

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による機械学習の特徴量選択・コスト削減・精度向上~

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
- 機械学習の特徴量選択ハンズオン
 - 問題の説明
 - FM
 - FMQA
- まとめ

質問は随時 Zoom の Q&A へお願いします



3



(株) Fixstars Amplify の紹介

- 組合せ最適化のための量子コンピューティングクラウド プラットフォーム「Fixstars Amplify」の提供
- 2021年に設立 (株式会社フィックスターズからスピンアウト)
 - 代表取締役社長CEO: 松田 佳希(博士)
- 親会社 (株) フィックスターズ
 - ・ 東証プライム市場上場
 - 約300名の従業員のうち、約9割がソフトウェアエンジニア
 - ソフトウェア高速化プロフェッショナル集団







量子・量子インスパイアード技術

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。量子ゲートを操作。エラー 訂正機能の無いNISQ型実機が クラウド利用可能
- QAOAにより**組合せ最適化問題** (**QUBO**) を取り扱うことが可能
- ■演算規模:~数100ビット

1. 量子 コンピュータ

> IBM Google Rigetti IonQ

2. 量子 アニーリング

D-Wave

3. その他の イジングマシン

Fixstars Amplify TOSHIBA, Fujitsu NEC, HITACHI,

3. その他のイジングマシン

(量子インスパイアード技術)

- ■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) 専用マシン
- ■統計物理学におけるイジング模型に由来。様々な実装により実現。
- ■演算規模:

260,000+ビット (Amplify AE)

2. **量子アニーリング**(量子焼きなまし法式のイジングマシン)

- ■イジングマシンの一種。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。 量子効果を物理的に調整し、自然計算により低エネルギー状態が出力
- 組合せ最適化問題 (QUBO) を扱う専用マシン



■演算規模: ~数1,000ビット Copyright© Fixstars Group

最適化問題の分類

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(q)を最小化するような q を求め

量子アニーリング・イジングマシン

Unconstrained 制約条件なし

二次形

0-1整数 (二値)

計画(最適化)

Quadratic

Optimization

Binary



q: 決定変数

0: 係数



クラウドサービス: Fixstars Amplify

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



1 1 = 2 1 2 3 2 4

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。

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 ジングマシンや数理最適化ソルバー、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。

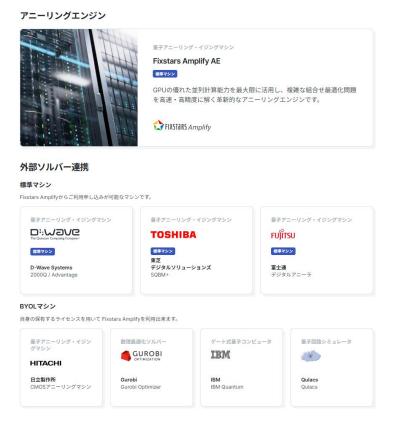
大規模問題の入力と高速実行が可能で、 PoCや実問題を視野に入れたアプリケーション開発が行えます。

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出来ます。



Fixstars Amplify の対応マシンの一例



漂準マシン 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」

活用領域とユースケース(PoC·実稼働)

• 生産計画

• 多品種少量生產、保全計画、設備投資、在庫

• 従業員割り当て

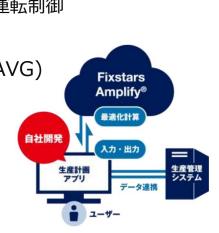
- 食品、輸送、製造
- ・エネマネ
 - ・ エネルギーミックス、装置の運転制御

経路

・ 配送、船舶、無人搬送車 (AVG)

・メディア

- · 最適広告配信
- 研究開発、設計
 - 材料設計
 - ・ 物理シミュレーション
 - ブラックボックス最適化



Copyright© Fixstars Group

Amplify インタビュー 検索



活用領域とユースケース(PoC·実稼働)

Amplify インタビュー 検索

₩ 慶應義塾

一 费用中中研究所

• 生産計画

. 多品種小旱生产 伊全計画 恐慌地咨 左唐

- 従業員書
 - 食品
- 1,000を超える企業、研究所、大学
- ・エネルコ
 - ・ エネルギーミックス、機器の運転制御
- 経路
 - 配送
- ・メディ
 - 最適

1 (意 を超える実行回数 (Amplify AE)

- 研究開発、云山
 - 材料設計
 - ・ 物理シミュレーション
 - ブラックボックス最適化



Copyright© Fixstars Group





アニーリングマシンのプログラミング 体験

イジングマシンの実行手順

ハンズオンセミナーのメイントピック

1. 数理モデル検討

解きたい課題の「目的関数」「決定変数」とその「制約条件」を検討する

2. 定式化

「 多項式」で「目的関数」と「決定変数」を記述 (変換) する 「決定変数」 に対する「制約条件」を Amplify で表現する

3. モデル変換 (論理・物理)

各マシンの仕様や制限に準拠した形式にモデルを変換する (例: 二次項に制約がある場合は「グラフマイナー埋め込み」問題を解く)

4. 入力データの準備

各マシンのSDKやAPI仕様に合わせてQUBO模型 (物理) をデータ化する

5. マシンの実行

マシンを実行して出力の変数値やエネルギー値(コスト値)を解析する上記の逆の手順を**辿り解きたい課題**の「決定変数」を解釈する



Amplify SDK による サポート

Amplifyの基本的な使用方法 (1)

まずはインポート

```
# Install Amplify SDK to Google Colab
! pip install -q amplify

#Import all functions and classes
from amplify import *
```

使用するマシンを選択

その他のクライアントを使用する場合はドキュメントを参照

https://amplify.fixstars.com/ja/doc s/amplify/v1/clients.html



Amplifyの基本的な使用方法 (2)

- ・目的関数の定式化 (多項式)
 - バイナリ多項式の構築

```
# 決定変数生成器を作成
g = VariableGenerator()

# 長さ 2 の決定変数配列を作成
q = g.array("Binary", 2)
```

式の構築

```
f = 2 * q[0] * q[1] + q[0] - q[1] + 1
print(f)
# 2 q_0 q_1 + q_0 - q_1 + 1
```



Amplifyの基本的な使用方法 (3)

• モデルの作成とマシンの実行

```
model = Model(f)
result = solve(model, client)
```

目的関数と制約条件からモデルを作成し 使用するクライアントと共に求解

• 結果の取得

```
print(f"objective = {result.best.objective}")
# objective = 0.0

print(f"q = {q.evaluate(result.best.values)}")
# q = [0. 1.]
```

最良解を `best` で指定 目的関数の値を `objective` にて 変数の値を `values` で得る



Amplify SDK によるプログラミング例

```
from amplify import *
# 決定変数を生成
g = VariableGenerator()
q = g.array("Binary", 2)
#目的関数を構築
f = 2 * q[0] * q[1] + q[0] - q[1] + 1
# Amplify モデルを構築
model = Model(f)
#ソルバーの設定
client = AmplifyAEClient()
client.parameters.time limit ms = 1000 #ms
# 求解の実行
result = solve(model, client)
# 結果の表示
print(f"objective = {result.best.objective}")
print(f"q = {q.evaluate(result.best.values)}")
```

1. 定式化

- 決定変数:スカラーあるいは配列型
- 目的関数:決定変数による数式処理
- 制約条件:制約条件の構築及び管理

2. ソルバークライアントの選択

- ソルバークライアントオブジェクトの構築
- ほぼ全てのパラメータの設定が可能

3. ソルバーを実行

- 論理モデルをハードウェアのスペック等に 合わせたモデルに変換
- 適切なモデル変換・定式化手法を選択

4. 解の取得

• マシンの出力解を逆変換し決定変数の形式で出力

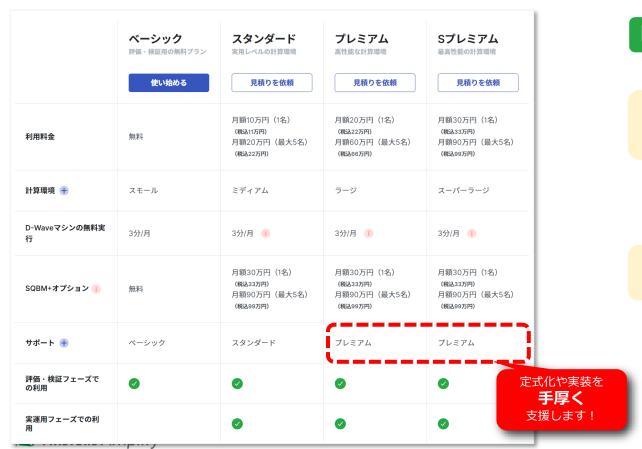


Copyright© Fixstars Group 17



料金のご紹介

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



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

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フ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ト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、動 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きます。

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。



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



Copyright© Fixstars Group 20



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)



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/

利用可能なすべての量子アニーリング・イジングマシン、数理最適化ソルバー
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を入手
ドキュメントを見る →

FIXSTARS Amplify

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/1-Jh2nlhWO97OO96WgBwCSOQmP8BVa6-T (※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。

- 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)
```







「数の分割問題」のハンズオン



数の分割問題

• 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ようできるか?

• 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





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} \(\) {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 $\rightarrow 2^{10} = 1024$ 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イジング変数 s_i で表す

- $a_i = \{ 2,10, 3, 8, 5, 7, 9, 5, 3, 2 \}$
- $s_i = \{-1, 1, -1, 1, -1, -1, 1, 1, 1\}$ (例)

数理モデル

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

 $\sum s_i a_i$ は、自然と $\{ \llbracket 1 \rrbracket$ の集合の和 $\} - \{ \llbracket -1 \rrbracket$ 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

$$f = \begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{N-1} s_i a_i \end{vmatrix}$$
 $(s_i \in \{-1, +1\})$
$$\begin{cases} \sum s_i a_i \text{ は、自然と} \\ \{[1]] \text{ の集合の和}\} - \{[-1]] \text{ の集合の和}\} \\ \text{となる!} \end{cases}$$

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

絶対値を二次式で表す

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

±1をバイナリ変数で表す



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

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

数の分割問題(プログラムコード)

サンプルコード:

https://colab.research.google.com/drive/1hY1VDDaHT IW6kJX-WSipAPYK8UB2Ko8c

• 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))
```

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

1. 定式化

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

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

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





プリを開発します。

サンプルコード



チュートリアル応用幅

ブラックボックス最適化 (1)

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額

ブラックボックス最適化 (2)

プログラミング酵脳度 ★ ★ ★ 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、疑似的な高温超電導 を実現する材料探索を取り扱います。

サンブルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (3)

プログラミング開幕度 🛊 🍁 🍁 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



サンプルコード

ブラックボックス最適化

プログラミング開発度 🍁 🍁 🍁 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 クポックス最適化と流体シミュレーショ ンを用い、翼の揺抗比を最大化するよう に翼型の探索を行います。



デモアプリケーション

容量制約つき運搬経路問題 (CVRP)

プログラミング製品度 🍁 🍁 🍁 運送業における効率的な配送計画の策定 やごみ収集や道路清掃における訪問順序 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

デモアブリ

サンブルコード



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化 (5) プログラミング器品度 会 会 会

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。交通光準を低減するような信息機 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。

サンブルコード



定式化による交通信号機の 最適化

プログラミング製品度 食 食 食 都市における渋滞を最小化するために、 刻一刻と変化する交通状況に応じ、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

デモアブリ



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 プログラミング部吊痕 🛊 🛊 🛊

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 が分かっているとします。それぞれのジ ョブをいずれ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









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

通常の組合せ最適化

- 課題に対し、2次定式化 (QUBO) を実施
 - 数の分割 $f = [\Sigma(2\mathbf{q}_i 1)a_i]^2$
 - ・ 生産計画最適化 $f = \Sigma \Sigma \left(\Sigma a_i p_i q_{m,i,t} + \Sigma \Sigma b_i s_i q_{m,i,t} q_{m,i-1,f} \right) \cdots$
 - TSP問題(お遍路巡り最短経路探索) $f = \Sigma \Sigma \Sigma d_{i,j} q_{n,i} q_{n+1,j} \cdots$
- 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)

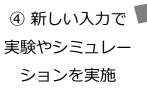
ブラックボックス最適化

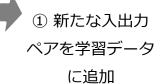
- ・直接の定式化が困難な問題
 - 例:低損失な流体デバイス形状の同定(シミュレーション・実験)
 - 例: 空間計測誤差を最小とする複数の計測 装置の最適配置
 - 例:ターゲットのシミュレーション結果に近い出力を実現するシミュレーション条件
- ・最適化の実施
 - 繰り返しの実験シミュレーションによる試行錯誤



ブラックボックス最適化のフロー

逐次最適化:最適化サイクルの実施







③ モデル関数に基 づき最適入力候補 を取得(最適化)



② 学習データに基づきモデル関数を構築

東大津田先生率いる研究グループ FMOA Kitai, et al., *Phys. Rev. Res.* (2020)

- ・ モデル関数 → FM
- ・ 最適化 → QA

*Quadratic-optimization Annealing

FMQAの特徴:



- 高次元の最適化問題に強い!⇔ 次元の呪い
- □ 制約条件にも強い!



34

モデル関数としての Factorization Machine (FM)

• モデル関数 g(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 x に対する2次式での記述ができる。

$$g(\mathbf{x}|\mathbf{w}, \mathbf{v}) = w_0 + \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle + \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j$$

$$= w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{f=1}^k \left(\left(\sum_{i=1}^n v_{if} x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n v_{if}^2 x_i^2 \right)$$

$$\Rightarrow \mathbf{QUBO} \vec{\mathbf{x}}$$

- k はハイパーパラメータ、w 及び 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。

K. Kitai, et al., Phys. Rev. Res. <u>(2020)</u>. T. Inoue, et al., Opt. Express <u>(2022)</u>.



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: 活用例 (Amplify サンプルプログラム)

Amplify デモ

検索



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化

プログラミング雑易度 🛊 🛊 🏚

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

材料最適化

FMQA

物理モデル

FIX5TaRS Amplify



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化

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

化学プラント 運転条件最適化

FMQA 化学シミュレーション



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化

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

翼形状最適化

FMQA

流体シミュレーション



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化

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、交通渋滞を低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

信号制御最適化

FMOA

マルチ・エージェン ト・シミュレーション



チュートリアル応用編

ブラックボックス最適化

プログラミング難易度 🎓 🎓 🍲

ブラックボックス最適化により、撹拌性 能に影響を与える設計パラメータに対し て、混合効率が最大化されるような撹拌 機の最適設計を実施します。最適化の実 施および評価には、濃度分布に基づく簡 易的な撹拌シミュレーションを用いま

サンプルコード

機器設計最適化

FMQA

撹拌シミュレーション

Copyright@ Fixstars Group

FMQA: 活用例 (Amplify ユーザー)

• 活用領域

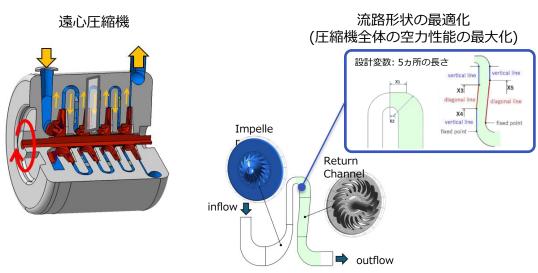
• 化学、創薬、食品、自動車、電機、通信、重工、エネルギー、ヘルスケア・・・

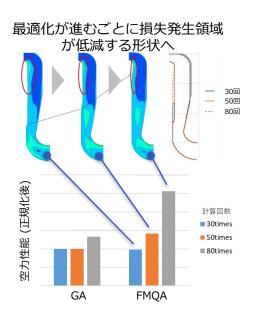




事例: ターボ機械の形状最適化 (川崎重工業様)

- 従来より遺伝的アルゴリズム (GA) により形状最適化を行うことが多かった。規模が大きくなると求解までに時間がかかり、開発期間が長期化するといった課題があった
- FMQA により、従来手法と比べ、**同じ計算回数でもより優れた解が得られる**ことを確認。







事例: 車両設計最適化(マツダ様)

- 車体設計の複数車種同時最適化問題。実数変数200以上の大規模問題。
- 車体の軽量化と共通部品数の最大化の実現(衝突性能・製造制約などの制約を満たした上で)
- 国内外研究グループ*1,2 により様々な手法が試されてきており、1~3万回程度の試行により、ある程度良い 解が見つけられることは確認されていた

• FMQA により、**1,000回 (3%) 程度の試行** で、従来手法と同等以上の解を見つけることに成功!

^{*2} Multi-objective Bayesian optimization over high-dimensional search spaces





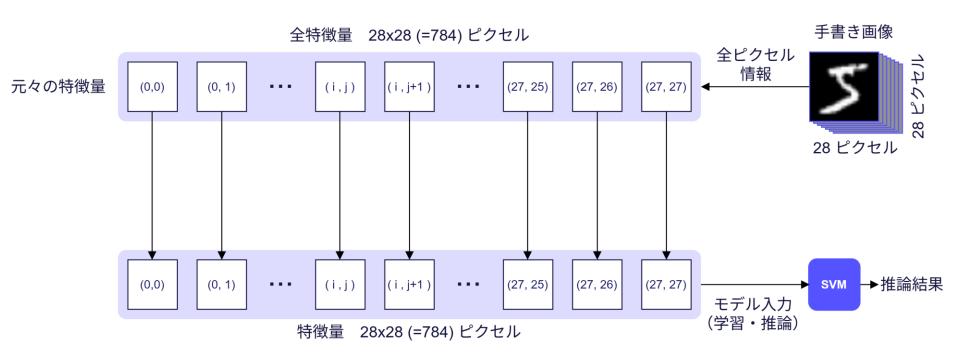
^{*1} 進化計算コンペティション2017開催報告



ブラックボックス最適化

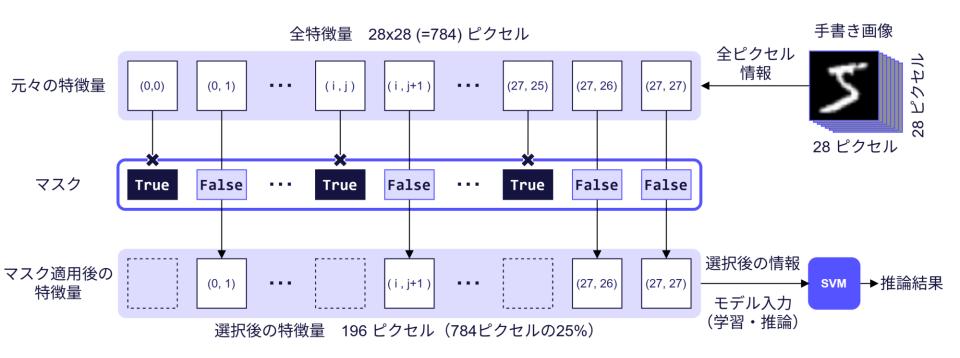
- 1. 機械学習 (FM) ハンズオン
- 2. FMQA ハンズオン

SVMによるMNIST画像認識モデル





SVM画像認識モデルの最適特徴量選択



最適なマスクを探索し、軽く、正解率が高いSVMを目指したい!



Copyright© Fixstars Group 43

画像認識モデルの特徴量選択・最適化フロー

ブラックボックス目的関数





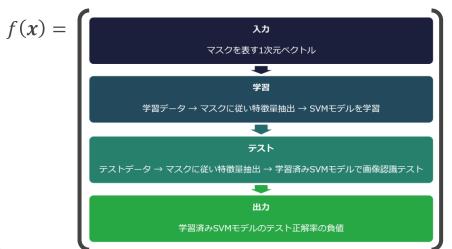
ブラックボックス最適化のデモプログラム:機械学習 (FM)

ブラックボックス関数を予測するFMモデル

『マスク』を入力とし、『マスクに従って削減された特徴量に基づく SVM モデルの精度』を出力する

問題設定

マスクを x とすると、ブラックボックス関数 f(x) は、



最適化サイクル

- 1. 学習データからモデル関数 g(x) を構築 (FM)
- 2. モデル関数 g(x) が最小となる点 \hat{x} を推定 (QA)
- 3. 評価結果 $(\hat{x}, f(\hat{x}))$ を学習データに追加

↑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 x の推定が期待される



FMデモプログラム 1/6 (SVMクラスの実装)

```
PIX SIZE = 28 # 画像1辺のピクセルサイズ
class MnistSvm:
   def __init__(
       self, mask ratio: float, train size=1000, test size=1000, seed=0
   ) -> None:
       """与えられたマスク率に応じてクラスを初期化"""
       self._data, self._label = datasets.fetch_openml("mnist_784", version=1, return X y=True, parser="auto")
       self. num features = len(self. data.columns) # 特徴量の数
       self. num masked features = int(self. num features * mask ratio) # マスクする特徴量の数
   def generate_random_mask(self) -> np.ndarray[bool, Any]:
       """マスク率を満たすマスクをランダムに牛成"""
       mask = [True] * self.num masked features + [False] * (self. num features - self.num masked features)
       self._rng.shuffle(mask)
       return np.array(mask)
   def train eval(self, mask: np.ndarray[bool, Any]) -> float:
       """マスク適用後のデータに基づき機械学習を行い、学習後のモデル評価を実施、モデルの正答率を返却"""
       self. mask = mask
       train data, test data, train label, test label = self. fetch masked data()
       self. train(train data, train label)
       pred = self._eval(test_data, test_label)
       return pred
```

- __init_
 - 引数のマスク率に応じてクラスを初期化
 - _num_features: 特徴量の総数 (28x28=784個)
 - _num_masked_features: マスクする特徴量の数
- generate_random_mask
 - マスク率を満たすマスクをランダムに生 成する関数
- train_eval
 - 与えられたマスクに基づく特徴量で学習を行い、得られたモデルを評価し、モデルの正答率を返却する関数。



46

FM デモプログラム 2/6 (ブラックボックス関数の定義)

関数の利用例:

```
● # マスク率 75% を考慮する MnistSvm クラス
mnist_svm = MnistSvm(mask_ratio=0.75)

blackbox_func = make_blackbox_func(mnist_svm=mnist_svm)

# [True, ..., True, False, ... False] であるようなマスク率 75%のマスク
test_mask = np.array([True] * 588 + [False] * 196)

# 上記のマスクを与えた場合のSVMモデルの正解率 (の負値)
print(f~{blackbox_func(test_mask) = }~)
```

- make_blackbox_func: ブラックボックス関数を生成する関数
 - blackbox_func: MnistSvm.train_eval
 から返却される正答率を(-1)倍して返却
 - →つまり、ブラックボックス関数からの返却値は、 学習済みSVMモデルのテストデータに対する 正答率の負値

- マスク率75%を考慮する場合のブラックボックス関数
 - 特徴量588個をマスク、それ以外 (196個)を SVMで考慮

ars Group 47

FM デモプログラム 3/6 (FMの定義)

```
class TorchEM(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

$$f(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{w},\boldsymbol{v}) = w_0 + \sum_{i=1}^d w_i x_i + \frac{1}{2} \left[\sum_{f=1}^k \left(\sum_{i=1}^d v_{if} x_i \right)^2 - \sum_{f=1}^k \sum_{i=1}^d v_{if}^2 x_i^2 \right]$$
out_guadratic

48

FM デモプログラム 4/6 (FMの学習)

```
def train(x: np.ndarray, y: np.ndarray, model: TorchFM, plot learning curve=False):
   # イテレーション数
   epochs = 2000
   # モデルの最適化関数
   optimizer = torch.optim.AdamW([model.v, model.w, model.w0], Ir=0.3)
   # 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 range(epochs):
       # 学習フェイズ
       for x_train, y_train in train_loader:
          optimizer.zero_grad()
          pred y = model(x train)
           loss = loss_func(pred_y, y_train)
           Lose backward()
```

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 5/6 (教師データ作成)

```
def init training data(n0: int, mnist sym: MnistSym, blackbox func: Callable[[np.ndarray], float]):
   """nO 組の初期教師データを作成する""
   assert n0 < 2**problem size
   # n0 個のマスクを乱数を用いて作成
   x = np.array([mnist sym.generate random mask() for in range(n0)])
   # マスク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, mnist_svm.generate_random_mask()))
      x = np.unique(x, axis=0)
   # blackbox 関数を評価して入力マスクに対応する nO 個の出力を得る
   y = np.zeros(n0) + 1e10
   for i in range(n0):
      start = time.perf counter()
      y[i] = blackbox func(x[i])
       print(
          f"Random process {i}: found y={y[i]:.4f}, current best=[np.min(y):.4f}, "
          f"cycle elapsed time={time.perf_counter()-start:.2f}s"
   return x, y
```

教師データを乱数により生成

- mnist_svm: MnistSvmクラスインスタンス
- n0:初期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 6/6 (メイン部分)

n0 = 20 # 初期教師データの数
x, y = init_training_data(n0, mnist_svm, blackbox_func)
機械学習モデルの作成
model = TorchFM(problem_size, k=20)
train(x, y, model, 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。

サンプルプログラム:

https://colab.research.google.com/drive/1jxnlga79dzwB4Xi9uCQ5MbLKTqamW0t3

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)

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:FMQA

FMQAによる画像分類モデルのための最適特徴量選択

問題設定

マスクを x とすると、ブラックボックス関数 f(x) は、



最適化サイクル

- 1. 学習データからモデル関数 g(x) を構築 (FM)
- 2. モデル関数 g(x) が最小となる点 \hat{x} を推定 (QA)
- 3. 評価結果 $(\hat{x}, f(\hat{x}))$ を学習データに追加

↑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 x の推定が期待される



53

FMQA デモプログラム 1/3 (アニーリング部分)

```
# ソルバークライアントを Amplify AE に設定
client = FixstarsClient()
client.parameters.timeout = timedelta(milliseconds=5000)
client.token = token # ローカル環境等で実行する場合はコメントを外して Amplify AEのアクセストークンを
def anneal (
   torch model: TorchFM,
   constraint: Callable[[PolyArray], Constraint],
) -> np.ndarray:
   """受け取った FM モデルの最小値を与える x を求める"""
   # 長さ d のバイナリ変数の配列を作成
   gen = VariableGenerator()
   x = gen.array("Binary", torch model.d)
   # TorchFM からパラメータ v, w, wO を取得
   v, w, w0 = torch model.get parameters()
   # 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
   # 組合せ最適化モデルを構築
   amplify model = Model(objective, constraint(x))
   # 最小化を実行(構築したモデルと、始めに作ったソルバークライアントを引数として渡す)
   result = solve(amplify model, client)
   if len(result.solutions) == 0:
       raise RuntimeFrror(f"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モデルに基づき â を推定する関数

- 決定変数配列の作成
- 学習済みFMモデルからパラメータ(重み・バイアス)を取得
- パラメータに基づき目的関数のサロゲートモデル g(x) を作成
- サロゲートモデルを制約条件(後述)と合わせて amplify.Modelを作成
 - 単に、objective + constraint(x) でも良い
- amplify.solve によりアニーリングを実行
- このサイクルにおける x を返却

FMQA デモプログラム 2/3 (制約条件の設定)

def get_constraint(q: PolyArray) -> Constraint:

マスクされる特徴量は mnist_svm.num_masked_features 個という制約条件を 返却する関数。制約条件の重みとして 2 を選択。制約条件の重みについては、 https://amplify.fixstars.com/ja/docs/amplify/v1/constraint.html#id8 を参照。

return 2 * equal_to(q.sum(), mnist_svm.num_masked_features)

get_constraint(q)

最適マスクを決定する決定変数 x に基づく以下の制約条件を返却する関数

制約条件

• $\sum_{i=0}^{n} x_i = \text{mnist_svm.num_masked_features}$



FMQA デモプログラム 3/3 (メイン部分)

```
# N 回のイテレーションを実行
for i in range(n):
   print(f"FMQA cycle {i}")
   # 機械学習モデルの作成
   model = TorchFM(problem size, k=20)
   corrcoef = train(x, y, model)
   print(f"- corrcoef: {corrcoef:.2f}")
   # 学習済みモデルの最小値を与える入力ベクトルの値を取得
   x hat = anneal(model, get constraint)
   # x hat が重複する場合、それに近い解を乱数に基づき生成する
   while (x hat == x).all(axis=1).any():
       idx 0 = rng.choice(np.arange(problem size))
       idx 1 = rng.choice(np.arange(problem size))
       x hat[idx 0], x hat[idx 1] = x hat[idx 1], x hat[idx 0]
   # 推定された入力ベクトルを用いてブラックボックス関数を評価
   y hat = blackbox func(x hat)
   # 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)
   print(f'' - found y = \{y hat: .4f\}, current best = \{np.min(y): .4f\}''\}
```

- 1. train() による FM モデルの学習
- 2. anneal() によるアニーリング
 - FM モデル値を最小化するような入力値(マスク)を探索
- 3. 得られた入力値(マスク)が既存の場合の処理
- 4. 得られた入力値(マスク)によるブラックボックス関数の評価
 - マスク適用後の学習データを使ってSVMモデル学習
 - マスク適用後のテストデータを使ってSVMモデル評価
 - 下答率の負値を返却
- 5. 新しい入出力ペアをデータセットに追加

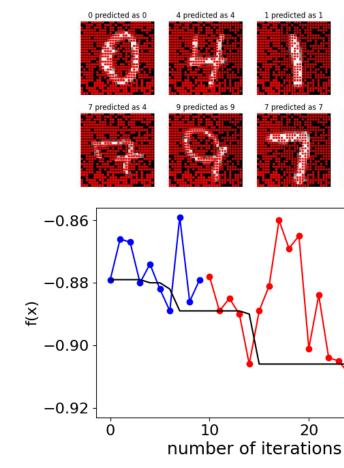


FMQA デモプログラムの実行

サンプルプログラム:

https://colab.research.google.com/drive/1vuMG8aSOpnf OviNa1e0o005GgP Mwisr

- 全特徴量 (784個) を考慮した場合のモデル評価
 - accuracy score=0.905
- FMQA の基本条件
 - 初期データ個数:10個
 - FMQAの最適化サイクル数: 20回
 - 特徴量:784個→196個(75%減)
- 実行時間
 - およそ5分



(上) 最終的に得られたマスクをいくつかの手書 き画像に重ねた例と(下)最適化の履歴

20

1 predicted as 1

7 predicted as 7

2 predicted as 2

1 predicted as 1



FMQA デモプログラムの実務での活用方法

```
def make blackbox func(mnist sym: MnistSym) -> Callable[[np.ndarray], float]
   def blackbox(x: np.ndarray) -> float:
      assert x.shape == (problem size,) # x は要素数 28*28 の一次元配列
      return -mnist sym.train eval(
      ) # ブラックボックス関数として、モデルの正解率の負値を返却
   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 の組合せを元に実験を実施
      # 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() 内で特徴量選択ではなく、枝刈りやデータ選択、ハイパラチューニング等を実施し、学習済みモデルの評価結果が最適になる様に手法を調整
- 例②: 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③: 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 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。



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

巡回セールスマン問題

プログラミング部系度 ☆ ☆ ☆

マン問題の定式化を体験します。

Fixstars Amplifyによる、巡回セールス

ブラックボックス最適化問題

目的関数のみで 定式化

チュートリアル基礎細

ンを開発します。

サンプルコード

画像のノイズ除去

プログラミング離易度 🚖 🊖

画像のノイズ除去を行うアプリケーショ



会議室割当問題

プログラミング問島度 ★ ★

リケーションを開発します。

サンプルコード

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ブ

目的関数 + 制約条件







概要





サンブルコード



チュートリアル応用器

サンプルコード

ブラックボックス最適化





信号機制御

プログラミング部基度 ★ ★ ★ プログラミング部局度 🛊 🏚 🋊 流体機器設計に不可欠な質型の最適化問 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 題を取り上げます。最適化には、組み合 ける、交通渋滞を低減するような信号機 わせ最適化及び機械学習に基づくブラッ 群の最適制御を実施します。最適化の実 クポックス最適化と流体シミュレーショ ンを用い、翼の揺抗比を最大化するよう 施及び実証には、マルチ・エージェン に異型の探索を行います。 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。

サンブルコード





https://amplifv.fixstars.com/docs/amplifv/v1/index.html

サンブルコード



59 Copyright© Fixstars Group

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!

2025/11/20 「ブラックボックス最適化 (機械学習)」

- ・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

2025/12/4(受付中) 「Amplify-BBOpt 技術解説」

- ・はじめに
- ・会社紹介
- ・Fixstars Amplifyのご紹介
- ・Amplify-BBOpt 技術解説
- Wrap Up
 - ・事例のご紹介
 - ・今後の進め方
 - · Q&A

2025/12/18 (受付準備中) 「経路最適化 |

(Annealing Engine)

- ・はじめに
- ・会社紹介
- ・Fixstars Amplifyのご紹介
- ・経路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

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://amplifv.fixstars.com/ia/contact



60



Q&A

