

テンソルネットワーク Born マシンを用いた
組合せ最適化問題へのアプローチ
arXiv:2602.20175 [cs.LG]

Ryo Sakai (JIJ Inc.) and Chen-Yu Liu (Natl. Taiwan U., Quantinuum)

2026 年 5 月 8 日
第 3 回 Quantum CAE 研究会
産業技術総合研究所臨海副都心センター + オンライン

組合せ最適化問題

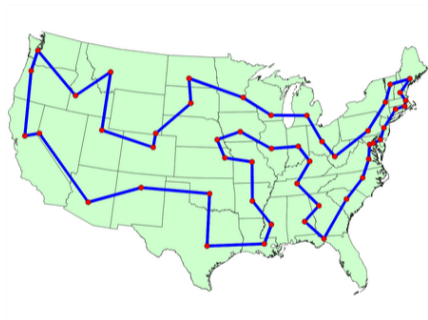
- ▶ 現実世界の多くのタスクは組合せ最適化問題として定式化できる。
 - 物流, スケジューリング, 資源配分, 回路設計, ...
- ▶ 多くの問題は NP 困難で, 大規模インスタンスでは厳密解法が通用しない.
- ▶ 問題に依存した局所探索ヒューリスティクスはしばしば有効だが, 局所最適解に囚われがちである.
- ▶ 生成モデルに基づく新しいアプローチ: **問題の詳細を見ずに**データから良い解の構造を学習し, 新しい候補をサンプリングする.
- ▶ 本研究ではテンソルネットワーク (tensor network, TN) を生成モデルとして使う.
 - 量子力学に由来する特性 (Born 則確率, エンタングルメント, ...) を継承する.
 - 完全に古典ハードウェア上で動作する.
 - ボンド次元によりエンタングルメント (機械学習でいう表現力) が調整可能.

巡回セールスマン問題 (traveling salesman problem, TSP)

- ▶ トイモデルとしても現実問題としてもよく現れる典型的な問題.
- ▶ 同じ都市を二度訪れずに全都市を巡る最小巡回長はいくらか?
- ▶ N 都市と都市間距離 $d_{i,j}$ が与えられたとき, 以下を最小化する巡回路 $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_N)$ は?

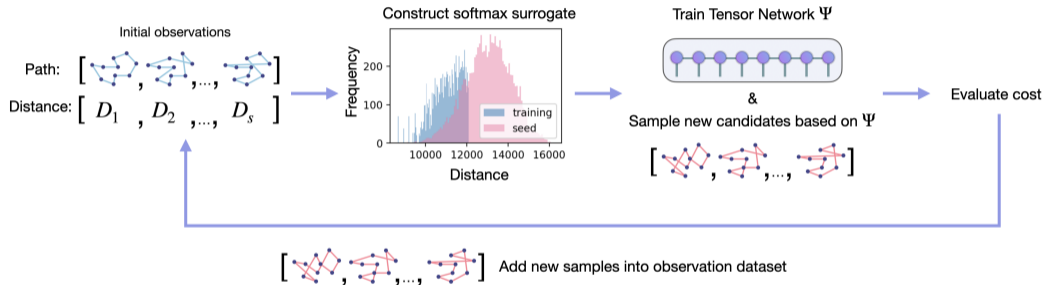
$$D(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^{N-1} d_{p_i, p_{i+1}} + d_{p_N, p_1}.$$

- ▶ 実行可能解の数は $(N-1)!/2$ (対称インスタンスの場合) と急速に増加する.



米国 48 都市における最適な巡回路.

Generator-enhanced optimization (GEO) [Alcazar et al., 2024]



1. 与えられた解プールに対して、良さげな候補を用いて生成モデルを訓練する。
2. 生成モデルからサンプルした解をプールに追加する。
3. 繰り返す。

Generator-enhanced optimization (GEO) [Alcazar et al., 2024]

- ▶ 生成モデルは TN, 量子回路, ニューラルネットワーク, あるいはそれらのハイブリッドのどれでも良い.
- ▶ 解は問題の詳細からではなく解から生成される.
- ▶ 初期解プールはランダムでも良いし, 別の最適化手法で作ったものでも良い.
- ▶ 「良さげな」解候補は, 有限温度ソフトマックスサンプリング

$$Q_i \propto \exp(-D_{(i)}/T)$$

により選ばれる.

- Q_i : プール内の i 番目の解をサンプルする確率, $D_{(i)}$: i 番目の解のコスト, T : 温度.
- 良い解をどれくらい重視するかは温度 T で制御される. スケジューリングも可能.

これまでの GEO 研究

▶ 応用例:

- ポートフォリオ最適化 [Alcazar et al., 2024].
- BMW における生産計画 (実問題, 産業的スケール) [Banner et al., 2023].
- 多次元ナップサック問題 [Vodovozova et al., 2025].

▶ 方法論としての研究:

- 分布推定アルゴリズムとしての側面 [Gardiner and Lopez-Piqueres, 2024].
- 汎化能力を形式的に定義・解析したもの [Gili et al., 2024].

テンソルネットワーク？

$$A_{ij} = i \text{---} \text{red circle} \text{---} j, \quad B_{ijk} = \begin{array}{c} i \\ \diagdown \\ \text{blue circle} \\ \diagup \\ j \end{array} \text{---} k, \quad C_i = \sum_{a,b} A_{ab} B_{abi} = \begin{array}{c} a \\ \text{red circle} \text{---} \text{blue circle} \\ b \end{array} \text{---} i$$

- ▶ ここでは多次元の配列をテンソルと呼ぶ。
- ▶ スカラーはランク 0 テンソル，ベクトルはランク 1 テンソル，行列はランク 2 テンソル。
- ▶ 添字の数がテンソルのランクを表す。
- ▶ 共有された添字は縮約されていると見なす (この記法により和の記号や添字の明示を省略できる)。
- ▶ 複数のテンソルの積をテンソルネットワークと呼ぶ。

行列積状態 (matrix product states, MPS)



- ▶ 量子状態 $|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle$ は振幅 $\Psi(\mathbf{x})$ によって特徴づけられるが、これはランク N のテンソルをなす。
- ▶ MPS 形式ではこの巨大なテンソルを小さなテンソルの鎖へと分解する:

$$\Psi(\mathbf{x}) \approx \sum_{\{\alpha\}} A_{x_1, \alpha_1}^{[1]} A_{\alpha_1, x_2, \alpha_2}^{[2]} \cdots A_{\alpha_{N-1}, x_N}^{[N]}$$

- ▶ 「仮想的」な添字 $\{\alpha\}$ の次元を χ とする。これはボンド次元と呼ばれ、MPS の記述できるエンタングルメント (機械学習でいう表現力) の大きさを決める。

MPS Born マシン

- ▶ 波動関数 $\Psi(\mathbf{x})$ が与えられたとき, \mathbf{x} を観測する確率は Born 則により定義される:

$$P(\mathbf{x}) = \frac{|\Psi(\mathbf{x})|^2}{\sum_{\mathbf{x}'} |\Psi(\mathbf{x}')|^2}.$$

- ▶ 訓練された MPS から Born 確率によって候補解を生成, サンプルングするという方法が考えられ, このような確率的モデルを **Born マシン** と呼ぶ.
- ▶ エネルギーベースのモデル (e.g. Boltzmann マシン) に対する主な利点:
 - Perfect sampling [Ferris and Vidal, 2012]: サンプルは厳密な確率分布から独立に生成される. MCMC と異なり平衡化が必要なく自己相関もない.
 - テンソル縮約として尤度を厳密に計算できる. エネルギーベースなモデルでは通常不可能である.

MPS Born マシンの訓練 [Han et al., 2018]

- ▶ 望ましい解に高い確率が割り当てられるように Born マシンを訓練したい.
- ▶ (重み付き) 負の対数尤度関数 (negative log-likelihood, NLL) を最小化する:

$$\mathcal{L} = - \sum_i Q_i \log P(\mathbf{p}_{(i)}).$$


- Q : 解候補に対する目標分布.
 - $P(\mathbf{p}_{(i)}) = |\Psi(\mathbf{p}_{(i)})|^2 / Z$: 巡回路 $\mathbf{p}_{(i)}$ に対応する Born 確率.
 - \mathcal{L} が小さい \Leftrightarrow MPS が Q をよく近似する.
- ▶ 自動微分 [Liao et al., 2019] による勾配降下法を行なう.
- 勾配 $\nabla_{(\text{MPS 要素})} \mathcal{L}$ は MPS 縮約の逆伝播により計算される.
 - 全てのテンソル成分を同時に更新する.

自動微分による MPS の訓練

- ▶ 自動微分 (automatic differentiation, AD): 計算グラフ (頂点が値, 辺が演算を表す) を通じて微分の連鎖律を系統的に適用し, 全体の微分を計算する.

$$\text{順伝播: } \{A^{[k]}\} \xrightarrow{\text{縮約}} \Psi(\mathbf{x}) \xrightarrow{\text{Born 則}} P(\mathbf{x}) \xrightarrow{-\sum_i Q_i \log} \mathcal{L}$$

$$\text{逆伝播: } \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \{A^{[k]}\}} \xleftarrow{\times \frac{\partial \Psi}{\partial \{A^{[k]}\}}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi} \xleftarrow{\times \frac{\partial P}{\partial \Psi}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P} \xleftarrow{\times \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P}} 1 \left(= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathcal{L}} \right)$$

- ▶ 微分は直接評価されるのではなく, 局所的な微分と連鎖律から求められる.
- ▶ 各ステップは自身の入出力関係さえ知っていれば良く, 合成は連鎖律が担う.
- ▶ 逆伝播のコスト \approx 順伝播のコスト.
- ▶ 順伝播さえ実装すれば, 逆伝播の計算は `jax.grad` が自動で行ってくれる.  JIJ

自動微分による MPS の訓練

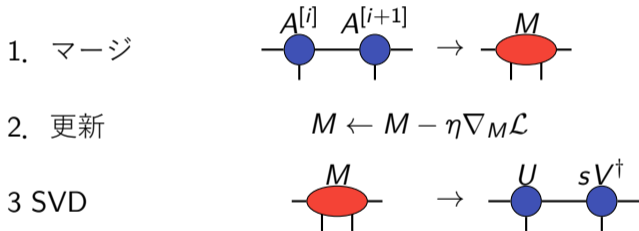
- ▶ 与えられた配位 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ に対して、確率振幅 $\Psi(\mathbf{x})$ はテンソル縮約として表される:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \begin{array}{ccccccc} & A^{[1]} & & A^{[2]} & & A^{[3]} & & \dots & & A^{[M]} \\ & \bullet & \text{---} & \bullet & \text{---} & \bullet & \text{---} & \dots & \text{---} & \bullet \\ & | & & | & & | & & & & | \\ x_1 & \square & & x_2 & \square & x_3 & \square & & & x_N & \square \end{array}$$

- ▶ NLL は確率振幅から計算される: $\mathcal{L} = -\sum_i Q_i \log |\Psi(\mathbf{p}_{(i)})|^2 / Z$.
- ▶ パイプライン全体 (縮約 \rightarrow Born 確率 \rightarrow NLL) が微分可能.
- \Rightarrow 逆伝播により $\nabla_{(\text{MPS 要素})} \mathcal{L}$ が自動的に得られる.

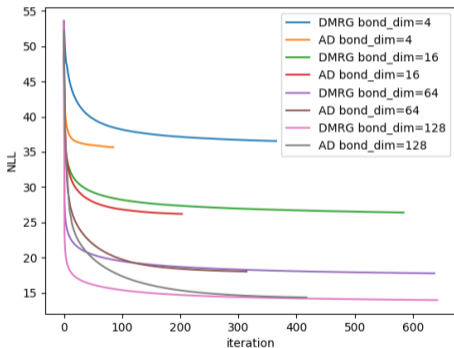
Cf. DMRG 風の訓練 [White, 1992; White, 1993]

- ▶ 隣接する2つのテンソルをマージし、勾配を用いて更新した後、特異値分解 (singular value decomposition, SVD) により MPS 形式に戻す。



- ▶ 隣接するテンソル対を全て巡回し、収束するまで繰り返す。
- ▶ SVD を繰り返し適用する伝統的な局所更新手法。

AD vs. DMRG



- ▶ 与えられた目標分布に対する NLL の収束を示している.
- ▶ どちらの手法も似た値に収束する.
- ▶ 4桁収束するまで計算した.
- ▶ 実装の簡単さに加えて、ADではテンソル成分が大域的に更新されるので局所解の回避に有効かもしれないという期待もある.

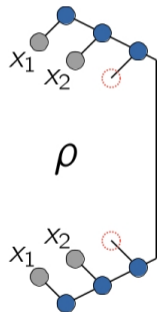
エンコーディングから見た MPS の利点

- ▶ 多くの量子・量子インスパイア手法ではバイナリエンコーディングを用いる:
 - それしかできないことも多い.
 - N^2 個のバイナリ変数 (都市と巡回時刻それぞれに対して one-hot 制約を課す).
 - 解空間は 2^{N^2} 配位から成るが, そのうち有効な巡回路は $N!$ 個だけ.
 - 有効な巡回路を得るためにペナルティ項が必要.
- ▶ 本研究では整数エンコーディングを用いる:
 - N 個の整数変数 $\in \{0, 1, \dots, N-1\}^N$.
 - 解空間は N^N 配位から成り, そのうち有効な巡回路は $N!$ 個.
 - 変数の数が少ない \Rightarrow MPS が都市間の相関を効率的に捉えられる.
 - 有効な巡回路は順列でなければならない.
 - ペナルティ項を使う代わりに, 順列の生成をサンプリング時に強制できる.

順列のサンプリング

- ▶ 連鎖律を用いて x_1, x_2, \dots, x_N を順番にサンプルする:

$$P(x_1, x_2, \dots, x_N) = P(x_1)P(x_2|x_1)P(x_3|x_1, x_2) \cdots$$



- ▶ 条件付き確率 $P(x_k|x_1, \dots, x_{k-1})$ は以下の手順で得られる:

1. サンプル済みの変数 x_1, \dots, x_{k-1} に対応する添字を固定する.
2. 縮約密度行列 ρ を作る.
3. 各 j に Born 確率を割り当てる: $p_j = \rho_{jj}$.
4. 既に訪問した j は $p_j \leftarrow 0$ とマスクする.
5. x_k をサンプルする.

- ▶ マスクは未訪問の候補から成る部分空間への射影を意味する:

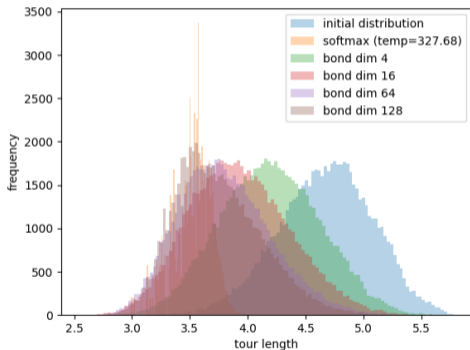
$$\rho \rightarrow \Pi \rho \Pi, \quad \text{ただし } \Pi = \sum_{j \notin U} |j\rangle\langle j|.$$

- ⇒ こうして得るサンプルは必ず順列をなす.
 ⇒ ペナルティ項もサンプルの後選択も不要.

制約付きのサンプリングに関する先行研究

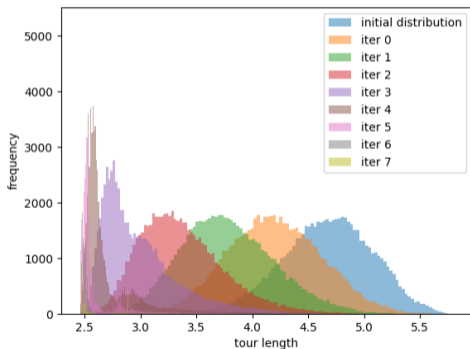
- ▶ 実行可能 MPS [Nakada et al., 2025]
 - フェルミオン MPS 等を用い，実行可能解の重ね合わせを表す MPS を構築する。
- ▶ 対称性が埋め込まれた MPS [Lopez-Piqueres, Chen, and Perdomo-Ortiz, 2023; Lopez-Piqueres and Chen, 2025]
 - MPS に直接対称性を埋め込む。
 - 構成上，無効な配位の振幅がゼロになることが保証される。
- ▶ 射影による解の選択 [Mata Ali et al., 2023]
 - 射影演算子を適用して無効な解を排除する。
- ▶ Pointer networks [Vinyals et al., 2015]
 - ニューラルネットワーク．Attention によりその都度有効な要素だけ選択できる。
 - 本研究における確率のマスクもこれに似た操作と言える。

出力分布のボンド次元依存性



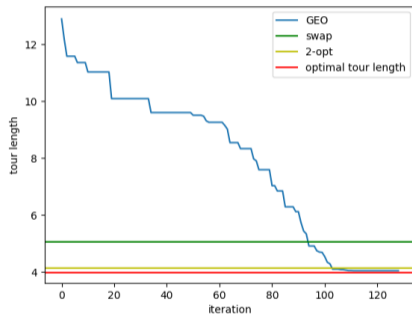
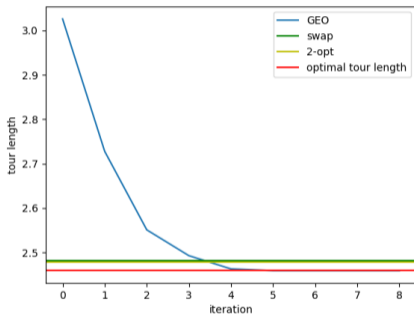
- ▶ TSPLIB [Reinelt, 1991] の ulysses16.
- ▶ ボンド次元が大きい \Rightarrow MPS が目的分布をより良く近似する.
- ▶ exploration と exploitation のバランスという観点では、ボンド次元は必ずしも大きくとらないといけないわけではない [Vodovozova et al., 2025; Gardiner and Lopez-Piqueres, 2024].
- ▶ 以降ボンド次元を 128 に固定する.

解分布の発展



- ▶ TSPLIB [Reinelt, 1991] の ulysses16.
- ▶ GEO の反復が進む毎に、解分布はより短い巡回路を示す領域に徐々に遷移している。

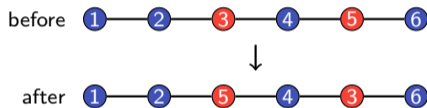
最良な巡回長の発展



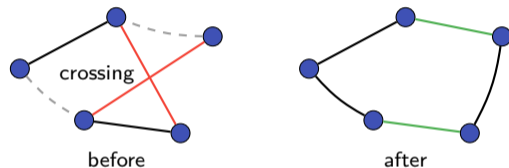
- ▶ TSPLIB [Reinelt, 1991] の ulysses16 (左) と att48 (右).
- ▶ どちらについても GEO は最適値かその近傍に収束し, swap や 2-opt を上回る.

Swap と 2-opt による山登り法

Swap: 巡回路内の 2 都市を入れ替える.

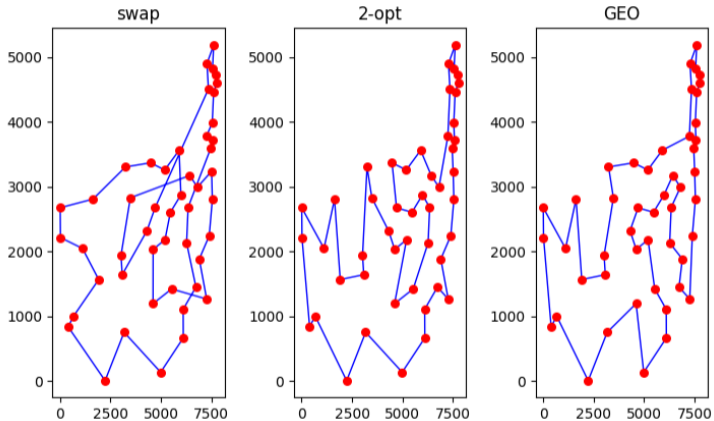


2-opt: 区間を反転させ, 辺の交差を除く.



- ▶ いずれも $(0, 1, 2, \dots, N-1)$ を初期解とする.
- ▶ 伝統的で決定論的で高速に動作するが, 局所最適解に陥りやすい.
- ▶ (この規模では高速だが都市数に対するスケーリングは GEO より悪い.)

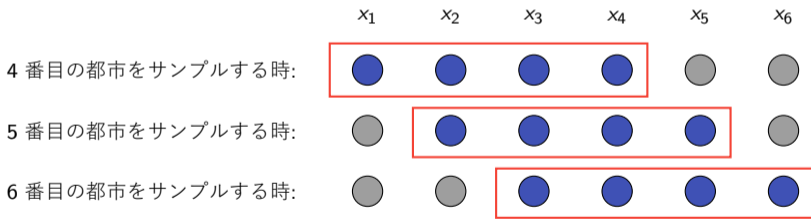
各手法が発見した最良巡回路



- ▶ TSPLIB [Reinelt, 1991] の att48.
- ▶ GEO は交差の除去に成功している.

k -site MPS を用いた変種アルゴリズム

- ▶ Full MPS: N 個テンソルがあり, 物理的な添字の次元は $N \Rightarrow$ メモリ $\propto \chi^2 \times N^2$.
- ▶ k -site MPS ($k < N$): 巡回路全体ではなく k -gram 上の分布を学習する.
 - k 個のテンソルを持つ \Rightarrow メモリ $\propto \chi^2 \times N \times k$.
- ▶ Sliding window サンプルング. 直近 $k - 1$ 個の訪問都市だけ記憶する.



- ▶ k が小さい \Rightarrow パラメータ数は減るが, 連続する k 都市の相関しか捉えられない.

TSPLIB インスタンスを用いた性能評価

インスタンス	Swap	2-opt	$k = 2$	$k = 4$	$k = 8$	full
burma14	7.1%	3.76%	0%	0%	0%	0%
ulysses16	0.933%	0.787%	0%	0%	0%	0%
ulysses22	21.6%	1.47%	0%	0%	0%	0%
att48	26.7%	3.45%	6.67%	0%	0%	6.13%
eil51	30%	4.93%	3.05%	0%	0%	3.99%
berlin52	29.3%	16.5%	3.9%	0%	0%	4.18%

- ▶ 最適な巡回長とのギャップ (%). 低いほど良い.
- ▶ $k = 4$ と $k = 8$ は全インスタンスで最適な巡回路を発見している.
- ▶ Full MPS ($k = N$) は大きなインスタンスでは苦戦している.
 - 限られた χ では広大な解空間を十分に探索できない.

なぜ中程度の k がしばしば最良か？

- ▶ 巡回路全体は部分路の切り貼りによって決まる.
- ▶ $k = 2$: 辺の分布のみ学習する → 学習できるパターンが限定的過ぎる.
- ▶ Full $k = N$: ボンド次元が限られると広大な解空間を十分に探索できない.
- ▶ $k = 4-8$: 部分路の局所的な構造を適切に捉えられる.
 - 近い都市群の相関を学習するのにモデルの容量を集中できる.
- ▶ 「中程度の表現力を持つモデルがフルの表現力を持つモデルを上回ることがある」という一般論をある種体現している.

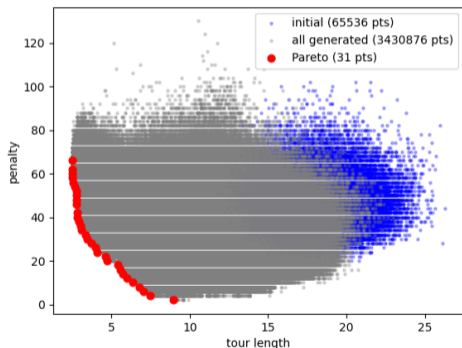
まとめ

- ▶ 主要なアイデア:
 1. 整数エンコーディングとマスク付きサンプリング \Rightarrow 全てのサンプルが有効な順列.
 2. k -site MPS による効率的モデリング \Rightarrow 中程度の k が full MPS ($k = N$) を上回る.
- ▶ 52都市までの TSPLIB インスタンスでのベンチマーク: TN-GEO は swap および 2-opt 法を上回る. $k = 4$ –8-site MPS は常に最適な巡回路を発見した.
- ▶ 考察:
 - MPS の 1 次元構造 \leftrightarrow 巡回路; MPS は局所的な相関を捉えることができる.
 - 物理的な添字の次元 = N (2 に限らない); 順列の分布を直接モデル化できる.
 - Cf. バイナリエンコーディング: MPS の長さは N^2 . MPS 上の都市間の距離が長い.
- ▶ これから:
 - 更に大規模なインスタンスでの性能評価.
 - 長距離相関が重要な問題への適用; 異なる種類の TN が必要になりそう.
 - 多目的 GEO.

多目的最適化に向けて

- ▶ 複数の競合する目的関数を持つ問題を解きたい.
- ▶ 加重和による単一目的化や制約条件への埋め込みがよく行なわれる.
 - 重みを先験的に選ぶ必要がある.
 - 一度の最適化で完全な Pareto 曲面を発見できない.
- ▶ GEO は生成的なアプローチであり、個別の解ではなく良い解の分布を学習する.
 - 分布推定アルゴリズム (estimation of distribution algorithm, EDA)—有望な解候補の分布を直接モデル化する集合ベースの最適化—と類似する [Gardiner and Lopez-Piqueres, 2024].
 - 集合ベースの進化的手法 (e.g. NSGA-II) は多目的最適化で成功を収めてきた.

トイモデル: 2 目的 TSP



- ▶ TSPLIB [Reinelt, 1991] の att48.
- ▶ 巡回長の最小化とペナルティの最小化の2目的で TSP を定式化した。
 - マスクは用いない ⇒ モデルは無効な巡回路も生成し得る.
- ▶ NSGA-II から選択戦略を継承して多目的 GEO を実装した:
 - 非優越ソート: 解を Pareto 曲面に近い順に順位付けする.
 - 混雑度ソート: 多様性を保つ工夫.

- [1] J. Alcazar, M. G. Vakili, C. B. Kalayci, and A. Perdomo-Ortiz, “Enhancing combinatorial optimization with classical and quantum generative models”, *Nat. Commun.* **15**, 2761 (2024), [arXiv:2101.06250 \[quant-ph\]](#).
- [2] W. P. Banner, S. B. Hadiashar, G. Mazur, T. Menke, M. Ziolkowski, K. Kennedy, J. Romero, Y. Cao, J. A. Grover, and W. D. Oliver, “Quantum Inspired Optimization for Industrial Scale Problems”, (2023), [arXiv:2305.02179 \[quant-ph\]](#).
- [3] A. J. Ferris and G. Vidal, “Perfect sampling with unitary tensor networks”, *Phys. Rev. B* **85**, 165146 (2012), [arXiv:1201.3974 \[cond-mat.str-el\]](#).
- [4] J. Gardiner and J. Lopez-Piqueres, “Tensor Network Estimation of Distribution Algorithms”, (2024), [arXiv:2412.19780 \[cs.LG\]](#).
- [5] K. Gili, M. Mauri, and A. Perdomo-Ortiz, “Generalization metrics for practical quantum advantage in generative models”, *Phys. Rev. Applied* **21**, 044032 (2024), [arXiv:2201.08770 \[cs.LG\]](#).

- [6] Z.-Y. Han, J. Wang, H. Fan, L. Wang, and P. Zhang, “Unsupervised Generative Modeling Using Matrix Product States”, *Phys. Rev. X* **8**, 031012 (2018), [arXiv:1709.01662 \[cond-mat.stat-mech\]](#).
- [7] H.-J. Liao, J.-G. Liu, L. Wang, and T. Xiang, “Differentiable Programming Tensor Networks”, *Phys. Rev. X* **9**, 031041 (2019), [arXiv:1903.09650 \[cond-mat.str-el\]](#).
- [8] J. Lopez-Piqueres and J. Chen, “Cons-training tensor networks: Embedding and optimization over discrete linear constraints”, *SciPost Phys.* **18**, 192 (2025), [arXiv:2405.09005 \[math.NA\]](#).
- [9] J. Lopez-Piqueres, J. Chen, and A. Perdomo-Ortiz, “Symmetric tensor networks for generative modeling and constrained combinatorial optimization”, *Mach. Learn.: Sci. Technol.* **4**, 035009 (2023), [arXiv:2211.09121 \[quant-ph\]](#).
- [10] A. Mata Ali, I. P. Delgado, and A. M. F. de Leceta, “Traveling Salesman Problem from a Tensor Networks Perspective”, (2023), [arXiv:2311.14344 \[quant-ph\]](#).

- [11] H. Nakada, K. Tanahashi, and S. Tanaka, “Quick design of feasible tensor networks for constrained combinatorial optimization”, *Quantum* **9**, 1799 (2025), [arXiv:2409.01699 \[cond-mat.stat-mech\]](#).
- [12] G. Reinelt, “TspLib—a traveling salesman problem library”, *ORSA journal on computing* **3**, 376 (1991).
- [13] O. Vinyals, M. Fortunato, and N. Jaitly, “Pointer networks”, in *Advances in neural information processing systems*, Vol. 28 (2015), [arXiv:1506.03134 \[stat.ML\]](#).
- [14] Y. Vodovozova, A. Awasthi, C. Jones, J. Doetsch, K. Wintersperger, F. Krellner, and C. A. Riofrío, “Generative-enhanced optimization for knapsack problems: an industry-relevant study”, (2025), [arXiv:2502.04928 \[cs.LG\]](#).
- [15] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).

- [16] S. R. White, “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups”, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).