w_0 + \sum_{i=1}^d w_i x_i}_{\text{out_linear}} + \frac{1}{2} \underbrace{\left[\sum_{f=1}^k \underbrace{\left(\sum_{i=1}^d v_{if} x_i \right)^2}_{\text{out_1}} - \sum_{f=1}^k \sum_{i=1}^d \underbrace{v_{if}^2 x_i^2}_{\text{out_2}} \right]}_{\text{out_quadratic}}$$

FM デモプログラム 3/5 (FMの学習)

```
def train(
    x: np.ndarray, y: np.ndarray, model: TorchFM, epochs: int = 2000, lr: float = 1, plo

    # モデルの最適化関数
    optimizer = torch.optim.AdamW([model.v, model.w, model.w0], lr=lr)
    # 学習率スケジューラ
    scheduler = torch.optim.lr_scheduler.StepLR(optimizer, step_size=200, gamma=0.9)
    # 損失関数
    loss_func = nn.MSELoss()
    # データセットの用意
    x_tensor, y_tensor = (
        torch.from_numpy(x).float(),
        torch.from_numpy(y).float(),
    )
    dataset = TensorDataset(x_tensor, y_tensor)
    train_set, valid_set = random_split(dataset, [0.8, 0.2])
    batch_size = 8
    train_loader = DataLoader(train_set, batch_size=batch_size, shuffle=True)
    valid_loader = DataLoader(valid_set, batch_size=batch_size, shuffle=True)

    # 学習の実行
    min_loss = 1e18 # 損失関数の最小値を保存
    max_corrcoef = -1e18 # 相関係数の最大値を保存
    losses: list[float] = [0.0] * epochs
    corrcoefs: list[float] = [0.0] * epochs
    best_state = model.state_dict() # 最も良いモデルのパラメータを保存するための変数
    for i in trange(epochs, leave=False):
        # 学習フェイズ
        for x_train, y_train in train_loader:
            optimizer.zero_grad()
```

FM 学習は、通常の機械学習と同様に進める。教師データを学習・検証データに分割し、ミニバッチ学習。

- **x, y**: 教師データ
- **model**: FM モデル (TorchFM)
- **epochs**: エポック (繰り返し) の数
- **lr**: (初期) 学習率
- **scheduler**: 学習率スケジューラー

学習後、**最も良いモデル**に対し、次のような評価を実施

```
# 教師データの入力値に基づきモデルを評価
y_pred = model(x_tensor)
print(f"corrcoef: {torch.corrcoef(torch.stack([y_tensor, y_pred]))[0]
print(f"RMS error: {min_loss:.2f}")
```

FM デモプログラム 4/5 (教師データ作成)

```
def init_training_data(d: int, n0: int):
    """n0 組の初期教師データを作成する"""
    assert n0 < 2**d

    # n0 個の長さ d の入力値を乱数を用いて作成
    x = rng.choice(np.array([0, 1]), size=(n0, d))

    # 入力値の重複が発生していたらランダムに値を変更して回避する
    x = np.unique(x, axis=0)
    while x.shape[0] != n0:
        x = np.vstack((x, np.random.randint(0, 2, size=(n0 - x.shape[0], d))))
        x = np.unique(x, axis=0)

    # blackbox 関数を評価して入力値に対応する n0 個の出力を得る
    y = np.zeros(n0)
    for i in range(n0):
        y[i] = blackbox_func(x[i])

    return x, y
```

```
N0 = 10 # 初期教師データの数
x_init, y_init = init_training_data(num_materials, N0)
```

教師データを乱数により生成

- **d** : 入力サイズ
- **n0** : 教師データのサンプル数
- **blackbox** : ブラックボックス関数 (実験又はシミュレーション) $f(x)$

FM デモプログラム 5/5 (メイン部分)

```
# 乱数シードの固定
rng = np.random.default_rng(seed)

# 教師データの初期化
x, y = x_init, y_init

# 機械学習モデルの作成
model = TorchFM(d=num_materials, k=10)

# モデルの学習の実行
train(x, y, model, epochs=2000, lr=1, plot_learning_curve=True)
```

実際にサンプルプログラムを実行してみま
しょう。デフォルトの条件から、

- FMのハイパーパラメータ (k)
- エポック数 (epochs)
- 学習率 (lr)

などを変更した場合、真値と予測値の相関
係数及びRMS誤差はどのように変化するで
しょうか？

ブラックボックス最適化

1. 機械学習 (FM) ハンズオン
2. FMQA ハンズオン

ブラックボックス最適化のデモプログラム

ブラックボックス最適化による模擬超電導材料の探索

https://colab.research.google.com/drive/1E3Cy6Fe4EG-M11E_33-Djp93aSZAUiQz

ブラックボックス関数

- ブラックボックス関数 $f(x)$ として、与えられた材料組合せによる模擬超電導材料の臨界温度を返却するモデル関数を考慮

※本関数はあくまでも実験やシミュレーションの代用であり、その中身やパラメータについては未知であるとして扱い、関数評価の回数にも制限があるものとして取り扱います。

最適化サイクル

1. 教師データから獲得関数 $g(x)$ を構築 (FM)
2. 獲得関数 $g(x)$ が最小となる点 \hat{x} を推定 (QA)
3. 評価結果 $(\hat{x}, f(\hat{x}))$ を教師データに追加

↑のサイクルにより、最適化点近傍におけるFMの予測精度が向上し、組合せ最適化により、より良い \hat{x} の推定が期待される

FMQA デモプログラム 1/2 (アニーリング部分)

```
def anneal(torch_model: TorchFM) -> np.ndarray:
    """FM モデルを受け取り、それらのパラメータにより記述されるモデルの最小値を与える x を求める"""

    x = VariableGenerator().array("Binary", torch_model.d) # 長さ d のバイナリ変数の配列を作成

    v, w, w0 = torch_model.get_parameters() # TorchFM からパラメータ v, w, w0 を取得

    # 目的関数を作成
    out_linear = w0 + (x * w).sum()
    out_1 = ((x[:, np.newaxis] * v).sum(axis=0) ** 2).sum() # type: ignore
    out_2 = ((x[:, np.newaxis] * v) ** 2).sum()
    objective: Poly = out_linear + (out_1 - out_2) / 2

    amplify_model = Model(objective) # 組合せ最適化モデルを構築

    # ソルバーの設定
    client = FixstarsClient()
    client.token = token
    client.parameters.timeout = timedelta(milliseconds=2000)

    # 最小化を実行
    result = solve(amplify_model, client)
    if len(result.solutions) == 0:
        raise RuntimeError("No solution was found.")

    # モデルを最小化する入力ベクトルを返却
    return x.evaluate(result.best.values).astype(int)
```

学習済みFMに基づき \hat{x} を推定する関数

- 決定変数配列の作成
- 学習済みモデルからパラメータを取得
- パラメータに基づき目的関数 $g(x)$ を作成
- ソルバーの設定
 - ※トークン入力を忘れずに
- solve の実行
- このサイクルにおける \hat{x} を返却

FMQA デモプログラム 2/2 (メイン部分)

```
N = 10 # FMQA サイクルの実行回数
x, y = x_init, y_init # 教師データの初期化

# N 回のイテレーションを実行。`range` の代わりに `tqdm` モジュールを用いて進捗を表示
for i in trange(N):
    model = TorchFM(d=num_materials, k=10) # 機械学習モデルの作成

    train(x, y, model, epochs=1000) # モデルの学習の実行

    x_hat = anneal(model) # 学習済みの最小値を与える入力ベクトルの値を取得

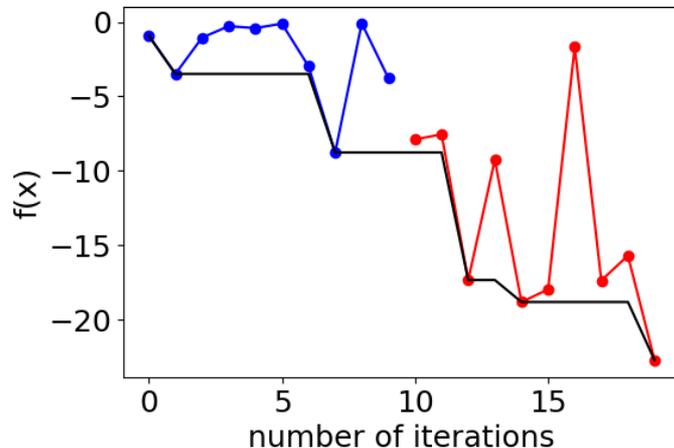
    # x_hat が重複しないようにする
    while (x_hat == x).all(axis=1).any():
        flip_idx = rng.choice(np.arange(num_materials))
        x_hat[flip_idx] = 1 - x_hat[flip_idx]

    y_hat = blackbox_func(x_hat) # x_hatを用いてブラックボックス関数を評価

    # 評価した値をデータセットに追加
    x = np.vstack((x, x_hat))
    y = np.append(y, y_hat)

    tqdm.write(f"FMQA cycle {i}: found y = {y_hat:.1f}; current best = {np.min(y):.1f}")
```

実際にサンプルプログラムを実行してみましょう！



FMQA デモプログラムの実務での活用方法

```
def make_blackbox_func(d: int) -> Callable[[np.ndarray], float]:
    rng = np.random.default_rng(seed)
    Q = rng.random((d, d))
    Q = (Q + Q.T) / 2
    Q = Q - np.mean(Q)

    def blackbox(x: np.ndarray) -> float:
        assert x.shape == (d,) # x は要素数 d の一次元配列
        return x @ Q @ x # type: ignore

    return blackbox

def make_blackbox_func(d: int) -> Callable[[np.ndarray], float]:
    # 必要に応じて最適化対象以外の条件設定や初期設定などをここで実施

    def blackbox(x: np.ndarray) -> float:
        # x の組合せを元の実験を実施
        # または、シミュレーションを実施
        # 実験・シミュレーション結果を後処理し、最小化したい目的関数値を取得
        objective = hogehoge
        return objective # type: ignore

    return blackbox
```

基本的に、`blackbox()`を変更する。必要に応じて、現在の教師データの出力などを追加。

- 例① : `blackbox()` 内でシミュレーションを呼び出し、後処理、その戻り値を最小化するように最適化。
- 例② : `blackbox()` 内で実験を行う。つまり、1回のFMQA で推定された探索候補 \hat{x} を対象に実験し、結果を教師データに追加、次のFMQA 試行を行う。
- $h(x)$ を最大にするような入力 x を推定する場合は、 $1/h(x)$ や $-h(x)$ などを目的関数 $f(x)$ とする。

Amplify-BBOpt による実装・実行例

```
num_materials = 100 # 決定変数のサイズ (材料選択肢の数)

my_func = make_blackbox_func(num_materials)

# Amplify-BBOpt の方法でブラックボックス関数及び決定変数を定義
@blackbox
def blackbox_func(x: list[bool] = BinaryVariableList(length=num_materials)):
    return my_func(np.array(x))

# ソルバークライアントの設定
client = amplify.FixstarsClient()
client.parameters.timeout = timedelta(milliseconds=2000)
client.token = token

# 初期教師データの構築 (10サンプル)
data = DatasetGenerator(objective=blackbox_func).generate(num_samples=10)

# オプティマイザーのインスタンス化
optimizer = KernelQAOptimizer(data=data, objective=blackbox_func, client=client)

# [num_cycles] 回の最適化サイクルの実施
optimizer.optimize(num_cycles=100)

# 最適化履歴の表示
plot_history(optimizer.fetch_history())
```

実装ステップ

- ブラックボックス関数及び決定変数定義
- クライアント設定 (Amplify SDK)
- 初期データの構築
- Optimizer のインスタンス化と実行
 - FMQAOptimizer: **FMQA**
 - KernelQAOptimizer: **Kernel-QA**

➔ 現在テスト公開中 (v0.2.3)。ご興味あればご連絡ください！

今後について

ぜひ、デモ・チュートリアルにあるサンプルコードにも挑戦してみてください！

一般的な組合せ最適化問題

目的関数のみで
定式化



チュートリアル詳細
画像のノイズ除去
プログラミング難易度 ★★★★★
画像のノイズ除去を行うアプリケーションを開発します。
サンプルコード

制約条件のみで
定式化



チュートリアル詳細
会議室割当問題
プログラミング難易度 ★★★★★
制約条件を用いて定式化するアプリケーションの例として会議室割当問題のアプリケーションを開発します。
サンプルコード

目的関数 + 制約条件



デモアプリケーション
巡回セールスマン問題
プログラミング難易度 ★★★★★
Fixstars Amplifyによる、巡回セールスマン問題の定式化を体験します。
デモアプリ サンプルコード



デモアプリケーション
容量制約つき運搬経路問題 (CVRP)
プログラミング難易度 ★★★★★
複雑で未知な目的関数にも適用可能な、機械学習と組み合わせた最適化を紹介したブラックボックス最適化手法を紹介し、Amplifyを用いて実装します。
デモアプリ サンプルコード

ブラックボックス最適化問題

概要



チュートリアル詳細
ブラックボックス最適化 (1)
プログラミング難易度 ★★★★★
複雑で未知な目的関数にも適用可能な、機械学習と組み合わせた最適化を紹介したブラックボックス最適化手法を紹介し、Amplifyを用いて実装します。
サンプルコード

材料探索



チュートリアル詳細
ブラックボックス最適化 (2)
プログラミング難易度 ★★★★★
機械学習と量子アニーリング・イジングマシンを活用するブラックボックス最適化の適用例として、疑似的な高温超伝導を実現する材料探索を取り扱います。
サンプルコード

翼型最適化



チュートリアル詳細
ブラックボックス最適化 (4)
プログラミング難易度 ★★★★★
流体力学設計に不可欠な翼型の最適化問題を取り上げます。最適化には、組み合わせ最適化及び機械学習に基づくブラックボックス最適化と実体シミュレーションを用い、翼の屈曲比を最大化するように翼形の探索を行います。
サンプルコード

信号機制御



チュートリアル詳細
ブラックボックス最適化 (5)
プログラミング難易度 ★★★★★
ブラックボックス最適化により、商業施設による交通渋滞が発生し得る都市における、交通渋滞を低減するような信号機制御の最適化を実装します。最適化の実施及び検証には、マルチエージェント・シミュレーションによる交通シミュレーションを用います。
サンプルコード



困った時はドキュメンテーションを！

<https://amplify.fixstars.com/docs/amplify/v1/index.html>

今後のセミナーの予定

今後も定期的に無料セミナーを開催します！

2024/9/25 ブラックボックス最適化 (材料探索)

- ・はじめに
- ・会社紹介
- ・Fixstars Amplifyの紹介
- ・ブラックボックス最適化のワークショップ
- ・Wrap Up
 - ・事例のご紹介
 - ・今後の進め方
 - ・Q&A

2024/10/15 シフト最適化 (Annealing Engine)

- ・はじめに
- ・会社紹介
- ・Fixstars Amplifyのご紹介
- ・シフト最適化のワークショップ
- ・Wrap Up
 - ・事例のご紹介
 - ・今後の進め方
 - ・Q&A

2024/11 (仮) ブラックボックス多目的最適化 事例紹介・技術解説

- ・はじめに
- ・会社紹介
- ・Fixstars Amplifyの紹介
- ・ブラックボックス最適化の紹介
- ・車体構造同時設計最適化事例の紹介
 - ・過去事例との精度・コスト比較
 - ・論文内で紹介の技術解説

ご質問・ご不明点がありましたら、お問い合わせフォームでご連絡下さい

<https://amplify.fixstars.com/ja/contact>

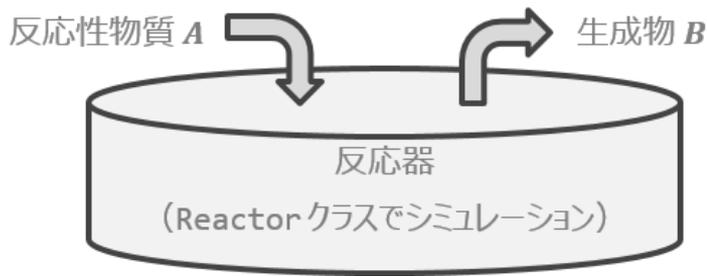
Q&A

補足資料

ブラックボックス最適化による化学プラント生産量最大化

- 化学反応装置 ($A \rightarrow B$) における物質生成量の最大化を目指す最適化モデル課題
- 目的関数は、化学反応シミュレーションで得るB分布を空間積分した生成量 m_{prod} の負値
- 反応器は、反応性物質 A の初期濃度分布 で制御される

(燃料ノズルの位置や形状最適化)

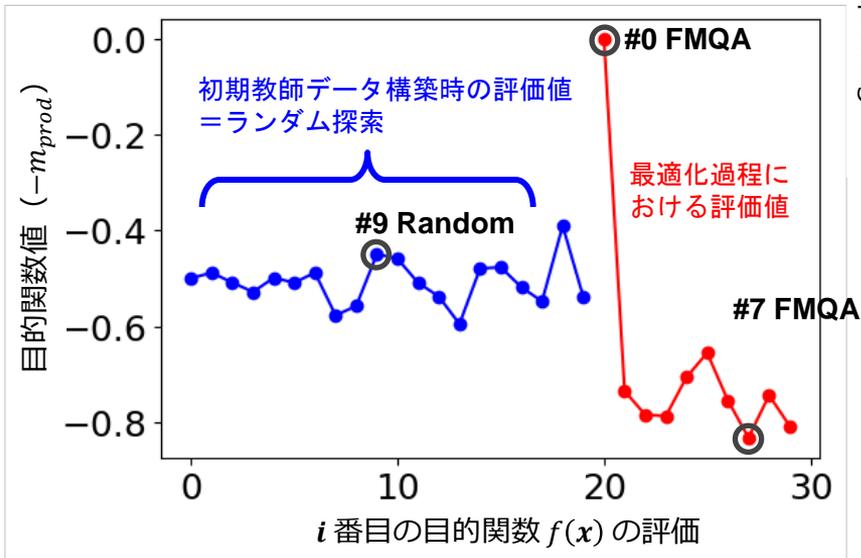


化学反応シミュレーションで考慮する
基礎方程式 (有限差分法)

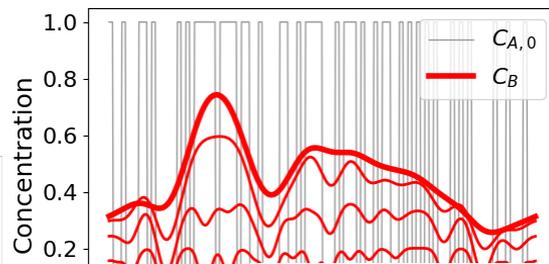
- $\frac{\partial C_A}{\partial t} = \alpha \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_A}{\partial x} \right) - \omega(C_A, C_B)$. . . A濃度の拡散反応輸送方程式
- $\frac{\partial C_B}{\partial t} = \alpha \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_B}{\partial x} \right) + \omega(C_A, C_B)$. . . B濃度の拡散反応輸送方程式
- $\omega = R_r C_A (1 - C_A) \exp(-C_B)$. . . 反応速度
- $C_B = 0$ at $t = 0$. . . 初期条件

ブラックボックス最適化による化学プラント生産量最大化

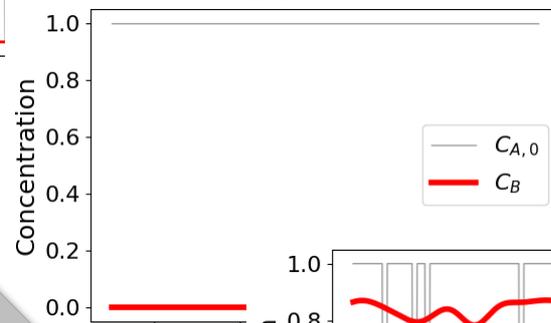
※目的関数は、B生成量 m_{prod} の負値



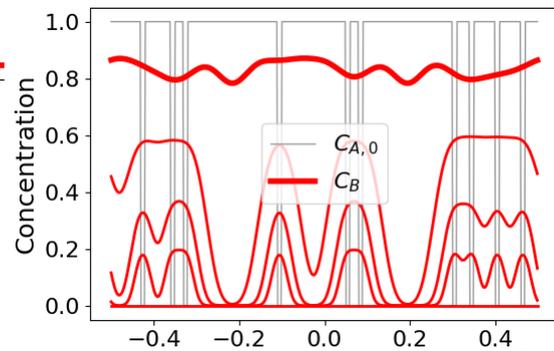
#9 Random, $m_{prod} = 0.4 \sim 0.6$



#0 FMQA, $m_{prod} = 0$



#7 FMQA,
 $m_{prod} = 0.831$



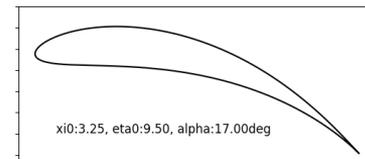
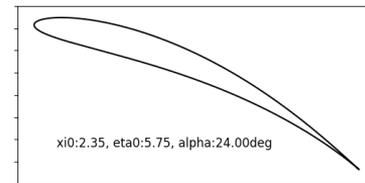
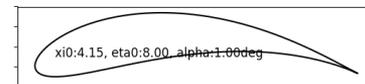
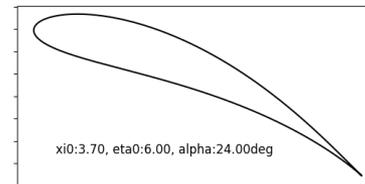
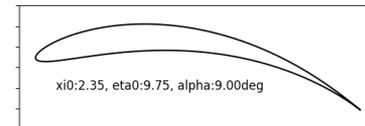
ブラックボックス最適化とCFDによる翼形状の最適化

- 一様流れ中に設置された翼に作用する揚力 F_L と抗力 F_D の比（揚抗比）

$$r_{LD} = F_L / F_D$$

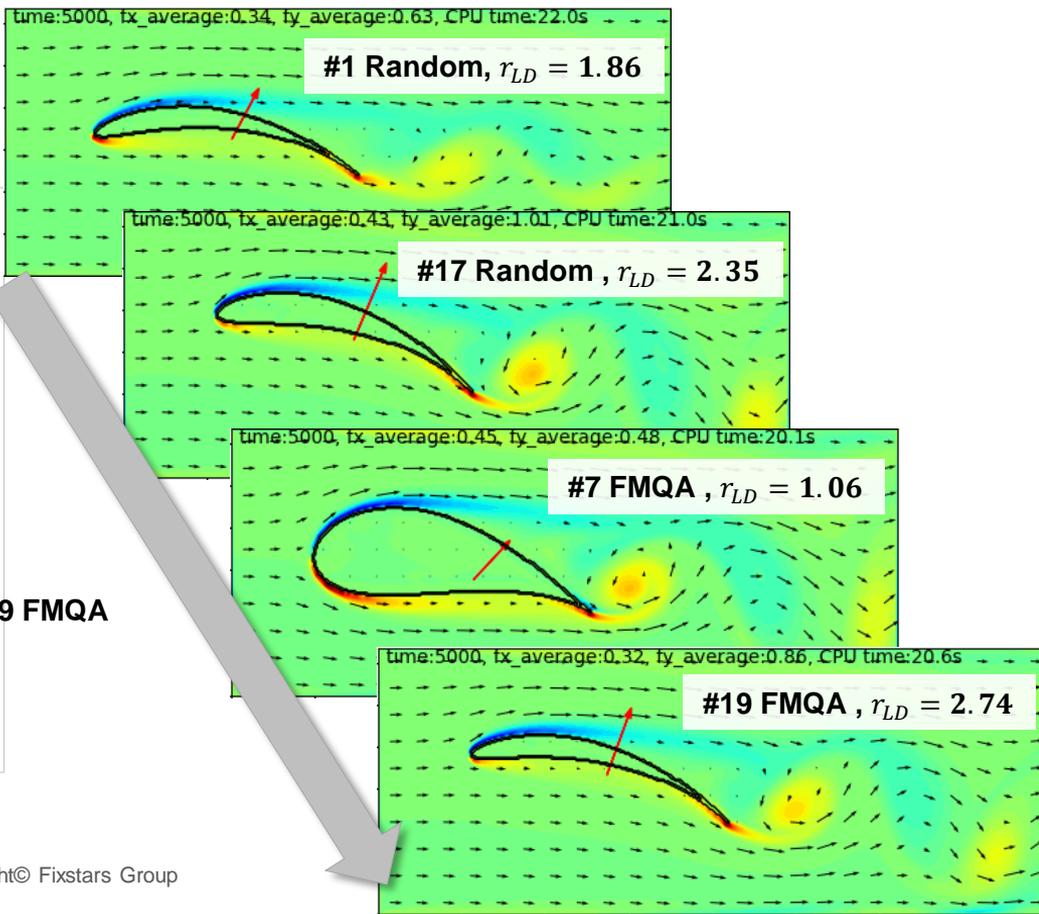
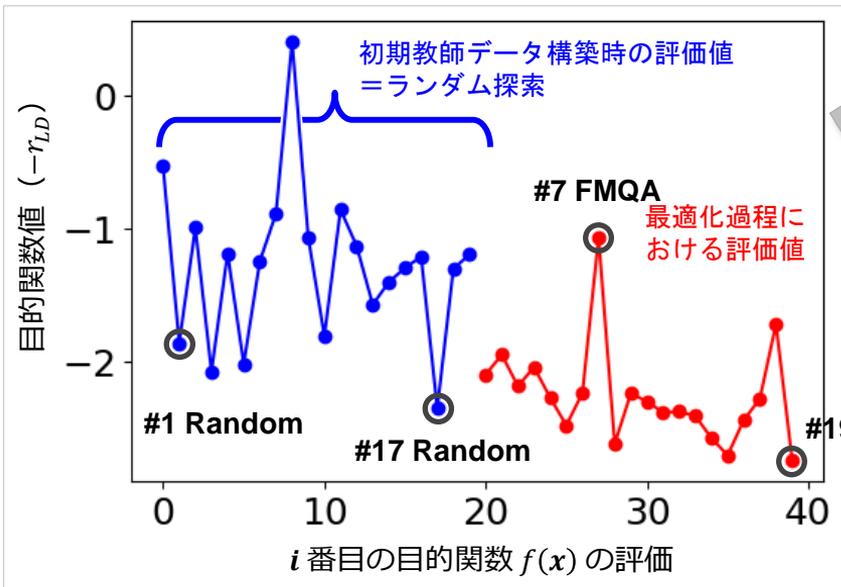
を最大化する翼形状の探索（ $-r_{LD}$ を最小化する問題）

- 単一翼の場合、写像パラメータ（実数）2つ、迎角（実数）1つの、合計3つからなる実数決定変数
- one-hot エンコーディング**により、実数決定変数を100要素からなるバイナリ変数ベクトルに変換し、ブラックボックス最適化を実施



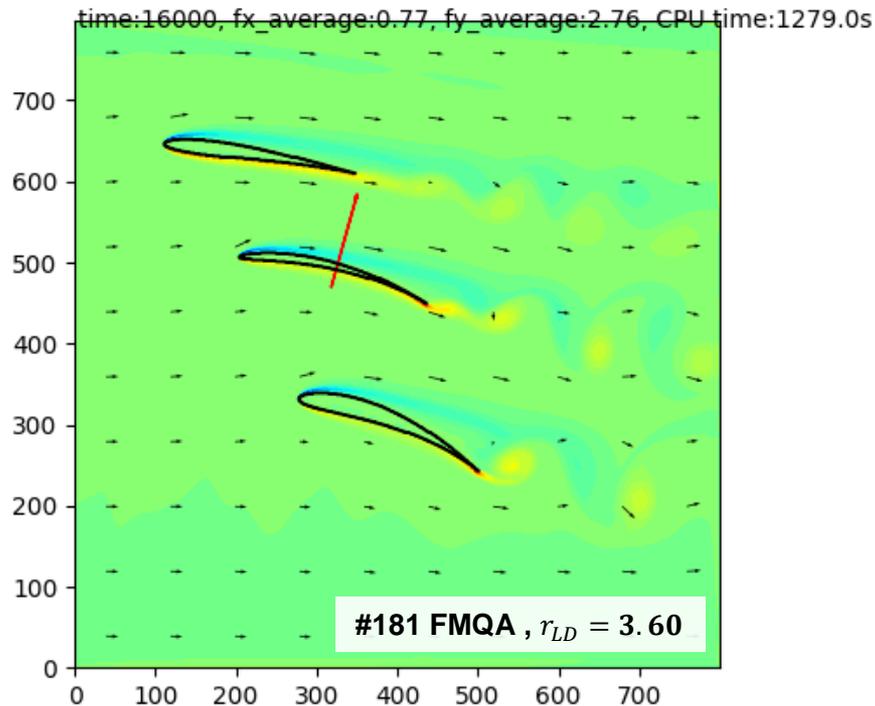
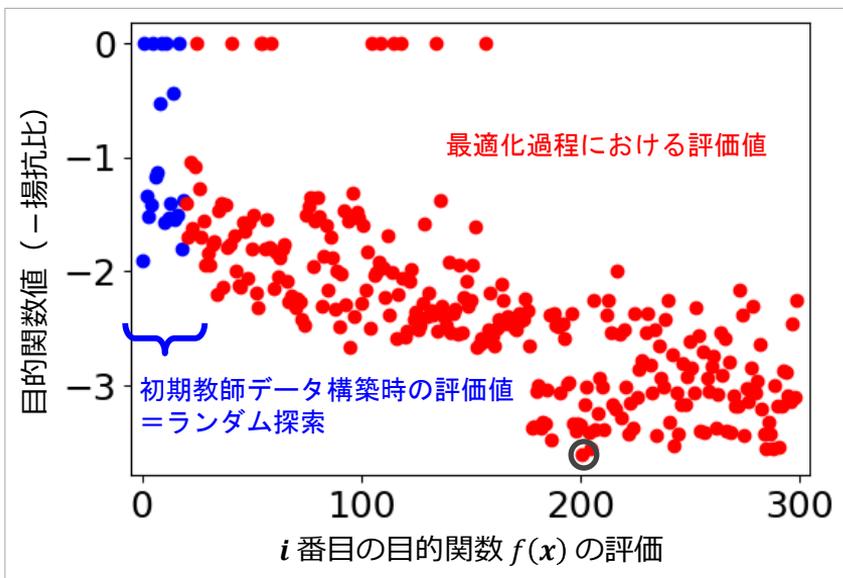
ブラックボックス最適化とCFDによる翼形状の最適化

※目的関数は、揚抗比 r_{LD} の負値



ブラックボックス最適化とCFDによる翼形状の最適化:派生

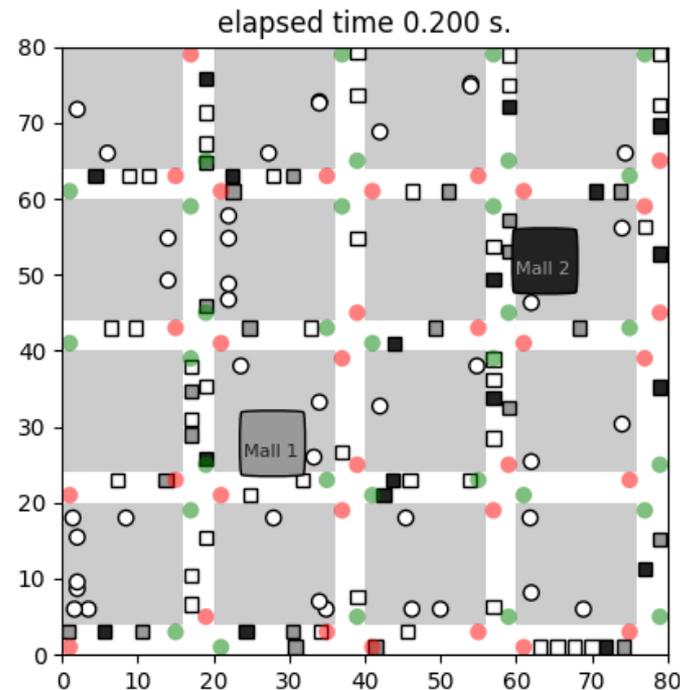
- 多段翼の形状および配置の最適化
 - 決定変数の数 : 370個



ブラックボックス最適化による最適信号機制御

(9月追加!)

- マルチエージェントシミュレーション (MAS) による交通シミュレーション
 - 自宅とモール1を往復する自動車(薄灰)
 - 自宅とモール2を往復する自動車(濃灰)
 - 自宅とその他の場所を往復する自動車(白)
- MASによるシミュレーション例:
 - 社会システム
経済学、社会学、政治学の分野において、人間行動や社会の相互作用を研究し、政策や社会システムの影響を理解するために使用。
 - 組織内動態
企業や組織内の個人や部門の相互作用を模倣して、組織の効率性や意思決定の影響の分析。

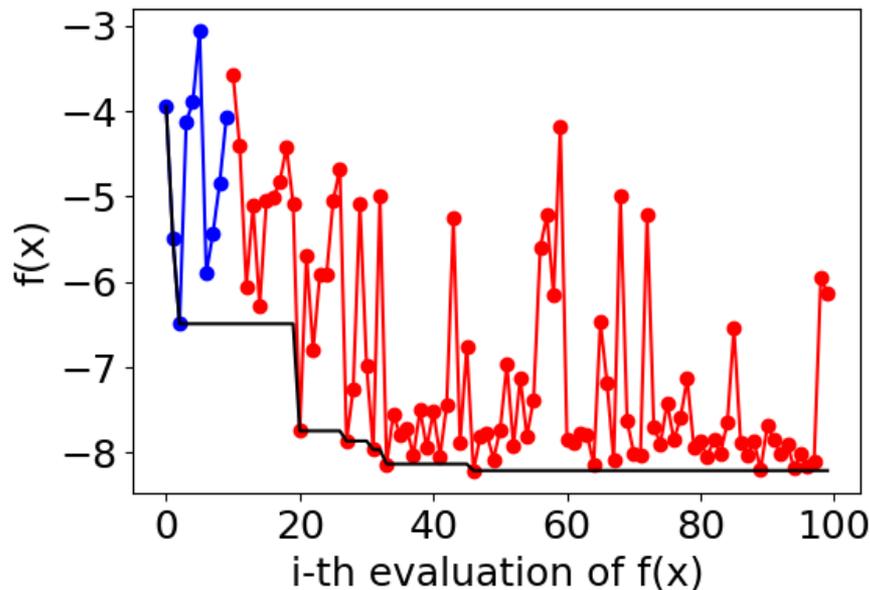


ブラックボックス最適化による最適信号機制御

(9月追加!)

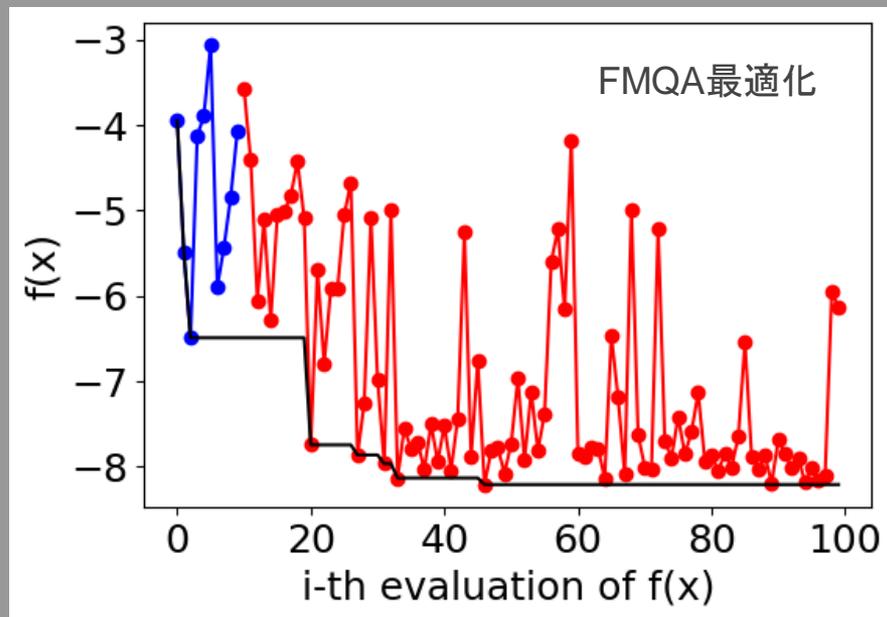
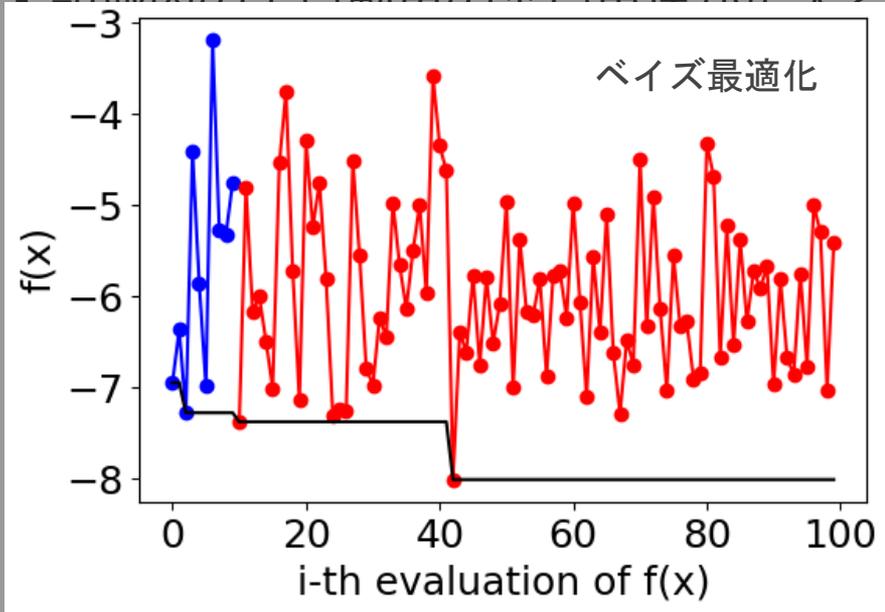
- 領域内の全自動車の平均車速が最大となるように、各信号機における赤・青信号の長さ、位相を最適化する。
- 目的関数は、

$$f = - \sum_i \frac{\int_{t_{sta,i}}^{t_{end,i}} v_i(t) dt}{t_{end,i} - t_{sta,i}}$$



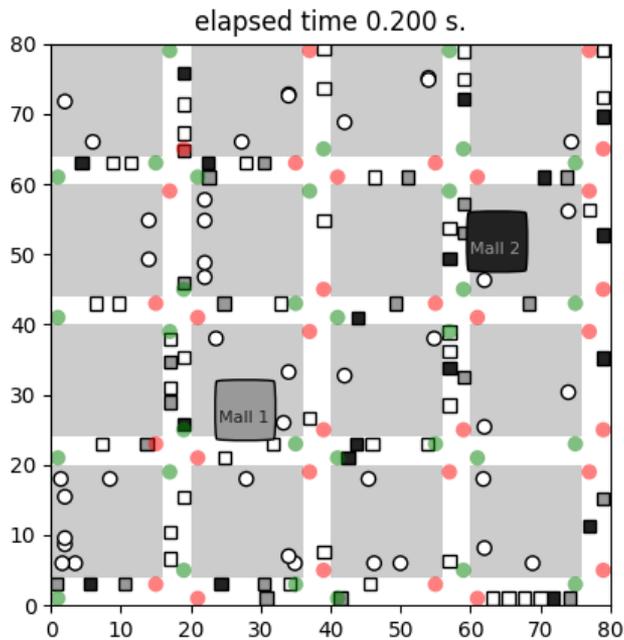
ブラックボックス最適化による最適信号機制御

領域内の全自動車（平均車速が早くと



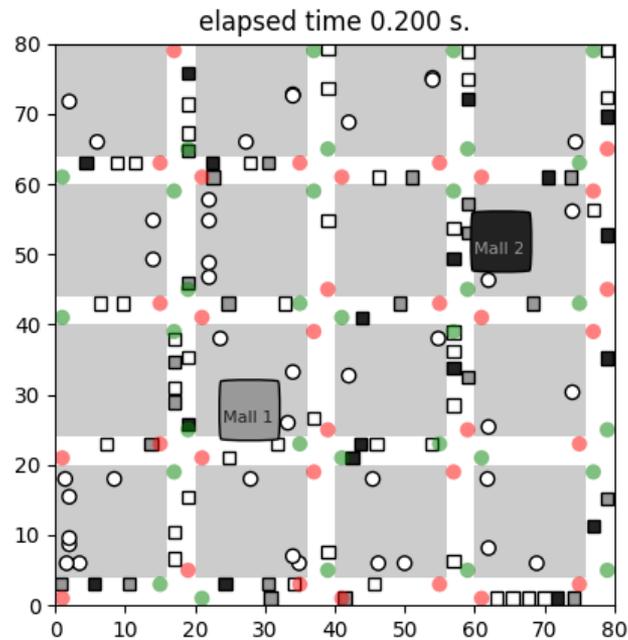
ブラックボックス最適化による最適信号機制御

- 最適化（100サイクル）前後の交通状況
 - 全車の平均車速：6.88 m/s → 8.55 m/s



ランダム探索最良解

xstars C



FMQA最良解

FMQAによる熱化学条件の推定（燃烧現象の逆問題）

流体力学+化学反応+熱発生

- ターゲット燃烧特性（燃烧速度 S_L 、火炎厚さ δ_{th} 、既燃温度 T_b 、着火遅れ時間 τ_{ig} ）を実現する燃料組成 (CH₄/H₂/CO₂/H₂O) 及び予熱温度 T_u は？

- 目的関数

- 入力条件に対し Cantera（ライブラリ）で取得された燃烧特性とターゲット特性の差の絶対値

- ターゲット（1 atm, $\phi = 1.0$ ）

- $T_u = 684.17$ K, $X_{fu} = \{ \text{"CH4": 0.715, "H2": 0.603, "CO2": 0.545, "H2O": 0.424} \}$ （乱数で決定）

- $S_L = 1.65$ m/s

- $\delta_{th} = 0.343$ mm

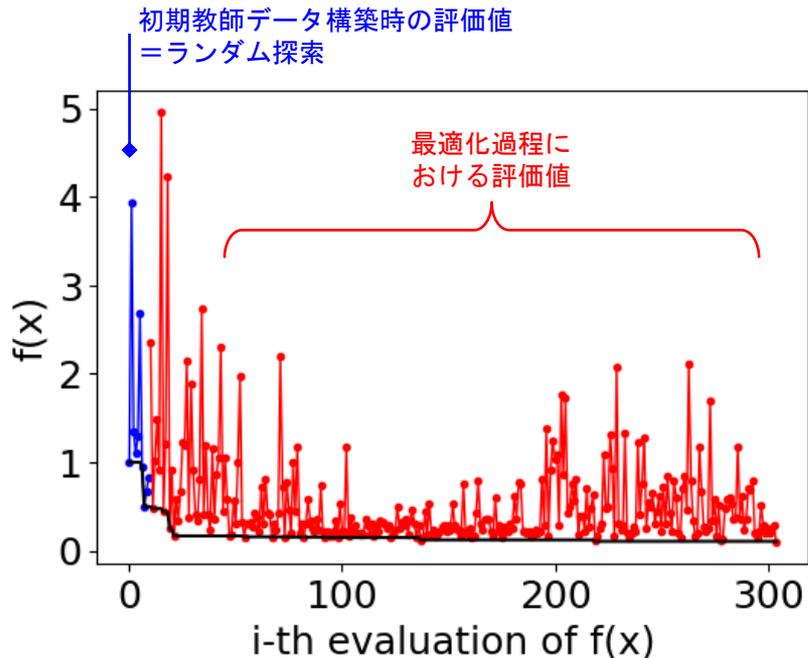
- $T_b = 2283.8$ K

- $\tau_{ig} = 0.170$ ms

ターゲット燃烧特性

上記 (T_u, X_{fu}) に基づき事前に Cantera で計算

FMQAによる熱化学条件の推定（燃焼現象の逆問題）



	ターゲットの燃焼特性	推定熱化学条件における燃焼特性
S_L (m/s)	1.651	1.616
δ_{th} (mm)	0.3426	0.3223
T_b (K)	2284	2317
τ_{ig} (ms)	0.17	0.17
	ターゲット熱化学条件	推定された熱化学条件
T_u (K)	684.17	629.00
X_{fu,CH_4}	0.72	0.84
X_{fu,H_2}	0.60	0.68
X_{fu,CO_2}	0.54	0.33
X_{fu,H_2O}	0.42	0.35

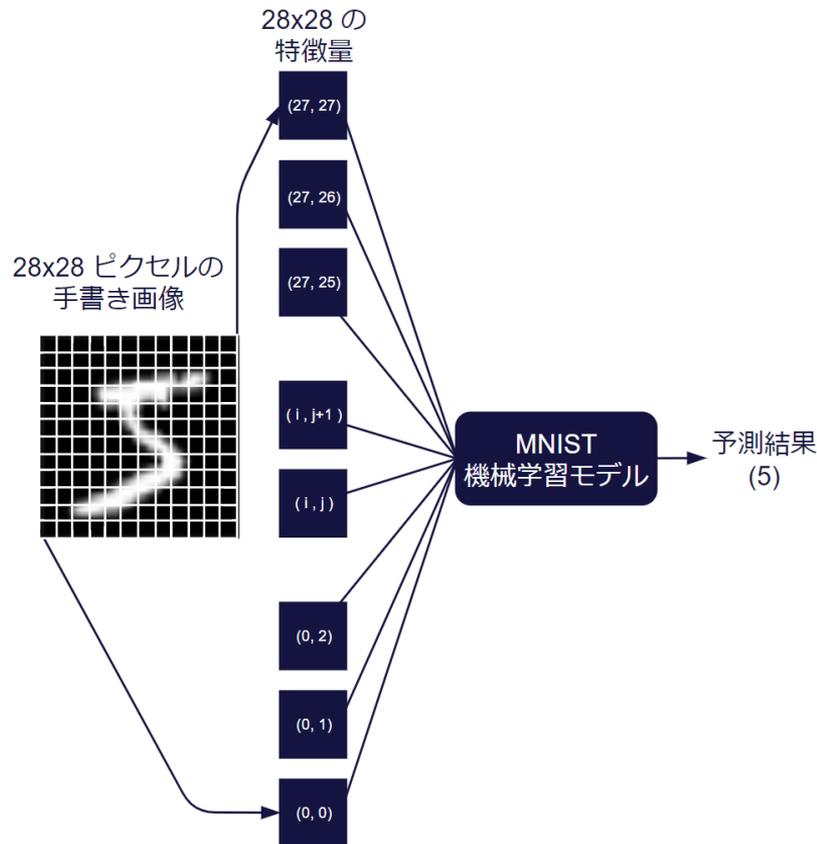
ブラックボックス最適化による機械学習特徴量選択

• MNISTのクラス分け機械学習モデル

- 28 × 28ピクセルの手書き数字画像及びラベル



- 入力：画像 → 出力：数字
- シンプルな MLPモデルの場合、特徴量数は $28^2 = 784$
- 本当に全ての特徴量（ピクセル）が必要か？



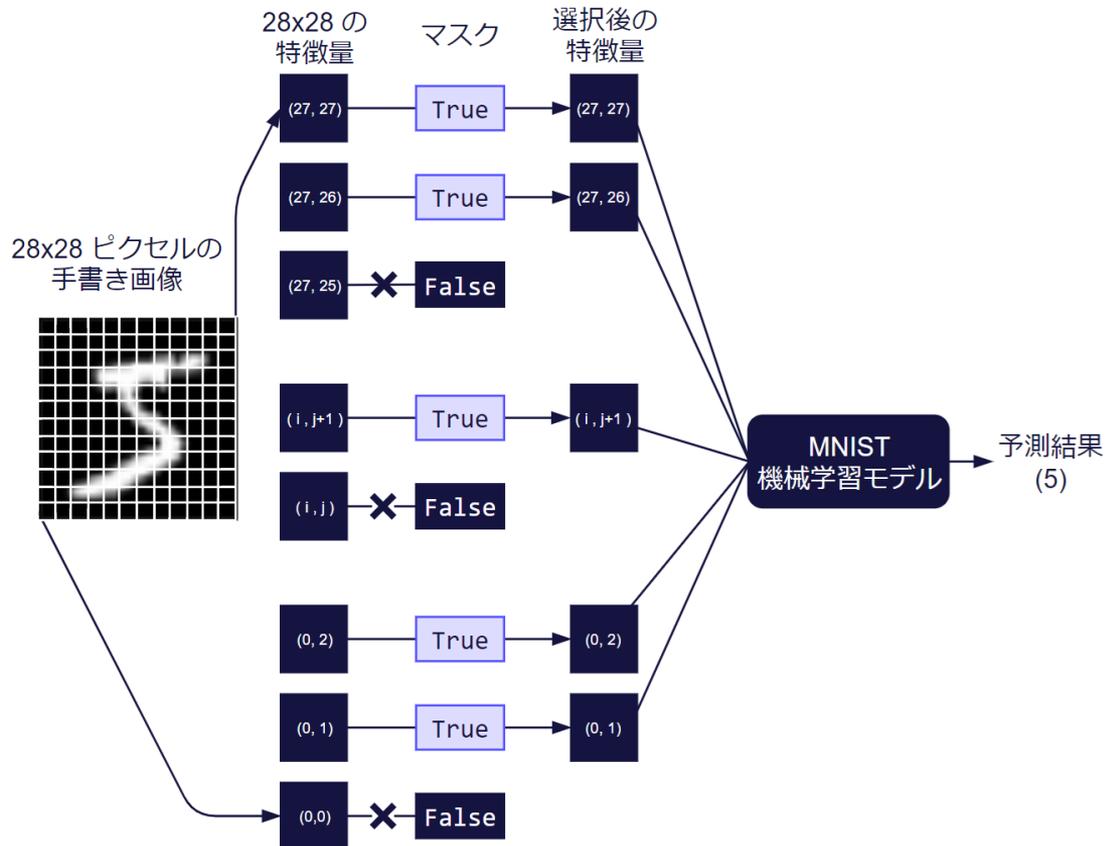
ブラックボックス最適化による機械学習特徴量選択

- 特徴量選択

- 不要な特徴量による悪影響
 - ノイズ
 - 過学習
 - 高学習コスト

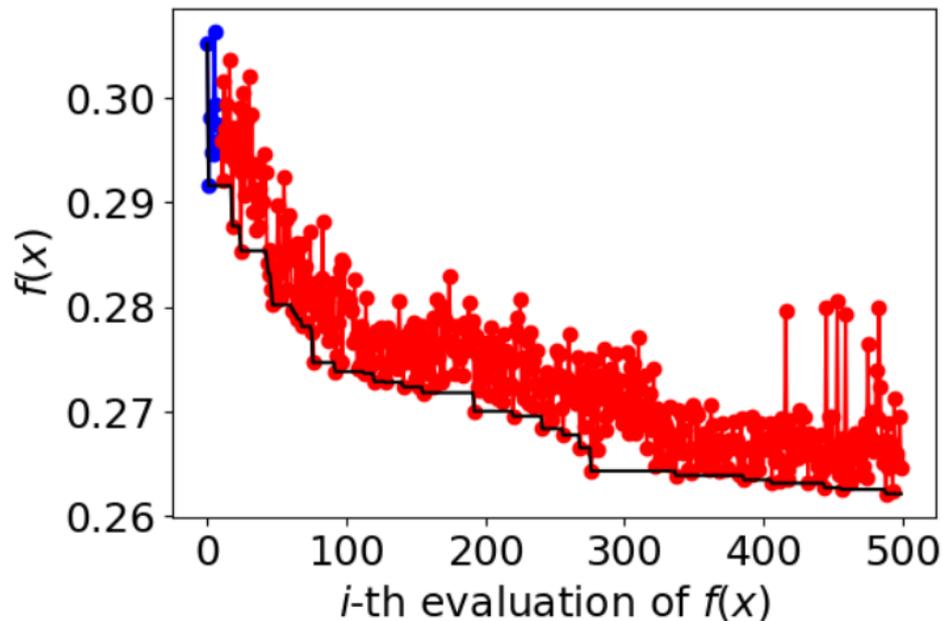
- 最適な特徴量の組み合わせ

- [0, 1] マスクの探索にブラックボックス最適化を使う。



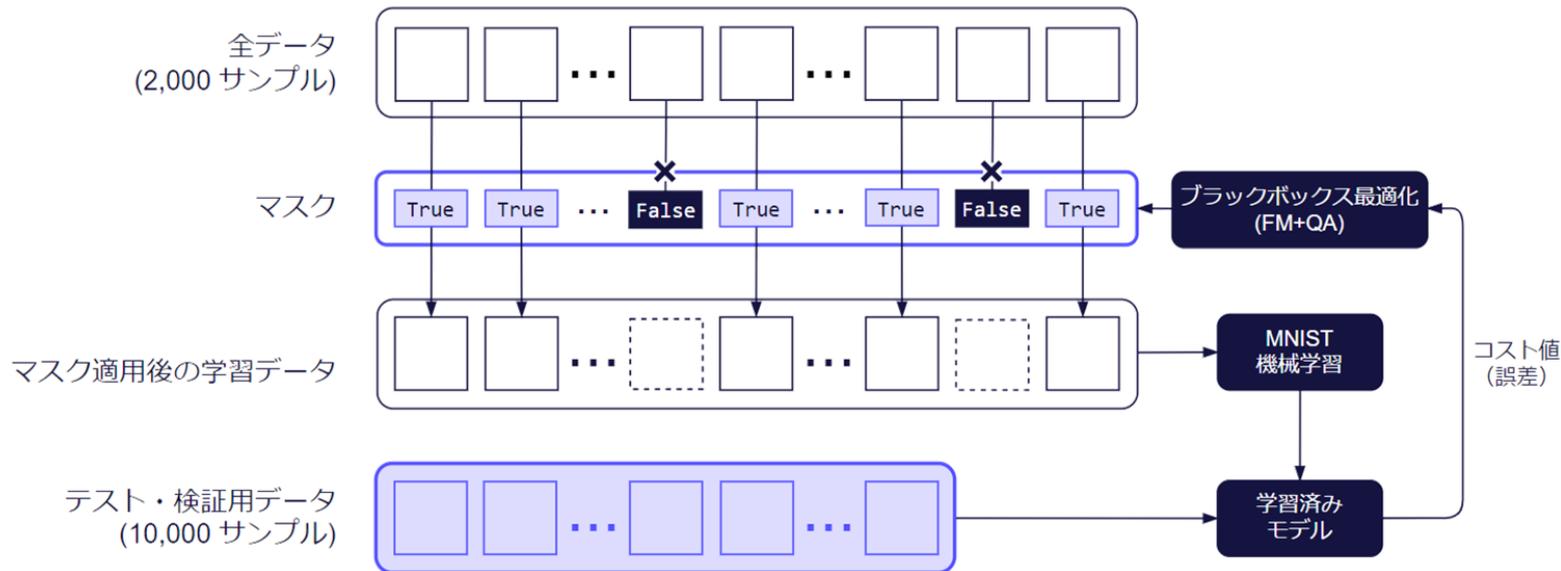
ブラックボックス最適化による機械学習特徴量選択

- 学習パラメータ
 - 学習データ 2,000
 - テストデータ 10,000
 - 特徴量 784 → 588 (25%減)
- FMQA・テスト結果
 - テストデータに対する MSE 誤差
 - 特徴量選択なし : 0.286
 - 特徴量選択あり : 0.262 (8.4%減)



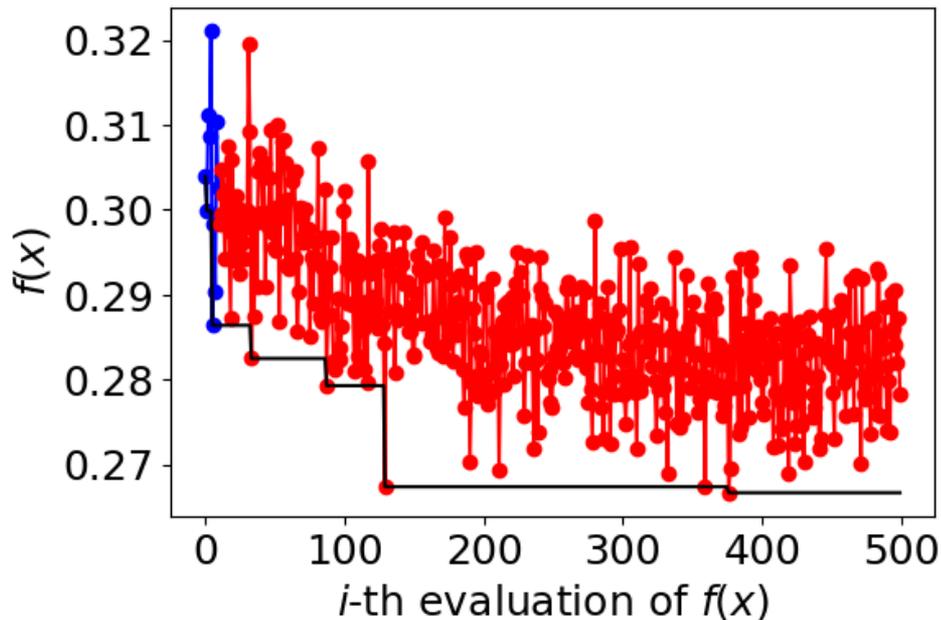
ブラックボックス最適化による機械学習データ選択

- 機械学習データの質
 - ノイズ、不均衡データ、アノテーションエラー



ブラックボックス最適化による機械学習データ選択

- 学習パラメータ
 - 学習データ
2,000 → 1,800 (10%減)
 - テストデータ 10,000
- FMQA ・ テスト結果
 - テストデータに対する MSE 誤差
 - データ選択なし : 0.286
 - データ選択あり : 0.267 (6.6%減)



FMQA に関するよくある質問

- 整数決定変数や実数決定変数にも対応可能ですか？
 - 公開サンプルの翼形状最適化や信号機制御最適化では、整数決定変数や実数決定変数を考慮。
- 決定変数はいくつくらいまで考慮可能ですか？
 - 公開サンプルでは、1,000個程度の決定変数を考慮（AEの性能的にはより大きくてもOK）。FMQAの計算コストは比較的、決定変数に大きく依存しない特徴。
- ベイズ最適化とは何が違うのですか？
 - 獲得関数と獲得関数に対する最適化手法が異なる。
- 多目的最適化に適用可能でしょうか？
 - 単一の目的関数を多目的化する方法や、複数の目的関数で多目的化する方法など様々な方法で可能（次ページ）。

FMQA の発展的な活用方法 (多目的最適化)

- 複数の目的関数や制約条件のそれぞれを FM で求め、得られた係数をまとめて量子アニーリング・イジングマシンを使って最適解を一気に求めることもできます！

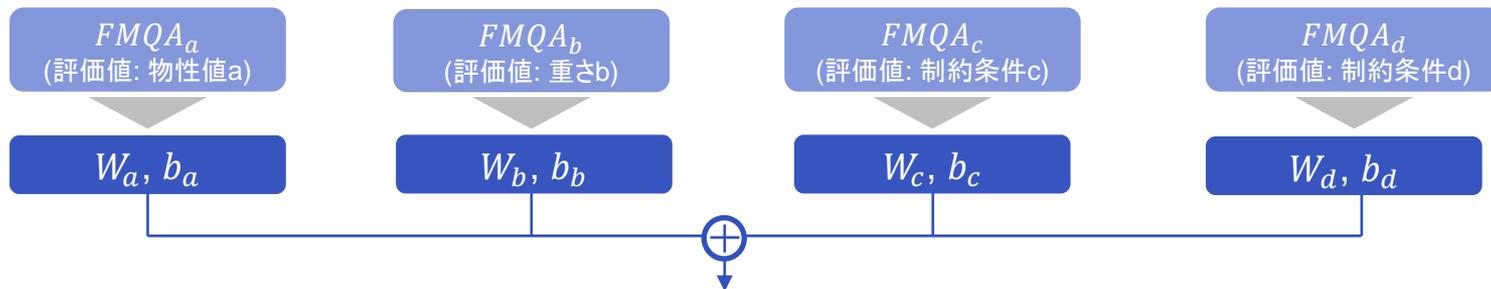
現在は連続値を扱うFMQAや、**多目的最適化を取り扱うFMQA**に関する研究を進めています。・・・中略・・・これらの研究を通じて、FMQAがより複雑で難しい問題にも適用できることを示し、MIやMI以外の領域でもFMQAの活用が進んでいけば嬉しく思います。

インタビュー記事：amplify.fixstars.com/ja/customers/interview/fmqa



津田先生 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 津田 宏治教授)

複数FMによる多目的最適化の概略



$$w_a * FMQA_a(W_a, b_a) + w_b * FMQA_b(W_b, b_b) + w_c * FMQA_c(W_c, b_c) + w_d * FMQA_d(W_d, b_d)$$