

機械学習を活用した QUBO 自動構築システムの開発 —オートエンコーダによる解空間圧縮—

1. 背景

組合せ最適化問題は、経路最適化、生産計画、資源配分、スケジューリング、ポートフォリオ最適化まで、産業や社会システムの根幹に現れる。しかし、候補解の数は問題規模に対して指数的に増大し、厳密解の探索は現実的な計算資源では困難になりやすい。このため、確率的探索に基づく近似解法や専用計算基盤への期待が高まっており、量子アニーリング、量子インスパイアード手法を含むアニーリング技術は、複雑なエネルギー地形上での探索を自然に記述できる枠組みとして注目されている。また、アニーリング技術を内部アルゴリズムとして実装した計算基盤は、総称してアニーリングマシンと呼ばれる。

アニーリング技術を実問題へ適用する際には、問題を Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) へ変換する前処理が不可欠である。QUBO は、バイナリ変数 (0 か 1) を用いた二次式の最小化として記述される最適化形式である。この QUBO への定式化が実用上の大きなボトルネックになっている。第一に、整数変数やカテゴリ変数を含む組合せ最適化問題を扱う場合、元の変数をバイナリ変数へと変換するためのエンコーディング処理を行う必要がある。しかし、one-hot エンコーディングなどの一般的なエンコーディング手法は変数が増加しやすく、問題サイズが膨張する。変数数の増加は、ハードウェアの収容可能規模やシミュレーション計算量の制約に直結するだけでなく、探索空間を不必要に広げ、探索効率そのものを低下させる。第二に、制約非充足解の発生である。変数をバイナリ変数へエンコーディングする際に、元の変数へデコードできない、実用上無意味な解をアニーリングマシンが出力してしまう可能性がある。そのため、デコード可能性を保証するための制約をペナルティとして目的関数に埋め込む必要があるが、ペナルティ係数の調整は経験則に依存しがちであり、係数が小さければ制約非充足解が多発し、大きすぎればエネルギー地形が歪んで探索が停滞する。第三に、エンコーディングや定式化の選び方によっては、「元の解空間で近い解」がバイナリ空間上で遠くなるなど幾何構造が損なわれ、局所探索が機能しないエネルギー地形を生む。結果として、アニーリングの潜在能力が QUBO 設計の巧拙に左右され、適用可能な問題や利用者が限られるという構造的課題が残っている。

2. 目的

本プロジェクトの目的は、QUBO 構築を人手依存の設計から解放し、データ駆動により自動化することで、アニーリング技術の適用範囲を拡大させることである。具体的には、制約を満たす解集合の構造をバイナリオートエンコーダ (Binary AutoEncoder; bAE) で学習し、特徴を保ったまま低次元の二値潜在表現へ圧縮する。これにより、問題の本質的自由度に沿った表現を獲得し、変数数の膨張を抑えつつ探

索が進みやすい空間を形成する。さらに、潜在空間上の目的関数を Factorization Machine (FM) で近似し、そのモデルを QUBO 係数へ写像して、アニーリングマシンが直接扱える二次形式として構成する。得られた候補解を評価してデータセットへ追加し、FM を更新する反復最適化 (FMQA) を回すことで、少ない評価回数で高品質な解へ収束させることを狙う。

以上の枠組みを、誰でも同じ手順で再実行できる形へ落とし込むため、Python ライブラリ「Quron」として実装し、Quick Start, API リファレンス, 最小実行例を含めて OSS として公開した。併せて、表現学習の効果を測定可能な指標により整理し、論文として体系化した。

3. ソフトウェア開発内容

Quron は、制約付き組合せ最適化問題に対して「bAE 学習により、潜在空間内で QUBO を構築して解探索する」流れを、モジュール単位で利用できる形に統合した Python ライブラリである。

本ライブラリが解決する課題は、(i) 変数数の増大による探索困難、(ii) 制約非充足解の多発、(iii) ペナルティ係数の手作業調整である。Quron は、問題定義から学習、潜在空間内での QUBO 構築、アニーリングマシンによる解探索、反復最適化制御までを一貫手順として提供し、少ない記述量で実験を回せるようにする。

動作環境は Python 実行環境であり、機械学習部分は PyTorch を用いた。QUBO 最適化はアニーリングマシンを用いる設計で、ソルバー部分は差し替え可能な構造とした。これにより研究用途だけでなく、将来的に特定ハードウェアや新規ソルバーへ移行する場合にも、周辺実装の変更を最小化できる。

提供する機能は大きく (i) 問題定義と解表現、(ii) 学習用データ生成と管理、(iii) bAE 学習と潜在符号化、(iv) FM 学習と潜在 QUBO への変換、(v) アニーリングマシン呼び出し、(vi) 反復最適化の制御と結果出力、からなる。

4. 新規性・優位性

① bAE と他手法とのエンコーディング性能比較

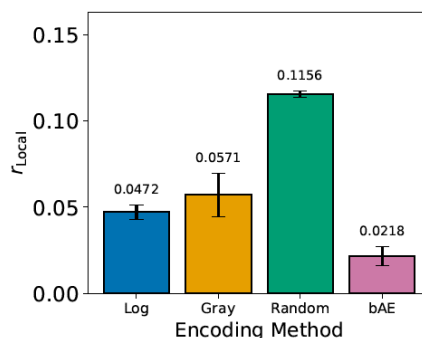


図 1：バイナリ空間における局所解の割合（局所率）

bAE と各種エンコーディング手法に関して、局所率 r_{Local} を比較した。ここで r_{Local} は、各解について「ハミング距離 1 の近傍に自分より良い解が存在しない」割合として定義され、値が大きいほど局所解が多く、探索が停滞しやすい地形であることを表す。図 1 より、bAE によるエンコーディングは、ルールベース手法やランダム割当よりも r_{Local} が小さく、局所解が少ないことが分かる。

【比較したエンコーディング手法】

Log：各巡回路を順位 (rank) に変換し、その整数を通常の 2 進表現で符号化する (Rank-based Log)。

Gray：同じ順位をグレイコードで符号化する (Rank-based Gray)。

Random：各巡回路にバイナリ列をランダムに割り当てる (Random Label)。

② 最適化性能の評価

巡回セールスマン問題を題材に、潜在表現による大幅な変数削減と制約充足性の両立を確認し、探索効率の改善を定量的に示した。例えば、従来表現で 64 ビットを要する設定を 14 ビットへ圧縮するなど、問題サイズの縮小を達成し、同程度のビット数に揃えたその他のエンコーディング手法との比較条件においても、最適解到達までの効率と制約充足率の双方で有効性を確認した (図 2)。

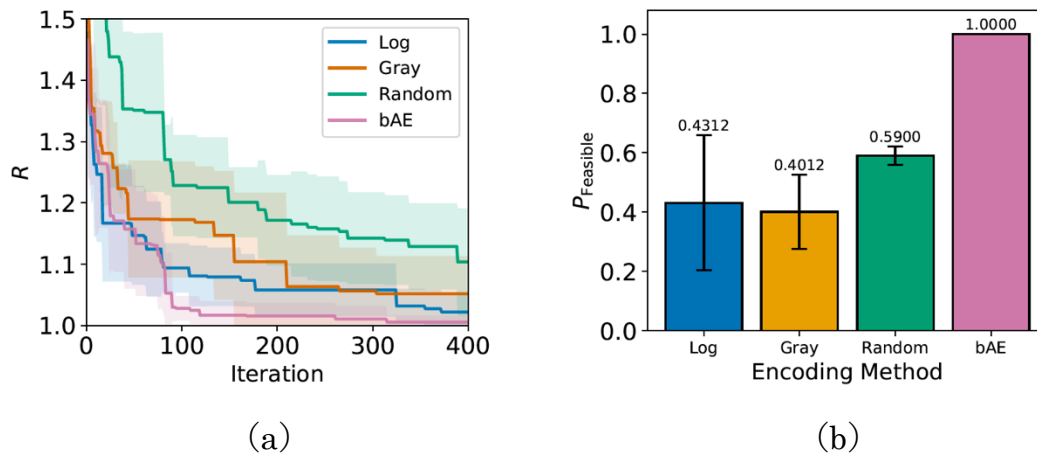


図 2：最適化性能. (a) FMQA の反復回数に対する近似比 R の推移. $R = 1$ は厳密解への到達を表す. (b)制約充足解獲得確率 P_{Feasible} .



図 3：開発した Python ライブラリ「Quron」

③ ライブラリの作成・公開

本プロジェクトで得られた、bAE による二値潜在表現の獲得、FM による潜在空間上の目的関数近似と QUBO 構成、アニーリングマシンによる探索、反復学習による改善、という一連の最適化フローは、単発の実験コードとして残すだけでは再現や拡張が困難になる。そこで本プロジェクトでは、性能比較で確立した要点を整理し、第三者が同じ手順で実行できる形に統合することを目的として、Python ライブラリ Quron として実装し、OSS として公開した (図 3)。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクトの価値は、単に組合せ最適化問題を解く手段を一つ増やすことではなく、アニーリング技術の適用における構造的ボトルネックである QUBO 定式化を、データ駆動により再現可能な形で支援し、適用範囲と利用者層を拡張する点にある。

本プロジェクトの、bAE による可行解集合の学習と潜在圧縮、FM による潜在空間上の QUBO 自動構成は、エンコーディング設計を人手依存から切り離し、反復可能な手順として提供する。特に本プロジェクトの評価では、学習により獲得した潜在表現が、ルールベースのエンコーディングに比べて局所最適の割合を低減し、探索が進

みやすい地形を形成することが示されている。可行性の観点でも、潜在空間上の探索が無意味な制約違反解を出しにくい方向へ誘導できることが確認されている。これらは、限られた評価予算で探索を回す実運用において、直接的な価値へつながる。

また、OSS や論文として公開されていること自体が、研究コミュニティと産業応用の接続を強める。透明性と検証可能性が高い形で成果が共有されることで、追加テストや改良が加速し、より大規模な問題や多様な制約へ拡張する速度が上がる。その結果として、アニーリング技術を特定の専門家の技能に依存させず、広いユーザーが試行し、成果を積み上げられる環境が整う。このような基盤整備は、量子・量子インスパイアード最適化の社会実装を進める上で、継続的かつ波及効果の大きいインパクトを持つ。

6. 氏名（所属）

阿部 哲郎（慶應義塾大学大学院）

山下 将司

（参考）関連 URL

<https://github.com/tetsu-creator/quron>

<https://arxiv.org/abs/2602.10037>