

大規模ブラックボックス最適化（BBO）のための イジングマシン活用：実用性と課題

Fixstars Amplify

源 勇氣

Fixstars Amplify

無料で利用スタート

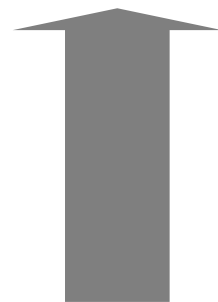
組合せ最適化のための量子コンピューティング・プラットフォーム

- **開発環境 Amplify SDK**
簡単・最速な組合せ最適化アプリ実装
(Python)
- **実行環境 Amplify AE**
GPUクラウド上で実行されるイジングマシン
(リファレンスマシン)

全結合問題 : **131,072** ビット

疎結合問題 : **262,144** ビット

 **FIXSTARS Amplify AE**



 **FIXSTARS Amplify SDK**



種々の組合せ最適化問題 (例 : QUBO)

Fixstars Amplify

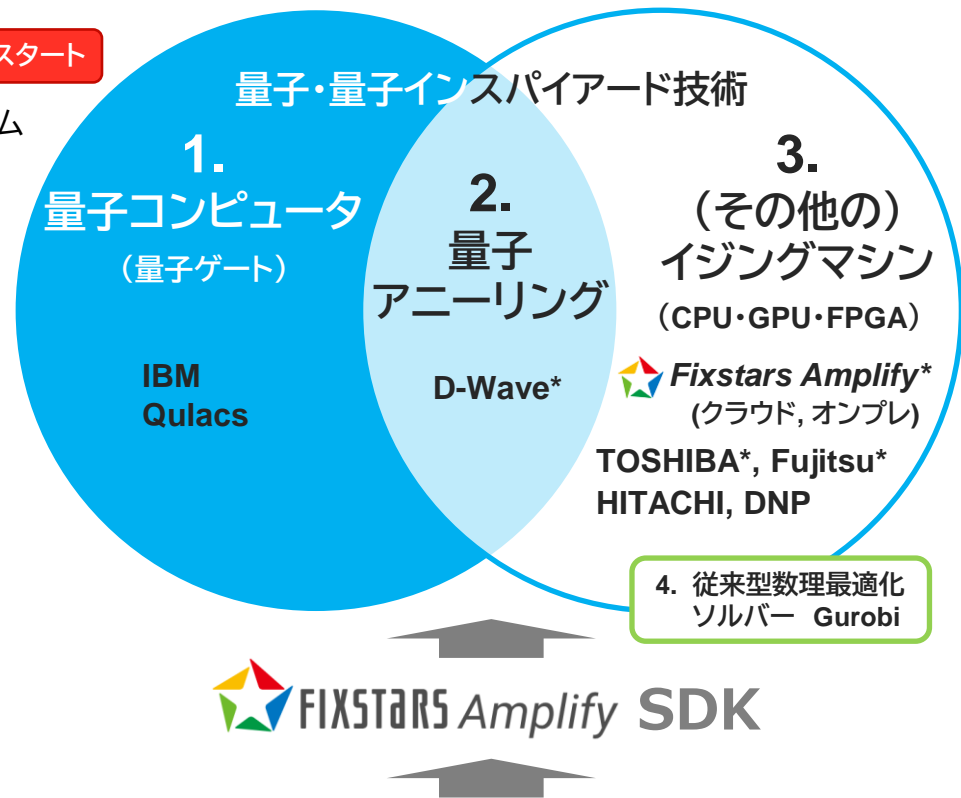
無料で利用スタート

組合せ最適化のための量子コンピューティング・プラットフォーム

- **開発環境 Amplify SDK**
簡単・最速な組合せ最適化アプリ実装
(Python)
- **実行環境 Amplify AE**
GPUクラウド上で実行されるイジングマシン
(リファレンスマシン)

全結合問題 : **131,072** ビット

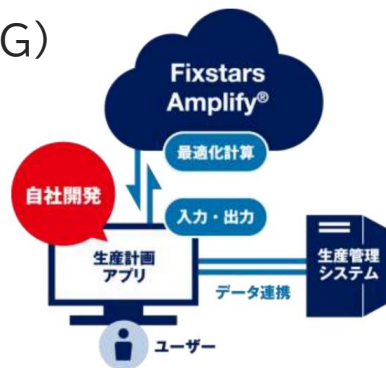
疎結合問題 : **262,144** ビット



種々の組合せ最適化問題 (例 : QUBO)

活用領域とユースケース（PoC・実稼働）

- 生産計画
 - 多品種少量生産、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



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）

BBO以外のQuantum CAE事例①

イジングマシン (Amplify AE) 活用の移流拡散シミュレーション

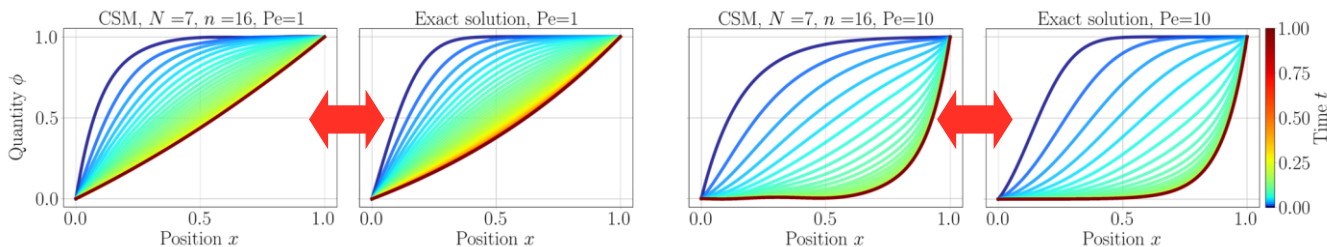
K. Takagi et. al., *Fluid Dyn. Res.* 56:061401 (2024)

慶應大 深潟先生、村松先生

産総研 遠藤さん

離散化&線形化

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad \rightarrow \quad Ax - b = 0 \quad \rightarrow \quad x = \operatorname{argmin}_x |Ax - b|^2$$



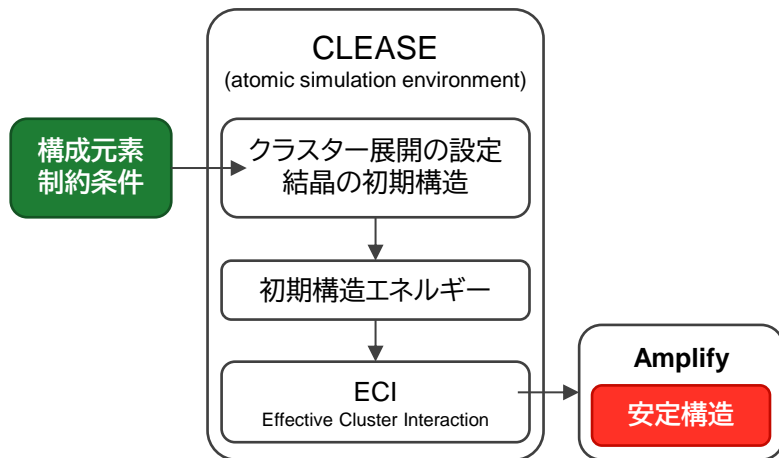
活用領域とユースケース（PoC・実稼働）

BBO以外のQuantum CAE事例②

近日公開予定！

Amplify を用いた合金構造最適化

CLEAVE による原子分子シミュレーション利用により、結晶の構造エネルギーをクラスター展開し、定式化→安定構造の探索



チュートリアル応用編

Amplifyによる合金構造最適化

プログラミング難易度 ★★★★★

本プログラムでは、Amplifyと結晶構造を算出するライブラリを併用することで、Au-Cu合金の安定構造を計算します。

通常の組合せ最適化とブラックボックス最適化 (BBO)

通常の組合せ最適化

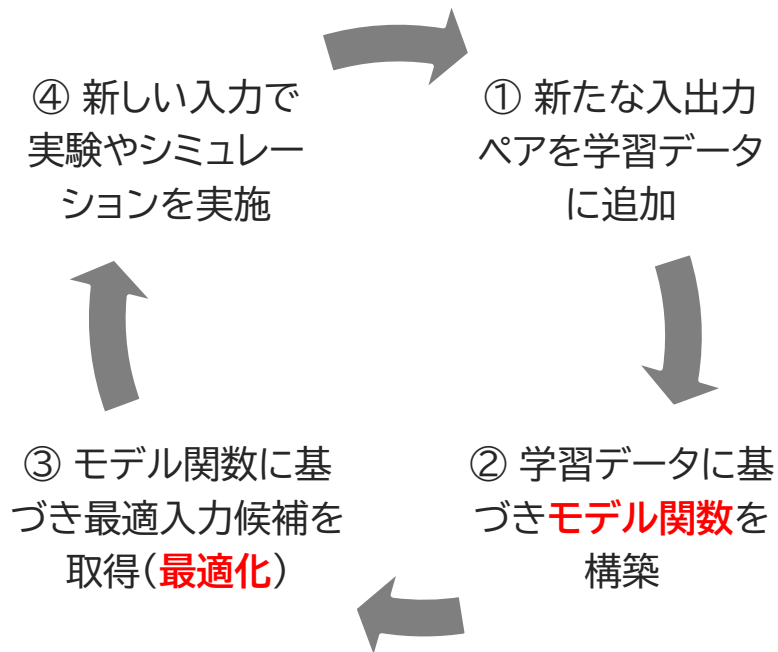
- 目的関数を定式化(例:2次2値形式)
 - 生産計画(メイクスパン最小)
$$f = \sum \sum \sum (P_i q_{t,m,p} + \sum S_{p,r} q_{t,m,p} q_{t,m,r}) \dots$$
 - 経路最適化(経路距離最小)
$$f = \sum \sum \sum d_{i,j} q_{n,i} q_{n+1,j} \dots$$
- 最適化の実施
 - イジングマシンにより定式化された目的関数を最小化

ブラックボックス最適化 (BBO)

- 直接の定式化が困難な目的関数
 - 低損失な流体デバイス形状？
 - 高性能な材料/構造トポロジー？
- 最適化の実施
 - 実験やシミュレーションの試行錯誤により、定式化不可な目的関数を最小化

BBOのフローとQA-BBO

● 逐次最適化：最適化サイクルの実施



● QA-BBO

FMQA Kitai, et al., *Phys. Rev. Res.* (2020)

- **モデル関数** → FM ※
- **最適化** → QA

Kernel-QA Minamoto & Sakamoto, arXiv:2501.04225

- **モデル関数** → Kernel model ※
- **最適化** → QA



高次元の最適化問題に強い！

※ 2次多項式形式のモデル。バイナリ化により2次以上の関数形も表現可

† BOCSもQA-BBOだが、高次元向け、とは必ずしも言えないので、今回は取り上げない

QA-BBO: 活用例 (Amplify サンプルプログラム)

Amplify demo

検索



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導入



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



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

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 (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、翼の揚力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 (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

FMQA

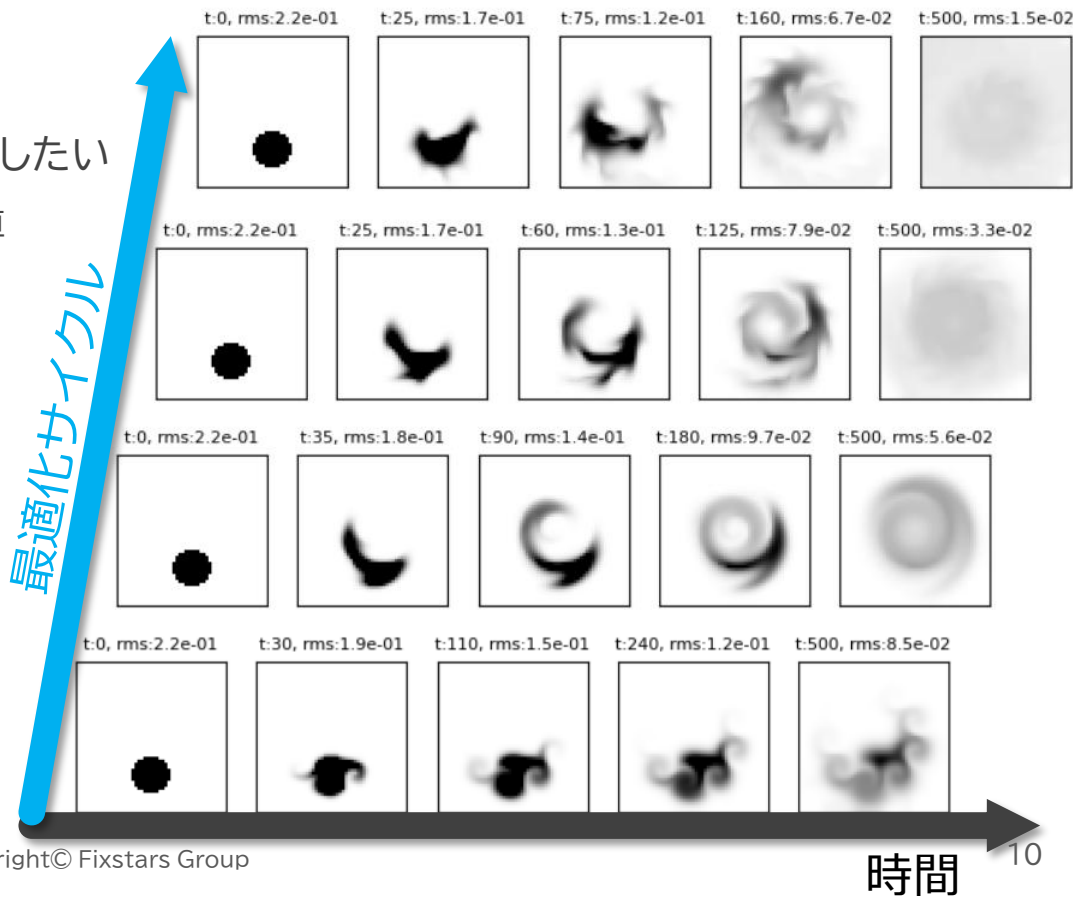
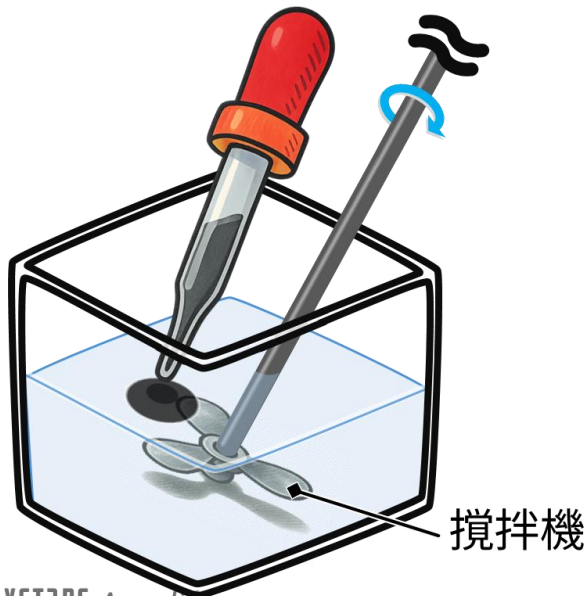
×

マルチ・エージェント・シミュレーション

QA-BBO: 活用例 (Amplify サンプルプログラム)

近日公開予定!

- 攪拌機器の設計・運転最適化
 - 短時間でできるだけ均一に攪拌したい
 - ✓ 目的関数: 物質濃度の空間変動値



QA-BBO: 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・・・

非線形現象の逆
問題

機械学習：
コスト↓精度↑

設計開発におけ
る部品選定

材料配合最適化

多目的最適化

物理モデルの
簡略化

QA-BBO: 活用例 (Amplify ユーザー)

● 活用領域

■ 化学、倉

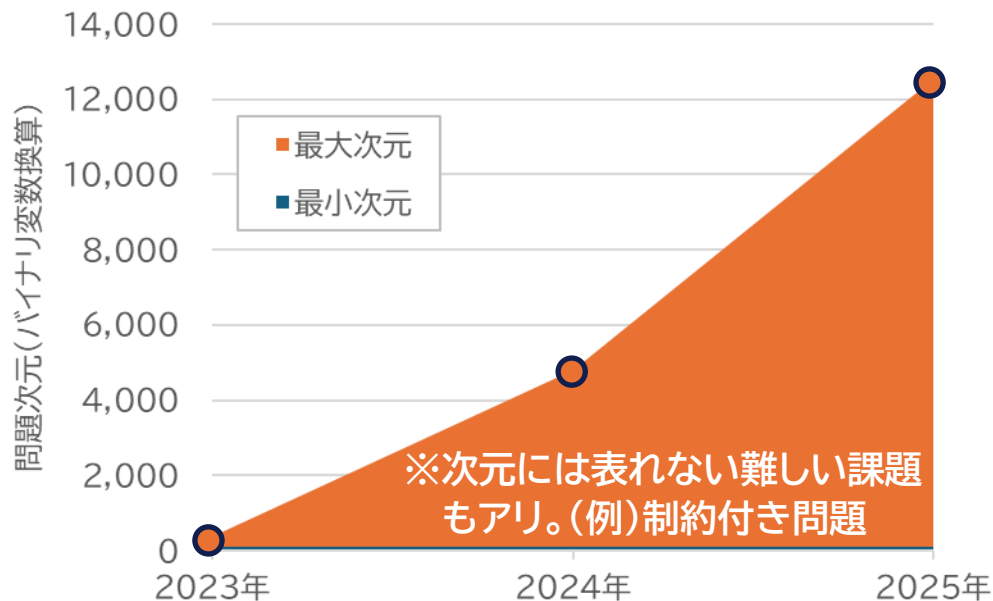
非線形現象の逆
問題

機械
コスト

リスク・・・・

物理モデルの
簡略化

Amplify で経験したBBO問題規模の推移
(整数・実数・混合最適化の場合はバイナリ変数換算次元)



QA-BBO: 課題（躓きポイント）

- モデル関数（例:FM）の性能が鍵（ベイズ最適化のように探索を考慮しないため）

- 性能 → ✖ 精度
- 性能 → ✔ ブラックボックス目的関数との相関（むしろ順位）
- 特に目的関数値が小さいサンプルに対しての性能
 - ✓ 最適化問題はダイナミックレンジ（HDR）になりがち
 - ✓ つまり、“目的関数値が小さいサンプルに対しての性能”は、そもそも実現しにくい！

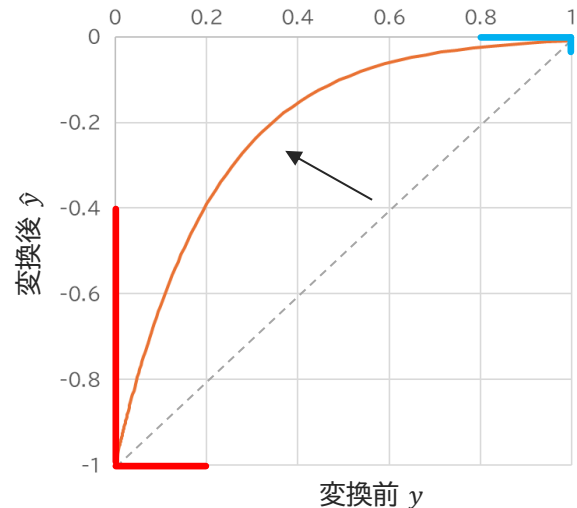
適切な学習パラメータで妥当な学習を実現している前提

↑ これも躓きポイント

- 目的関数値の変換

- HDRに抗うような変換
- 例:

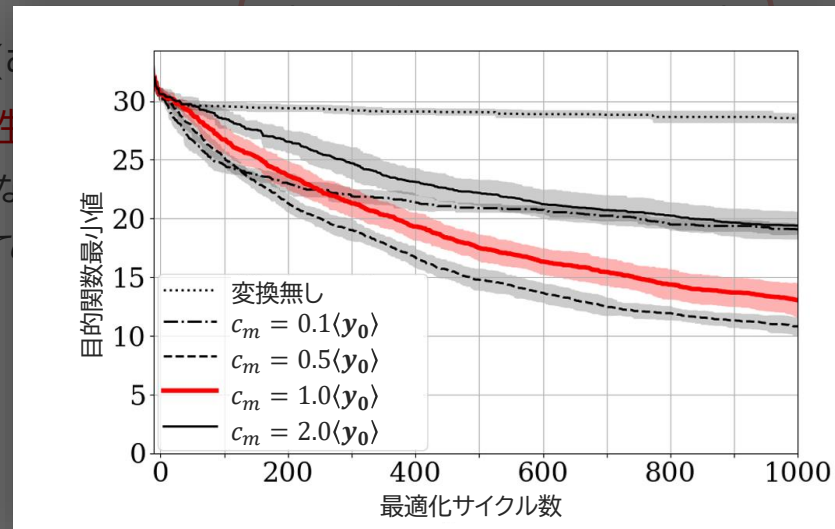
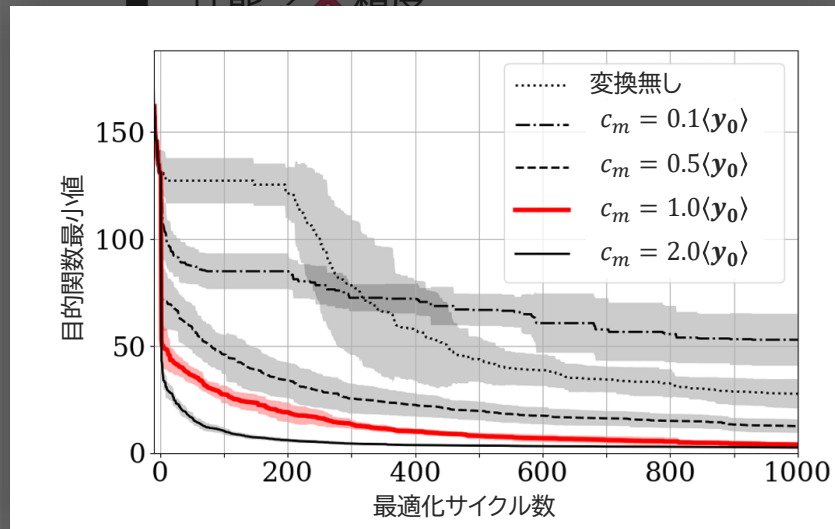
$$\hat{y} = -\exp\left(-\frac{y}{c_m}\right), \quad c_m = \langle y_0 \rangle$$



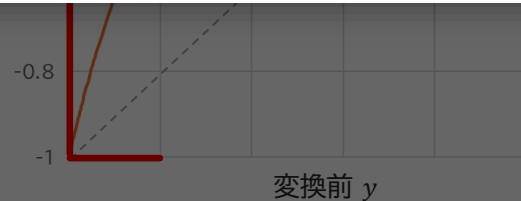
QA-BBO: 課題 (躓きポイント)

- モデル関数 (例:FM) の性能が鍵 (ベイズ最適化のように探索を考慮しないため)

■ 性能 → ✗ 精度



$$\hat{y} = -\exp\left(-\frac{y}{c_m}\right), \quad c_m = \langle y_0 \rangle$$



まとめ

- QA-BBOの活用領域・問題規模は拡大中
- 最適化成功の鍵は、構築されるモデル関数の性能
 - モデル関数精度ではなく、モデル関数とブラックボックス関数の正の相関を実現
 - 特に、ブラックボックス関数値が小さいサンプルに対して上記の性能が発揮されるように
 - （モデル構築が上手くいっている前提の下で、）目的関数値の変換が効果アリ
- 吊るしのQA-BBOに工夫を加え、性能向上を実現する試みも進行中！