

整数線形計画法を用いた Tree-based Orientation 問題の解法

An Integer Linear Programming Approach to the Tree-based Orientation Problem

前田 隼佑 (Shunsuke Maeda)¹

¹ 早稲田大学基幹理工学研究科数学応用数理専攻早水研究室 (Department of Pure and Applied Mathematics, Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University)
e-mail : shunsuke.m0131@moegi.waseda.jp

1 概要

生物系統学の研究分野では距離行列（非類似度）から系統ネットワークを作る手法が普及している。しかし距離に基づいて推定できるのは無向グラフであるため、進化の流れや道筋を直ちに解釈できない。そこで近年では、無向グラフの辺を適切に向きづけして有向系統ネットワークに変換する向きづけ問題が注目されるようになった。例えば、Huber ら [1] は与えられた無向グラフが所望のクラス C の有向系統ネットワークに向きづけをする C -Orientation 問題とその問題を解く FPT アルゴリズムを提案した。その後浦田ら [2] は、任意のクラス C に適用可能な FPT アルゴリズムを提案した。一方で、各クラス C に対して多項式時間で解けるのか、あるいは NP 困難であるのかについては、まだ完全には解明されていない。ただし C が orchard network であるときの NP 困難性は Dempsey ら [3] によって、また tree-based network である場合は Huber ら [1] によって証明されている。

以上の背景を踏まえ、本公演ではクラス C が tree-based network に設定した場合の向きづけ問題 (TREE-BASED ORIENTATION 問題) に対して、整数計画法の定式化による実用的な解法を提案する。

2 準備

文献 [4] と同様の表記を用いる。有限集合 X を生物の現存種を表す集合とし、**リーフ集合**とよぶ。また、 X の要素を **リーフ** という。無向グラフ N が次数 2 の頂点を持たず、次数 1 の頂点集合が X と一致するとき、 N を **無向系統ネットワーク** という。加えて、リーフ以外のすべての頂点の次数が 3 のとき、 N は **二分** であるという。

本研究で扱うすべての有向グラフは、非巡回なグラフ (DAG) である。 X 上の (**根付き**) **有向系統ネットワーク** \vec{N} は、有向非巡回グラフのうち次の 3 つの条件を満たすものである：(1) $\text{indeg}_{\vec{N}}(\rho) = 0$ かつ $\text{outdeg}_{\vec{N}}(\rho) = 2$ となる頂点 $\rho \in V(\vec{N})$ がただ 1 つ存在し、(2) $\text{indeg}_{\vec{N}}(x) = 1$ かつ $\text{outdeg}_{\vec{N}}(x) = 0$ を満たす頂点 x の集合が X と一致し、(3) ρ 以外の頂点の次数は 2 ではない。このとき、入次数 0 の頂点 ρ を **根**、入次数 1 の頂点を **tree vertex**、入次数が 2 以上の頂点を **reticulation** とよぶ。また、根とリーフ以外のすべての頂点の次数が 3 であるとき、 \vec{N} は **二分** であるという。さらに reticulation を持たない有向系統ネットワークを **有向系統樹** という。

次に根付き有向系統ネットワークの一つのクラスである tree-based network の定義を述べる。

定義 1 (Tree-based network) X 上の根付き有向系統ネットワーク \vec{N} が、 X をリーフ集合とする有向系統樹 \vec{T}_{base} に位相同型な全域木 $\vec{T}_{\vec{N}}$ を含むとき、 \vec{N} を *tree-based network* とよぶ (図 1)。このとき、 \vec{T}_{base} を **ベース有向系統樹**、 $\vec{T}_{\vec{N}}$ を **有向全域系統樹** とよぶ。

定義 1 の言い換えとして、有向系統樹 \vec{T}_{base} の tree vertex 間に追加のアークを加えることで得ら

れる有向系統ネットワーク \vec{N} を tree-based network であるといえる。

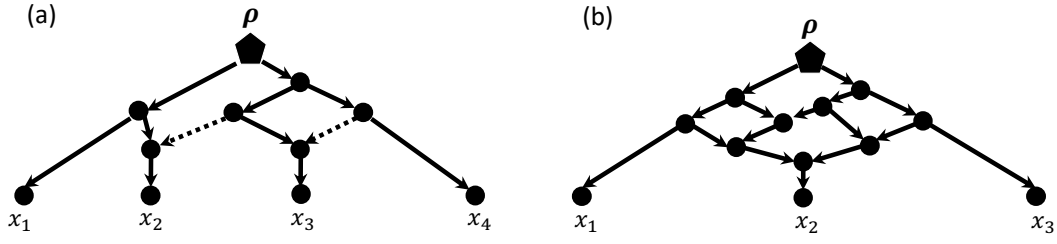


図 1. (a) $X = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ 上の tree-based network \vec{N} . 太線の矢印は X をリーフ集合とする \vec{N} の有向全域系統樹 $\vec{T}_{\vec{N}}$ を示している. (b) $X = \{x_1, x_2, x_3\}$ 上の tree-based network でない有向系統ネットワーク.

3 Tree-based Orientation 問題の定式化

グラフ理論の一般的な文脈では「orienting」とは、無向グラフに向きを与えて有向グラフを得る操作を意味する. しかし本研究では, N のある 1 つの辺 e_ρ に根となる頂点 ρ を挿入して N_ρ を作る操作を N の *rooting* といい, N に rooting した後に N_ρ の各辺に向きを割り当てる操作を N の *orienting* とする. そして本公演では, 以下に定義する問題を扱い, 整数計画法の定式化による解法とその計算機実験の結果を述べる.

問題 2 (TREE-BASED ORIENTATION)

INPUT: 無向系統ネットワーク N

OUTPUT: N が tree-based network に向きづけ可能であるならば, N に向きづけをした tree-based network, そうでないならば NO.

謝辞 本研究に際し, ご指導くださった早稲田大学の早水桃子准教授に深く感謝申し上げます. また本研究の一部は, JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2128 の支援を受けたものである.

参考文献

- [1] K. T. Huber, L. van Iersel, R. Janssen, M. Jones, V. Moulton, Y. Murakami, and C. Semple. Orienting Undirected Phylogenetic Networks. *Journal of Computer and System Sciences*, 140:103480, 2024.
- [2] T. Urata, M. Yokoyama, and M. Hayamizu. Orientability of Undirected Phylogenetic Networks to a Desired Class: Practical Algorithms and Application to Tree-Child Orientation. In *WABI 2024*, volume 312 of *LIPICs*, pages 9:1–9:17, 2024.
- [3] J. Dempsey, L. van Iersel, M. Jones, Y. Murakami, and N. Zeh. A Wild Sheep Chase Through an Orchard. *arXiv preprint arXiv:2408.10769*, 2024. <https://arxiv.org/abs/2408.10769>.
- [4] S. Maeda, Y. Kaneko, H. Muramatsu, Y. Murakami, and M. Hayamizu. Orienting Undirected Phylogenetic Networks to Tree-Child Network, 2023. <https://arxiv.org/abs/2305.10162>.

数理結晶化学：無機結晶化学の定式化に基づくイオン結合性結晶の探索と酸化物結晶構造の系統的解析

Mathematical crystal chemistry II: Random search for ionic crystals and analysis on oxide crystals registered in ICSD

小正路 峻太郎 (Ryotaro Koshoji)¹

¹ 東京大学物性研究所 (The Institute for Solid State Physics)

e-mail : cosaji@issp.u-tokyo.ac.jp

結晶構造は、三つの単位格子ベクトル $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$ により定義される単位格子の中に一つ以上の原子が配置された周期構造である。ここで、 \mathbf{a}_i は三次元ベクトルである。原子座標を $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ として、 $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ という無数の自由度の中から、最もエネルギーの低いわずかな構造だけが合成できる可能性がある。量子力学では、全エネルギーはハミルトニアン固有値として求めることができるが、複数の粒子を含む固有値問題を解くことは実質的に不可能である。近年は密度汎関数理論の発達により、高精度に全エネルギーを近似的に計算できるようになったが計算コストが重く、原子数が数十になると $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ についてのランダム配置リラックス法による結晶構造探索は実質的に不可能となる。

エネルギーは第一原理計算で求め、最適な原子配置を進化型アルゴリズムや粒子群最適化法で探索する手法が、200GPa 程の超高压下での高温超伝導水素化物 LaH_{10} などの予測に成功している。しかし、依然として複雑結晶構造の予測は困難であり、近年は機械学習を用いたエネルギー計算の効率化や期待度の高い初期構造の生成法も研究されている。また、原子が配置できる点を固定された立方体型の単位格子の離散点に制限し、原子間相互作用を二体ポテンシャルで近似してエネルギーの最小化問題を整数計画問題として定式化し、分枝限定法により大域最適解を決定論的に求める手法も考案されている。しかし、結晶構造の対称性である 230 種類の空間群を用いてバイアスをかけて初期構造を生成することが決定的に有効であり、単位格子に 80 個の原子を含むガーネット構造も様々な方法で再現できている。無機結晶構造データベースを参照すると、現在知られている結晶構造は少数の空間群に密集しており、高対称性で少数の原子環境から構成されているものが多いことが分かる。

数理結晶化学では、結晶構造の構成原理を定性的に説明する無機結晶化学を数学的に定式化し、数理計画問題の最適解として結晶構造プロトタイプを形成する [1,2]。まず、化学結合を原子間距離の不等式条件

$$d_{ij\mathbf{T}}^{(G)} \leq |\mathbf{x}_j + \mathbf{T} - \mathbf{x}_i| \leq D_{ij\mathbf{T}}^{(G)}, \quad (1)$$

として定義する。ただし、 G は原子間相互作用の種類（イオン結合・共有結合・金属結合など）に応じた原子間距離拘束条件の種類であり、 $d_{ij\mathbf{T}}^{(G)}$ と $D_{ij\mathbf{T}}^{(G)}$ はそれぞれ最小・最大距離である。 \mathbf{T} は並進ベクトルであり、 m_i を整数として、 $\mathbf{T} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$ と与えられる。今後、単位格子 \mathbf{T} に位置する原子 j を原子 $j\mathbf{T}$ と表記する。無機結晶化学では、化学結合の種類に応じた原子半径の和として原子間距離を見積もるが、数理結晶化学ではその拡張として、原子間距離拘束条件の種類に応じた最小・最大半径を定義し、 $d_{ij\mathbf{T}}^{(G)}$ と $D_{ij\mathbf{T}}^{(G)}$ を

$$d_{ij\mathbf{T}}^{(G)} = r_i^{(G)} + r_j^{(G)}, \quad D_{ij\mathbf{T}}^{(G)} = R_i^{(G)} + R_j^{(G)} \quad (2)$$

と定義する。また、金属間化合物やイオン結合性結晶を含め、結晶構造は原子球の充填構造という側面を持っている。そこで、目的関数を単位格子の体積 Ω として設定し、原子間距離の拘束条件下で単位格子を最小化する連続最適化問題として構造最適化問題を与える。

また、配位多面体などの各原子周りの環境に対する離散的な拘束条件を課していくことで、構造最適化問題の局所最適解数を削減して計算効率を向上させ、実現が期待できる結晶構造のみを構成する。実際、無機結晶化学の知見に基づくと、与えられた化学組成から、各原子が取りうる原子環境を推定できる。例えば、イオン結合性結晶ではカチオンはアニオンに取り囲まれ、大きなカチオンほど多くのアニオンとイオン結合を構成できるため、配位組成に拘束条件を課することができる。さらに、原子 i と原子 $j\mathbf{T}$ 間に、どの種類の原子間距離拘束条件が割り当てられているのかを示す離散値 $n_{ij\mathbf{T}}^{(G)} \in \{0, 1\}$ を導入すると、結晶構造プロトタイプを解として与える最適化問題を定式化できる。

$$\begin{aligned}
& \text{minimize} \quad \Omega \\
& \text{subject to} \quad (1 - \varepsilon) d_\sigma \leq x_\sigma \leq (1 + \varepsilon) D_\sigma \\
& \quad d_\sigma = \max_G \left[n_\sigma^{(G)} \left(r_i^{(G)} + r_j^{(G)} \right) \right] \\
& \quad D_\sigma = \min_G \left[n_\sigma^{(G)} \left(R_i^{(G)} + R_j^{(G)} \right) \right] \\
& \quad \sum_G n_\sigma^{(G)} = 1 \\
& \quad n_\sigma^{(G)} \in \{0, 1\} \\
& \quad n_\sigma^{(G)} \leq \Lambda_\sigma^{(G)}(\Phi, \varepsilon)
\end{aligned} \tag{3}$$

この最適化問題を解いて結晶構造探索を実施した結果、カチオン間の最小距離を十分大きく設定すれば、spinel, pyrochlore (α and β), pyroxene, quadruple perovskite, 銅酸化物超伝導体 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, 鉄系超伝導体 LaFeAsO を唯一解として発見できることが分かった [2]。さらに、ICSD に登録されている酸化物結晶構造が適切なパラメータを選択できれば最適解になれるかを調査した結果、各原子に割り当てた最大最小半径を離散化したにも関わらず、最大 95% が実験構造を保ったまま最適解になれることを確認した [2]。これらの結果は、化学組成から推定できる原子環境への拘束条件を適切に定式化し、原子間相互作用の種類や価数に応じた原子半径を各原子に割り当てることができれば、第一原理計算などでエネルギーを評価することなく、結晶構造プロトタイプを数理計画問題の最適解として探索できることを示唆している。

謝辞

本研究は大倉和親財団に支援して頂きました。計算の際は、東京大学情報基盤センターの FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 (Wisteria/BDEC-01)、および東京大学物性研究所の Supercomputer Center の設備を利用しました。議論してくださった東大物性研の尾崎先生・山浦先生・岡本先生、名古屋大学の矢島先生・平井先生、東京大学の寒野先生・岩田先生に感謝します。

参考文献

- [1] R. Koshoji and T. Ozaki, Phys. Rev. Mater. **8**, 113801 (2024).
- [2] R. Koshoji, Phys. Rev. Res. **7**, 033078 (2025).

3 値ポートフォリオ最適化問題に対する QAOA ミキサーの性能比較

Performance Comparison of QAOA Mixers for Ternary Portfolio Optimization

山村 真太郎 (Shintaro Yamamura)¹, 渡邊 聡 (Satoshi Watanabe)²,

國見 昌哉 (Masaya Kunimi)¹, 齊藤 和広 (Kazuhiro Saito)², 二国 徹郎 (Tetsuro Nikuni)¹

¹ 東京理科大学 (Tokyo University of Science), ² 株式会社 KDDI 総合研究所 (KDDI Research, Inc.)

e-mail : 1225570@ed.tus.ac.jp

1 はじめに

本研究では金融工学におけるポートフォリオ最適化問題に対して、量子アルゴリズムである QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) [1] を適用し、5 種類のミキサー (Standard, XY Ring, XY Parity Ring, XY Full, QAMPA) の性能を、DAX 30 の実データを用いて比較した。

2 ポートフォリオ最適化問題

本研究では、各資産が 3 状態 $z_i \in \{1, 0, -1\}$ (保有・非保有・空売り) をとるモデルを採用し、制約条件をソフト制約として導入したペナルティ付きコスト関数を定義する [2] :

$$F^{(A)}(\mathbf{z}) = q \sum_{i,j=1}^N \sigma_{ij} z_i z_j - (1-q) \sum_{i=1}^N \mu_i z_i + A \left(\sum_{i=1}^N z_i - B \right)^2 \quad (1)$$

ここで、 N はポートフォリオに含まれる資産の総数、 $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_N)$ は各資産の保有状態を表すベクトル、 σ_{ij} は資産 i, j の収益率の共分散 ($\sigma_{ii} = \sigma_i^2$)、 μ_i は資産 i の期待収益率、 B は資産合計に関する制約、 A はペナルティ係数、 $q \in [0, 1]$ は投資家のリスク選好度を表す。

3 QAOA アルゴリズム

QAOA は、コスト演算子 $\hat{U}_F(\gamma) = e^{-i\gamma\hat{F}}$ とミキサー演算子 $\hat{U}_M(\beta) = e^{-i\beta\hat{M}}$ を交互に p 回作用させる量子変分アルゴリズムである。ここで、 \hat{F} はコスト関数に対応するハミルトニアン、 \hat{M} はミキサーハミルトニアンである。初期状態 $|\psi_0\rangle$ に対して、最終状態は以下のように構成される：

$$|\psi(\vec{\gamma}, \vec{\beta})\rangle = \prod_{k=1}^p \hat{U}_M(\beta_k) \hat{U}_F(\gamma_k) |\psi_0\rangle$$

変分パラメータ $(\vec{\gamma}, \vec{\beta})$ を古典的に最適化し、期待値 $\langle \hat{F} \rangle$ を最小化することで近似解を得る。

QAOA における標準的なミキサーである \hat{M}_X は、各量子ビットに対してパウリ \hat{X} 演算子を作用させるものである。一方、XY ミキサーである \hat{M}_{XY} は、量子ビット対 (i, j) 間のスワップ操作に基づき、制約条件を満たす部分空間内での遷移を可能にする [3] :

$$\hat{M}_X = \sum_i \hat{X}_i, \quad \hat{M}_{XY} = \sum_{(i,j) \in S_{M_{XY}}} (\hat{X}_i \hat{X}_j + \hat{Y}_i \hat{Y}_j) \quad (2)$$

ここで、 $S_{M_{XY}}$ は作用させる量子ビット対の集合であり、設計に応じてリング型や全結合型などが選択される。本研究では、標準ミキサー (Standard) に加え、 $S_{M_{XY}}$ の構造を変えた 4 種類の XY ミキサー (Ring, Parity Ring, Full, QAMPA[4]) を実装し、その性能を比較した。

4 結果

資産数 $N = 5$, 投資制約 $B = 2$ の条件のもとで, 異なるミキサーを用いた QAOA の性能を比較した結果を図 1 に示す. 性能評価には, 近似率 r と最適解確率 P を用いた. 近似率 $r \in [0, 1]$ は得られた解と最適解との差を示す指標であり, $1 - r$ が 0 に近いほど良好な解であることを意味する. 最適解確率 P は, 測定結果の中で最適解が得られた割合を表し, その値が 1 に近いほど望ましい性質を示す.

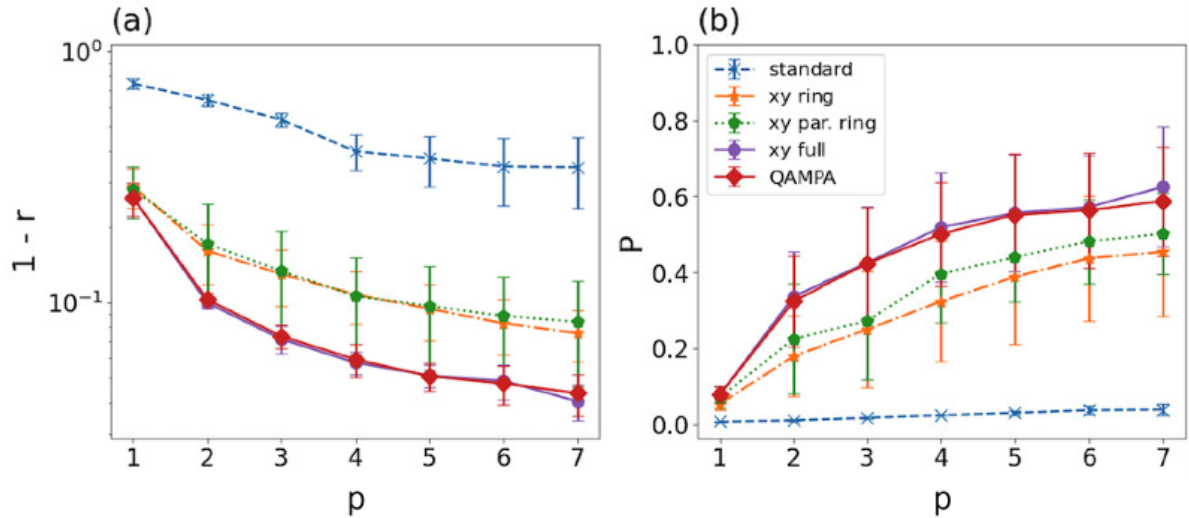


図 1. 資産数 $N = 5$, 投資制約 $B = 2$ のもとで設定した 10 種類のポートフォリオに対し, 5 種類のミキサーを用いた QAOA を p を変えて実行した際の平均近似率と最適解確率を評価した結果を示す. エラーバーは標準偏差を表す.

5 結論

理想環境下では, XY Full ミキサーおよび QAMPA が平均近似率・最適解確率の両面で最も優れた性能を示した. なお, 本稿では紙幅の都合により詳細は省略するが, depolarizing noise を考慮したシミュレーションも実施しており, XY 系ミキサーはいずれもノイズに対して脆弱であり, 性能が大きく低下する傾向が見られた.

謝辞 本研究は, JSPS 科研費 JP25K00215 の助成と国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST) 先端国際共同研究推進事業 (ASPIRE) グラント番号 JPMJAP24C2 の支援を受けたものです.

参考文献

- [1] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, arXiv preprint, arXiv:1411.4028 (2014).
- [2] M. Hodson, B. Ruck, H. C. Ong, D. Garvin, arXiv preprint, arXiv:1911.05296 (2019).
- [3] S. Brandhofer, D. Braun, V. Dehn, G. Hellstern, M. Huls, Y. Ji, I. Polian, A. S. Bhatia, T. Wellens, Quantum Inf. Process., **22**, 25(2022).
- [4] R. LaRose, E. Rieffel, D. Venturelli, arXiv preprint, arXiv:2107.06651 (2021).