

研究報告書

「機械学習の高速化を指向した量子アニーリングの研究」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 2016 年 10 月～2020 年 3 月

研究者: 田中 宗

1. 研究のねらい

量子アニーリングは組合せ最適化問題を高速かつ高精度に処理する計算技術として期待されています。量子アニーリングは、シミュレーテッドアニーリング(焼きなまし法)に類似のイジングモデルの基底状態探索方法として提案された方法です。この提案がなされた後、実際に量子アニーリングを実験的に実現する「量子アニーリングマシン」が開発されました。一方で、量子アニーリングがどのような場面において有効か、どのような場面で活用すべきか、といったことは明らかではありません。本研究では、機械学習における計算処理のどの部分において量子アニーリングマシンを利用するのが適切かを検討し、それを実際の量子アニーリングマシンを実行することによって性能を確かめることにより、機械学習の高速化を目指します。

機械学習における計算処理を量子アニーリングで実行すると言った場合に、大きく二つに分類されます。一つは、機械学習における「学習」に対して量子アニーリングを使うという考え方、もう一つは機械学習における「推論」に対して量子アニーリングを使うという考え方です。

「学習」に対して量子アニーリングを使う場合や「推論」に対して量子アニーリングを使う場合の両方に共通する解決すべき課題は以下の通りです。機械学習における計算処理をイジングモデルで表現すること、それを量子アニーリングマシンに入力すること、量子アニーリングマシン実行の際の各種パラメータ設定を行うこと、量子アニーリングを行った後に得られるイジングモデルの状態を元の問題の解として適切に解釈すること等が挙げられます。これらをまとめると、機械学習の高速化を目指す際には、イジングモデルで表現するというアイディア面と、量子アニーリングマシンの効率を引き出すアルゴリズム実装面の両者を達成する必要があることを意味します。

2. 研究成果

(1) 概要

機械学習の高速化を目指すにあたり、機械学習の「学習」に対して量子アニーリングを適用する場合と、機械学習の「推論」に対して量子アニーリングを適用する場合との両者について検討しました。機械学習の「学習」に対する量子アニーリングの適用については、大きく分けて3つのことを行った。(A) Neven らが提案した QBoost という量子アニーリング向けアルゴリズムを拡張した一般化 QBoost と呼ばれる方法を新たに提案し、量子アニーリングを用いた特徴量選択を行いました。(B) 相互情報量最大化を元にした特徴量選択について、量子アニーリングマシン適用可能な形式を提案しました。これらについてはいくつかの従来手法と比較し、量子アニーリングの有用性を示した例であると言えます。また、機械学習の「推論」に対する量子アニーリングの適用に関しては、(C) ブラックボックス最適化を量子アニーリングで実行し、マテ

リアルズ・インフォマティクスの高速化を行いました。これは、波長選択性のある熱放射メタマテリアルの構造を発見することを題材として検討を進めましたが、離散構造を推定するブラックボックス最適化一般に適用できる形式を提案しており、量子アニーリングの適用範囲を拡大した研究であると言えます。

更に、量子アニーリングを用いた高速化を実行するにあたり有用な (D) 量子アニーリングマシンの高速化につながるアルゴリズム構築を行いました。具体的には、量子アニーリングマシンに新たに追加された「アニールクエンチ」と呼ばれる方法を用いた組合せ最適化処理高速化や、解精度を高めるためのパラメータ設定を適応的に行う方法を提案しました。

(2) 詳細

研究テーマ(A) 量子アニーリングマシンを用いた特徴量選択として、一般化 QBoost の提案

特徴量選択は、多数存在する特徴量のうち、最適な特徴量の部分集合を見つける問題です。言い換えれば、データ説明に重要となる特徴量の組合せを見つける問題と言えます。特徴量選択により、学習時間の減少、モデル精度の向上、過学習の減少、モデル解釈性の向上など、機械学習における重要な課題です。Neven らによつて QBoost と呼ばれる提案された量子アニーリングマシン向け特徴量選択アルゴリズムが提案されていました。これは弱学習器を複数用いて、アンサンブルとして強学習器をつくる Boosting を量子アニーリングマシン適用が可能になる形式としたものでした。本研究では、QBoost の定式化を拡張し、特徴量の個数を直接減らす項を導入し、それを量子アニーリングマシンで実行できる新しい方法を提案しました。典型的な従来手法(線形回帰、ランダムフォレスト、AdaBoost)や、Neven らの提案した QBoost と比較したところ、本研究で提案した一般化 QBoost を用いた場合のほうが誤差関数が小さくなることを確認しました。

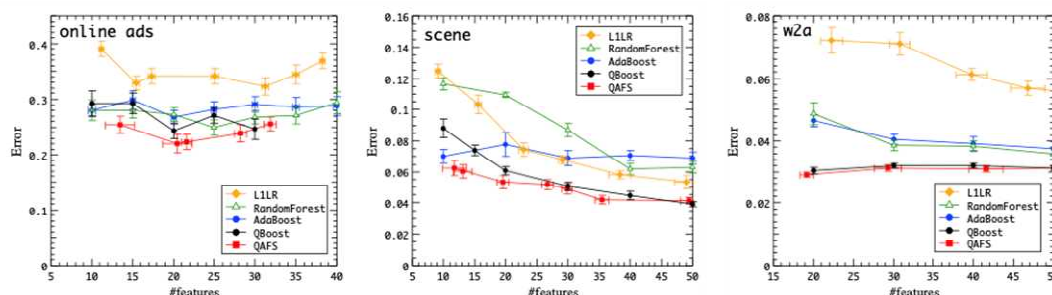


図 1:いくつかのデータセットに対する一般化 QBoost(QAFS、赤)と他従来手法との比較。

研究テーマ(B) 相互情報量最大化をもとにした量子アニーリング向け特徴量選択手法の提案

相互情報量は、それぞれの特徴量間の相関関係を表します。そのため、これを最大化することにより特徴量選択が可能になります。ただし、冗長な特徴量はできるだけ減らしたいという制約を取り込んだ上で、相互情報量をできる限り大きくしたいという目的があります。本研究では、これを量子アニーリングで実装する方法を新たに提案しました。この提案手法と、典型的な既存手法(線形緩和、Truncated power method, タブーサーチ)とで比較した所、用いる特徴量の個数を固定した際、既存の手法に比べ、相互情報量が高くなることを確認しました。

Mutual Information Score

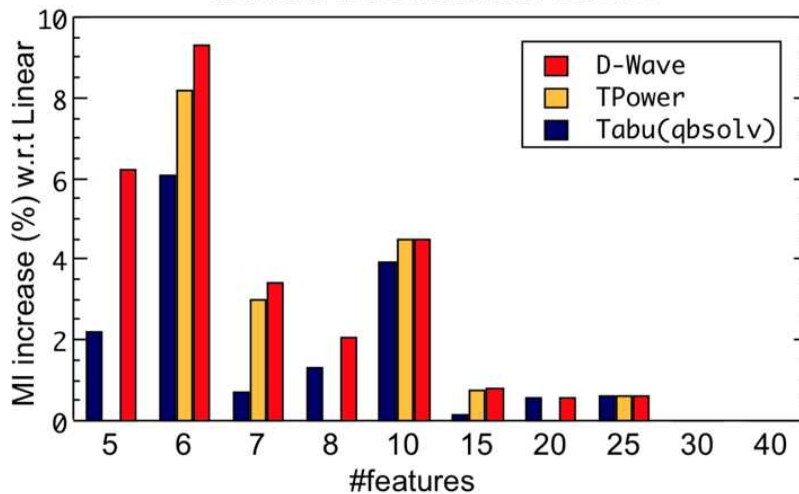
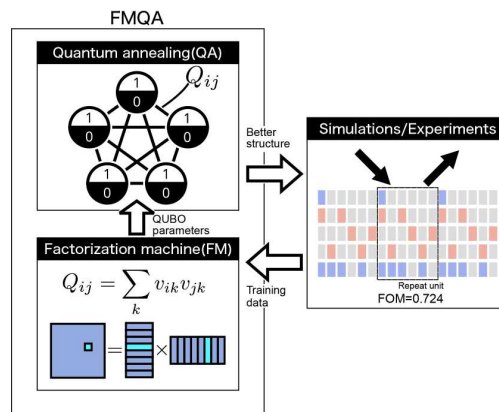


図 2: 提案手法(赤)と既存手法との比較。線形緩和法に比べて相互情報量が高くなる割合。

研究テーマ(C) ブラックボックス最適化を量子アニーリングで実行し、マテリアルズ・インフォマティクスの高速化

マテリアルズ・インフォマティクスは、情報科学的手法を物質科学に適用することで、物質設計を効率化することが一つの目的です。「物質構造が膨大な組合せを持つ場合に、物性値を最大化する物質構造を発見する」という課題に対し、量子アニーリングを用いる方法を提案しました。物質構造が与えられたときに物性値を計算することが可能なシミュレータが既にあるという状況のもと、次にシミュレーションすべき物質構造を探索する、という部分に量子アニーリングマシンを適用するという方法です。シミュレータにより少数の物質構造に対する物性値を予め計算し、データベースを作成しておきます。それを Factorization Machine(FM)を用いてデジタルコンピュータで学習します。FM は量子アニーリングマシンで処理可能なイジングモデルと等価な構造を有することから、学習された関数を量子アニーリングマシンで計算することにより、物性値が高いと期待される物質構造を予測することが可能になります。シミュレータを用いてその物質構造を計算することにより、物性値を計算し、新たにデータベースに追加します。この一連の工程を繰り返すことで、より物性値の高い物質構造を発見できるという仕組みです。デジタルコンピュータのみで一連の工程を行った場合と、量子アニーリングマシンを物質構造予測の部分に用いた場合とで、計算時間の低減が見られました。



Bits	Quantum-classical hybrid			Only classical		
	Selection	Learning	Simulation	Selection	Learning	Simulation
9	361 [sec]	54.9 [sec]	2920 [sec]	236 [sec]	50.0 [sec]	2830 [sec]
12	385 [sec]	53.0 [sec]	3620 [sec]	1730 [sec]	50.4 [sec]	2630 [sec]
15	423 [sec]	51.1 [sec]	3390 [sec]	12500 [sec]	45.0 [sec]	2920 [sec]
18	374 [sec]	52.2 [sec]	3140 [sec]	110000 [sec]	50.3 [sec]	3170 [sec]

図 3: (上)提案手法の計算フロー。(下)量子アニーリングマシンを一部利用した場合(左)と、デジタルコンピュータのみで一連の工程を行った場合(右)の計算時間の比較。

研究テーマ(D) 量子アニーリングマシンの高速化につながるアルゴリズム構築

量子アニーリングマシンの性能を引き出すためには、大きく分けて二通りのアプローチが考えられます。第一に、量子アニーリング過程を表現するパラメータのチューニングを行うこと、第二に、量子アニーリングマシンに入力するイジングモデルのパラメータチューニングを行うこと、です。

第一のアプローチとして、最近、量子アニーリングマシンに導入された新機能である「アニールクエンチ」を用いた計算時間短縮について取り組みました。その結果、従来の量子アニーリングスケジュールを用いた場合に比べて 4 倍の高速化が達成されることを明らかにしました。また、第二のアプローチとして、量子アニーリングに入力するイジングモデルのパラメータチューニングを効率的に行うことで、より精度の高い解が得られることを見出しました。

3. 今後の展開

本研究により、量子アニーリングによる機械学習の高速化に対する様々な基礎的課題を解決したと考えられます。機械学習の「学習」に対する量子アニーリング適用については、利用しやすいソフトウェア開発をすすめることで、提案手法の活用が期待されます。また、機械学習の「推論」に対する量子アニーリング適用、つまり、ブラックボックス最適化を量子アニーリングで実行

する方法については、拡張性が高い方法であると考えられます。そのため、応用範囲は、本研究で検討した波長選択性のある熱放射メタマテリアルの高速発見にとどまらず、離散的組合せで表現可能な材料構造探索や、加工条件を組み合わせることにより、性能の高い物を作り出す製造分野などへの適用も可能であると期待されます。

4. 自己評価

本研究における研究目的の達成状況としては、先に述べたように、機械学習の「学習」に対する量子アニーリングマシン適用、機械学習における「推論」に対する量子アニーリングマシン適用、それら両者に関係するチューニング技術の構築という観点で重要な成果に到達したと考えております。一方で、本研究で得られた成果を他グループが活用するということまでは至っておらず、そのための研究の充実化や成果公開を今後しっかりと行っていく必要があると考えています。

研究の進め方については、個人研究として研究を進めてきましたが、企業研究者を含む多くの研究者との議論を通じて研究をまとめてきたため、さきがけ期間において他分野、他業種の理解を深めたことは、研究者としての今後のキャリアにおいて非常に貴重な機会でした。また、量子アニーリングマシンをクラウド利用するに当たり十分な研究費のご支援を頂いたことは、本研究遂行において大変ありがたいことでした。

研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果としては、機械学習の高速化を量子アニーリングで行うための基礎的な課題を複数解決しており、特に、研究テーマ(C)におけるブラックボックス最適化に関しては、メタマテリアル設計のみならず幅広い応用が可能であると期待されます。この研究成果を元に、社会科学等への適用を含む様々な学術的研究へ展開することが重要だと考えます。更に社会実装に向けて、産学共同研究を含む様々な協力関係を構築し、利用しやすいソフトウェア開発等を進めることで、より幅広い展開が見込まれる成果が得られたと考えております。

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

1. Kotaro Terada, Daisuke Oku, Sho Kanamaru, Shu Tanaka, Masato Hayashi, Masanao Yamaoka, Masao Yanagisawa, and Nozomu Togawa, “An Ising model mapping to solve rectangle packing problem”, Proceedings of 2018 International Symposium on VLSI Design, Automation and Test (VLSI-DAT), pp. 1-4 (2018).
2. Sho Kanamaru, Daisuke Oku, Masashi Tawada, Shu Tanaka, Masato Hayashi, Masanao Yamaoka, Masao Yanagisawa, and Nozomu Togawa, “Efficient Ising Model Mapping to Solving Slot Placement Problem”, Proceedings of 2019 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE), pp. 1-6 (2019).
3. Yuya Seki, Shu Tanaka, and Shiro Kawabata, “Quantum Phase Transition in Fully Connected Quantum Wajnflasz-Pick Model”, Journal of the Physical Society of Japan, 88, 054006-1-12 (2019).
4. Kotaro Tanahashi, Shinichi Takayanagi, Tomomitsu Motohashi, and Shu Tanaka,

“Application of Ising Machines and a Software Development for Ising Machines”, Journal of the Physical Society of Japan, 88, 061010–1–10 (2019).

5. Koki Kitai, Jiang Guo, Shenghong Ju, Shu Tanaka, Koji Tsuda, Junichiro Shiomi, and Ryo Tamura, “Designing Metamaterials with Quantum Annealing and Factorization Machines”, Physical Review Research (Accepted)

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 0 件 (公開前の出願件名については件数のみ記載)

(3) その他の成果 (主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. (英文書籍) “Quantum spin glasses, annealing and computation”
Shu Tanaka, Ryo Tamura, Bikas K. Chakrabarti, Cambridge University Press (2017).
2. (国際会議招待講演) “Basics and Applications of Quantum Annealing”
Shu Tanaka, 2nd Electron Devices Technology and Manufacturing (EDTM) Conference 2018 (EDTM2018), Ariston Hotel Kobe, Japan, March 13, 2018.
3. (国際会議チュートリアル招待講演) “Recent Development and Future Perspective of Quantum Annealing”
Shu Tanaka, 24th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP–DAC2019), Tokyo Odaiba Waterfront, Japan, January 21, 2019.
4. (国際会議招待講演) “Theory of Ising Machines and a Common Software Platform for Ising Machines”
Shu Tanaka, 25th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP–DAC2020), China National Convention Center, Beijing, China, January 16, 2020.
5. (国際シンポジウム招待講演) “Quantum Annealing Accelerates Material Discovery”
Shu Tanaka, MANA International Symposium 2020 Jointly with ICYS, Tsukuba International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, March 1, 2020.