計算工学講演会論文集　Vol.29 (2024年6月)　日本計算工学会

量子アニーリングおよびGBD法を用いたトポロジー最適化

Topology optimization using quantum annealing and GBD method

芳賀栞[1)]，山本佳士[2)]，村松眞由[3)]，加藤準治[4)]

Shiori Haga, Yoshihito Yamamoto, Mayu Muramatsu and Junji Kato

1) 法政大学大学院 デザイン工学研究科 (〒162-0843 東京都新宿区市谷田町2-33, E-mail: shiori.haga.4r@stu.hosei.ac.jp)

2) 博（工）法政大学 デザイン工学部 教授 (〒162-0843 東京都新宿区市谷田町2-33, E-mail: y.yamamoto@hosei.ac.jp)

3) 博（工）慶應義塾大学 理工学部 准教授 (〒223-8522 横浜市港北区日吉3-14-1, E-mail: muramatsu@mech.keio.ac.jp)

4) Dr.-Ing. 名古屋大学大学院 工学研究科 教授 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: junjikato@civil.nagoya-u.ac.jp)

Conventional classical computers are unable to find the global optimal solution because they fall into the local optimum when trying to solve combinatorial optimization problems such as topology optimization. On the other hand, optimization using quantum annealing can efficiently search for the global optimal solution, and there is a possibility that it can be applied to topology optimization to efficiently search for the global optimal solution. The ultimate goal of this research is to establish a method for finding the globally optimal solution to a topology optimization problem using quantum annealing, which is difficult to find using conventional methods. In this study, we developed a method to compute the topology optimization of a two-dimensional truss using quantum annealing and verified the method as a fundamental stage of the study. As a result, it was confirmed that the developed method can solve the topology optimization of the truss structure with reasonable accuracy.

Key Words : *Quantum Annealing，Topology Optimization，Generalized Benders' Decomposition*

1.　はじめに

近年，建設分野では，3Dプリンティング技術の向上に伴って，実務においてもトポロジー最適化が応用されつつある．トポロジー最適化は，高い性能を持つ構造を低コストで探索可能な手法であるが，問題によって局所最適解に陥ってしまい，全体最適解を求めることができないという課題がある．

一方，近年，量子コンピュータの応用が注目されている．量子コンピュータには，量子ゲート方式と量子アニーリング方式の2つの方式があり，量子アニーリングは後述するように，0および1からなる二値変数のベクトルの最適化問題を解くことに特化した方式である．量子アニーリングを用いて最適化を行うことで，効率的に全体最適解を探索でき，トポロジー最適化に応用することで，効率的に全体最適解を探索できる可能性がある．

本研究は，最終的に，従来手法において探索が困難な，トポロジー最適化問題における全体最適解を，量子アニーリングを利用して高速で探索する手法の確立を目的としている．量子アニーリングを用いたトポロジー最適化に関する研究は，コンプライアンス最小化を目的とした，本田らの研究[1]，およびZisheng Ye et al.の一般化ベンダース分解法（以降，GBD法と呼ぶ）を用いた研究[2]がある．本研究では，二値変数の最適化に特化した量子アニーリングに対して効率的に適用可能な，設計変数を，各要素の配置の有無，すなわち0および1の二値変数として表現するGBD法を用いたトポロジー最適化[3]を応用したZisheng Ye al.の手法の実装を試みる．なお，Zisheng Ye et al.は，量子アニーリングマシンの性能がまだ十分でないことから，古典コンピュータで解く部分と量子コンピュータで解く部分に問題を分割する手法を提案しているが，本研究では量子アニーリングのみでトポロジー最適化を解く手法を実装した．さらに，簡単なトラスのトポロジー最適化を実施して検証を行った．

なお，量子アニーリングは，ハードウェアが開発段階であるため計算可能な規模が小さく，大規模な計算を行うことができない．そこで，本研究では計算負荷によっては，現状において量子アニーリングと同等あるいはそれ以上の計算負荷で計算が可能な，GPUを用いたシミュレーテッドアニーリングも併用して計算を実行した[4].

2.　量子アニーリングおよびGBD法を用いたトポロジー最適化手法

(1) 二次形式二値変数最適化問題（QUBO）

量子アニーリングマシンで最適化問題を解くためには，解きたい問題を，二次形式二値変数最適化（Quadratic Unconstrained Binary Optimization，以降，QUBOと呼ぶ）といった形式に変換する必要がある．QUBOは一般的に以下の式で表される．

$$H(\boldsymbol{q}) = -\sum_{i,j} Q_{ij} q_i q_j \tag{1}$$

ここで，q_iは 0 もしくは 1 の値を取る二値変数，Q_{ij}は実数の係数であり，Hはハミルトニアンと呼ばれる．量子アニーリングマシンは，このハミルトニアンを最小化する二値変数q_iの最適解を算定することができる．

（2）GBD法を用いたトポロジー最適化問題[2][3]

コンプライアンス最小化を目的とする有限要素離散化されたトポロジー最適化問題は以下のように表される．

$$\begin{gathered}\min_{u,\rho}\ \boldsymbol{f}^T\boldsymbol{u} \\ s.t.\ \boldsymbol{K}(\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f} \\ \sum_{i=1}^{n_\rho}\frac{\rho_i}{n_\rho} = V_T \\ \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{n_u}, \boldsymbol{\rho} \in \{0,1\}^{n_\rho}\end{gathered} \tag{2}$$

ここで, $\boldsymbol{f}$は対象構造に作用する既知の外部荷重， $\boldsymbol{u}$ は節点変位，ρ_iは各有限要素 i 上で定義される離散化された設計変数であり，ここでは二値変数であることに注意されたい．また，V_Tは体積制約値である．

GBD 法では，式(2)のような混合整数非線形計画問題を，一連の混合整数線形計画問題に緩和して最適解を探索する．なお，ここでは，最終的に導出された混合整数線形計画問題のみを示す．定式化の詳細および反復収束過程を含む最適解探索アルゴリズム等は，参考文献[2]および[3]を参照されたい．

$$\begin{gathered}\min_{\rho,\eta}\ \eta \\ s.t.\ \ \boldsymbol{f}^T\boldsymbol{u}^j + \sum_{i=1}^{n_\rho}\tilde{w}_i^j\left(\rho_i - \rho_i^j\right) \le \eta \qquad j = 1,\dots,k \\ \sum_{i=1}^{n_\rho}\frac{\rho_i}{n_\rho} = V\end{gathered} \tag{3}$$

ここで, ηは補助変数, kは最適解探索の反復回数である．$\boldsymbol{u}^j$は反復j回目における節点変位，$\tilde{w}_i^j$は反復j回目における i 番目の設計変数のコンプライアンスに対する感度である．反復が進むにつれて，式(12)に含まれる不等式制約($j=1\dots,k$)の数は増えていく．

（3）QUBO形式への変換[2]

上記の最適化問題を，量子アニーリングを用いて解くために, 式(3)を QUBO 形式のハミルトニアンに変換する．以下ではその過程を簡単に説明する．

まず, 不等式制約を等式制約に変換するために, 問題(3)の不等式制約にスラック変数α^jを導入する．

$$\begin{gathered}\min_{\rho,\eta,\alpha}\ \eta \\ s.t.\ \ \boldsymbol{f}^T\boldsymbol{u}^j + \sum_{i=1}^{n_\rho}\tilde{w}_i^j\left(\rho_i - \rho_i^j\right) + \alpha^j = \eta \\ \sum_{i=1}^{n_\rho}\frac{\rho_i}{n_\rho} = V \\ \alpha^j \ge 0\end{gathered} \tag{4}$$

さらに連続変数ηとα_jは次のように二値変数で近似できる．

$$\begin{gathered}\eta \approx \tilde{\eta}(e) = \frac{U}{2^{n_\eta}}e_0 + \sum_{i=1}^{n_\eta}\frac{U}{2^i}e_i \\ \alpha^j \approx \tilde{\alpha}^j\left(a^j\right) = \frac{U}{2^{n_{\alpha^j}}}a_0^j + \sum_{i=1}^{n_{\alpha^j}}\frac{U}{2^i}a_i^j \\ \boldsymbol{e} \in \{0,1\}^{n_\eta+1}, \boldsymbol{a}^j \in \{0,1\}^{n_{\alpha^j}+1}\end{gathered} \tag{5}$$

ここで, Uは連続変数$\boldsymbol{\eta}$およびα_jが取り得る上限値であり, $\boldsymbol{e}$および$\boldsymbol{a}^j$は二値変数ベクトルである．連続変数ηとα_jの近似の精度は, n_ηとn_{α^j}の大きさに依存する. n_ηとn_{α^j}の値は，要求される精度や量子アニーラのアクセス可能な量子ビット数に応じて選択する．

式(5)を式(4)に代入することで，最適化変数を二値変数のみで表した式が得られる．

$$\begin{gathered}\min_{\rho,\eta,\alpha}\ \ \tilde{\eta}(e) \\ s.t.\ \ \boldsymbol{f}^T\boldsymbol{u}^j + \sum_{i=1}^{n_\rho}\tilde{w}_i^j\left(\rho_i - \rho_i^j\right) + \tilde{\alpha}^j\left(a^j\right) = \tilde{\eta}(e) \\ \sum_{i=1}^{n_\rho}\frac{\rho_i}{n_\rho} = V\end{gathered} \tag{6}$$

式(6)の制約条件を，ペナルティ法を用いて目的関数に導入することで以下の QUBO 形式のハミルトニアンを導出することができる．

$$\begin{gathered}\tilde{\eta}(e) + \sum_j A^j\left[W^j - \left(\sum_{i=1}^{n_\rho}\tilde{w}_i^j\rho i\right) + \tilde{\alpha}^j\left(a^j\right) - \tilde{\eta}(e)\right]^2 \\ +B\left(\sum_{i=1}^{n_\rho}\frac{\rho_i}{n_\rho} - V\right)^2\end{gathered} \tag{7}$$

ここで，A^jおよび Bはペナルティ係数であり，W^jは次式である．

$$W^j = f^T u^j + \sum_{i=1}^{n_\rho} \tilde{w}_i^j \rho_i^j \tag{8}$$

3. 最適化例

図-1および**図-2**に，2章で示した手法を用いてコンプライアンス最小化を目的としたトラス構造のトポロジー最適化を実施した例を示す．**図-1**は正解が分かっている簡単な計算例であり，正しく最適化を実施していることが分かった．**図-2**に，比較的複雑な初期配置からの最適化の例を示す．体積制約は4%とした．最適解の妥当性は，古典コンピュータによる結果との比較等により今後検証していく予定である．

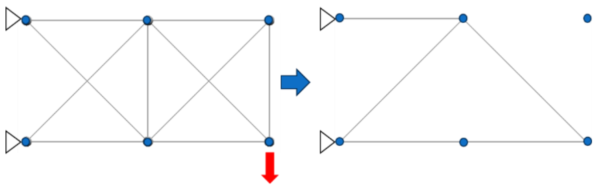

図-1 6 節点トラスのトポロジー最適化結果

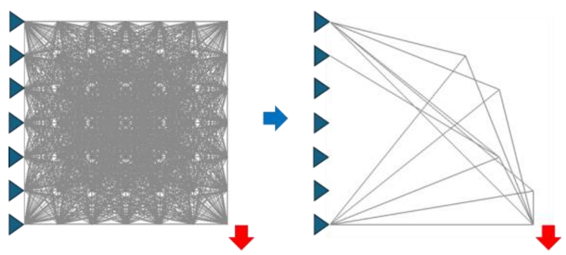

図-2 49 節点トラスのトポロジー最適化結果

4. 結論

本研究では，量子アニーリングおよびGBD法を用いてトラス構造のトポロジー最適化を行う方法を実装した．ごく簡単な計算例により手法の妥当性が示された．なお，本研究では，トラス要素を対象として実装し，検証を行ったが，適用した手法および開発したプログラムはアイソパラメトリック要素にも容易に拡張が可能である．今後は，徐々に複雑な問題に拡張していくとともに，詳細に手法の検証を実施していく予定である．

参考文献

[1] 本田理央，遠藤克浩，鈴木雄大，村松眞由，田中宗：量子アニーリングによるトラス構造最適化手法の開発，計算工学講演会論文集，Vol. 27，2022.
[2] Z. Ye, X. Qian and W. Pan: Quantum Topology Optimization via Quantum Annealing, IEEE Transactions on Quantum Engineering, vol. 4, pp. 1-15, 2023.
[3] E. Muñoz and M. Stolpe: Generalized Benders' Decomposition for topology optimization problems, Journal of Global Optimization, Vol. 51, pp. 149-183, 2011.
[4] Fixstars Amplify: https://amplify.fixstars.com/ja/