

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「Society 5.0 を支える革新的コンピューテ
ィング技術」
研究課題「学習/数理モデルに基づく時空間展開
型アーキテクチャの創出と応用」

研究終了報告書

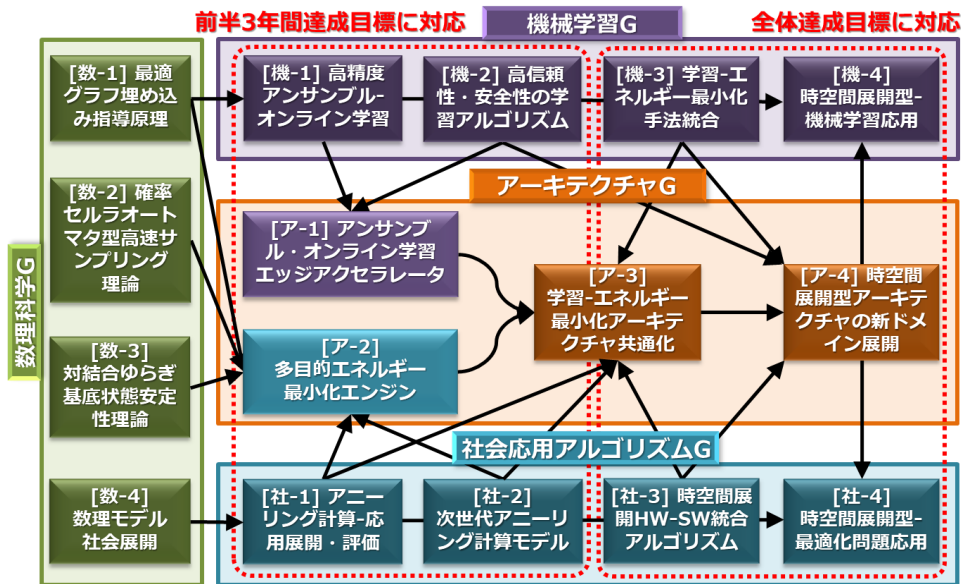
研究期間 2018年10月～2024年03月

研究代表者: 本村 真人
(東京工業大学 科学技術創成研究院
教授)

§1 研究実施の概要

(1) 実施概要

下図の4グループ体制・研究項目で研究を進めてきた。数理科学、機械学習、アルゴリズム、アーキテクチャ、社会応用に跨る大型・分野横断型・多拠点の研究体制のもと、機械学習と離散最適化の融合を志向：野心的な研究テーマ群を立てたことが大きな特徴である。



図(1)-1. 研究体制及び研究項目

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1. 様々なマルコフ連鎖を用いたアニーリングの基礎研究(数理科学 Gr)

社会に偏在する組合せ最適化問題は、イジング模型の基底状態を探索する問題に翻訳される。その解候補を見つける方法の一つとして、Gibbs 分布を平衡分布に持つマルコフ連鎖モンテカルロ法(MCMC)が今でも頻繁に使われる。しかし、従来の MCMC は逐次的スピン更新を採用したものが多く、その低速性が一つの課題であった。これに対し、拘束項を導入して基底状態を保証しつつ並列スピン更新を可能とした確率的セルオートマトン(SCA: Stochastic Cellular Automata)を提案し、高温混合性やシミュレーテッドアニーリングの適用可能性などの基本的な性質を数学的に証明した(J. Stat. Phys., 2023)。他方、その拘束項のせいで低温相における収束が非常に遅くなってしまう現象や、結合定数の反強磁性度合いが強い場合に励起状態間を長い間振動する現象に苛まれた。そこで、拘束項の効果を或る意味弱めた ε SCA を提案し、富士通のデジタルアニーラー(DA)を含めた4つのMCMCの中でどれが最大カット問題を適切に解くことができるか、結合定数の反強磁性度合いに関するアトラスを作成した(アーキテクチャ Gr と共同)。理論的にも、DA の基本的な性質を証明し(J. Stat. Phys.に受理、近日掲載)、 ε SCA の基本的な性質を証明した(投稿準備中)。

2. 全結合・全並列アニーリングアルゴリズムとそのハードウェアアーキテクチャ(アーキテクチャ Gr)

並列スピン更新アルゴリズム SCA の数理モデルに基づく全並列スピン更新アーキテクチャを考案し、STATICA チップとしてハードウェア実現した。STATICA は 512 スピンの全結合イジングモデルの全並列スピン更新ができるチップであり、シミュレーテッドアニーリングベースのアーキテクチャに比べると、原理的にスピン数倍の高速化が可能となる。ISSCC2020 で発表・デモを行った。ニアメモリ型のアーキテクチャの効果により従来のハードウェアアニーラに

比べて二桁の電力効率が向上することから、組合せ最適化問題の新たなソルバエンジン実現への基礎となる。

3. 離散最適化問題に関する多様な解の発見(機械学習 Gr)

機械学習 Grの研究項目③「時空間展開型-機械学習応用」に関して、最適解をひとつだけ求めるのではなく、準最適解も含めて複数の多様な (互いに似ていない) 解を求める一般的な手法を開発した。問題の多項式時間可解性、計算困難性、固定パラメータ容易性、近似可能性などの様々な観点の結果を得ることに成功した。これらは、ハードウェア指向の高速学習器の運用において、学習器により生成された多数の予測モデルから、少数の高品質で多様なモデルの組合せを選択する必要があるが、そのための基礎技術を提供する。これらの結果は既存の離散最適化問題を新しい方向へ拡張しており、その独創性や重要性が認められ、人工知能のトップ会議である AAAI に論文が3年連続(2021～2023)で採択・発表された。

< 科学技術イノベーションに大きく寄与する成果 >

1. メタモルフィックなアニーリングの概念・方式提案とそのハードウェア実現(アーキテクチャ Gr)

アーキテクチャ Gr、数理科学 Gr、社会応用アルゴリズム Gr の連携により、組合せ最適化問題を表現するイジングモデルと最適なアニーリング原理の関係を明らかにするとともに、アニーリング原理をプログラマブル(メタモルフィック)に変更できるアニーリングプロセッサ LSI「Amorphica」を開発した。Amorphica LSI を用いて構築したシステムは、問題に応じて最適な原理を使用できる利点を活かし、対 GPU 比で約3万倍という極めて高い電力効率を達成した。Amorphica の持つ柔軟性を利用すれば、実社会の多様な問題をひとつのプラットフォームで効率的に解決できる。本成果は、集積回路分野の最難関国際会議 ISSCC 2023 に採択され、発表時には大きな注目を集めた。

2. バイナリ決定木学習方式の提案とそのハードウェア(FPGA)実現(アーキテクチャ Gr)

アーキテクチャ Gr の研究項目①「アンサンブル・オンライン学習エッジアクセラレータ」において、バイナリ特徴量分解を基盤とする決定木アンサンブル学習の高速化・高効率化アーキテクチャを開発した。具体的には、各特徴量を複数のバイナリ特徴量に分割し、バイナリ特徴量で学習を行うことにより、各ノードの学習タスクを(特徴量、閾値)のペアの探索からバイナリ特徴量の探索へと単純化する手法を導入した。更に、各ノードの学習において選択されるランダムなバイナリ特徴量候補を少なくしても、従来法と同等の予測性能を持つモデルの学習が実現可能であることを確認した。提案アーキテクチャの効率性は、VC707 FPGA ボードを用いて実証され、FCCM 2023 という FPGA・リコンフィギュラブルシステム分野のトップ国際会議でその成果を発表した。

3. 説明可能機械学習のための反実仮想説明の生成手法の開発(機械学習 Gr)

機械学習 Grの研究項目②「高信頼性・安全性の学習アルゴリズム」に関して、機械学習により得られた予測器で良くない結果が予測される場合に、良い結果が予測されるようにするためには何を变えればよいかの説明を生成する問題を、整数計画の最適化問題として定式化して解く方法を開発した。とくに、決定木アンサンブル学習器を含む加法的予測モデルのクラスを対象に、従来手法を拡張して、実際のデータ分布を考慮した説明と、改善順序を指示する説明、任意の入力に対する説明を与える決定木を生成する方法の開発に成功した。これらの成果は、人工知能のトップ会議 IJCAI2020, AAAI2021、機械学習のトップ会議 AISTATS2022 に採択・発表され、人工知能学会の論文賞も受賞した。また「望む結果を得るための手順を導くことができる AI を開発」として報道された(2020 日本経済新聞)。

< 代表的な論文 >

1. Amorphica: 4-Replica 512 Fully Connected Spin 336MHz Metamorphic Annealer with Programmable Optimization Strategy and Compressed-Spin-Transfer Multi-Chip Extension

(Kazushi Kawamura, Jaehoon Yu, Daiki Okonogi, Satoru Jimbo, Genta Inoue, Akira Hyodo, Ángel López García-Arias, Kota Ando, Bruno Hideki Fukushima-Kimura, Ryota Yasudo, Thiem Van Chu, Masato Motomura, ISSCC 2023)

問題に応じて 4 種類の原理を使い分けることのできるアニーリングプロセッサ「Amorphica」を開発した。Amorphica は複数チップ接続による拡張性を備え、4 チップ接続により最大 2048 スピンを扱うことが可能である。評価結果から、対 GPU 比で約 3 万倍の電力効率を達成した。本論文の成果は、日刊工業新聞やマイナビニュースなど、多数のメディアで取り上げられた。

2. B.H. Fukushima-Kimura, S. Handa, K. Kamakura, Y. Kamijima, K. Kawamura and A. Sakai. Mixing time and simulated annealing for the stochastic cellular automata. *Journal of Statistical Physics* 190 (2023): Article 79.

拘束項を導入して基底状態を保証しつつ並列スピン更新を可能とした SCA の高温混合性やシミュレーテッドアニーリングの適用可能性などの基本的な性質を数学的に証明した。

3. DACE: Distribution-Aware Counterfactual Explanation by Mixed-Integer Linear Optimization (Kanamori, Takagi, Kobayashi, Arimura, IJCAI2020)

高信頼性・安全性の学習アルゴリズムに関して、決定木アンサンブル学習器を含む広範な予測モデルのクラスに対して、データの分布に依存したマハラノビス距離を用いてユーザにとってより実現が容易な改善点を説明する、整数計画法に基づく反実仮想説明の生成法を開発した。Goodle Scholar による被引用数が 90 件超 (2023. 10. 1 現在) に達し、発展論文は人工知能学会で論文賞を受賞している。

§2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

グループ名	研究代表者または 主たる共同研究者の 氏名	研究代表者または 主たる共同研究者の 所属機関・部署・役職名
アーキテクチャ (本村) グループ	本村 真人	東京工業大学・科学技術創成研究院・教授
機械学習 (中村) グループ	中村 篤祥(2021年度～) (～2020年度までは 有村 博紀教授)	北海道大学・大学院情報科学研究院・教授
社会応用 アルゴリズム (湊) グループ	湊 真一	京都大学・大学院情報学研究科・教授
数理科学 (坂井) グループ	坂井 哲	北海道大学・大学院理学研究院・教授

以上の4研究グループ体制で研究を進めてきた。研究項目の関係は図(1)-1の通りである。

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

- (a) 本 CREST 領域の戸川教授(早稲田)の「地理空間情報を自在に操るイジング計算機の新展開」チームとは、多面的なアニーリング最適化処理の連携を行っている。アーキテクチャ Gr の川村特任助教を中心として社会応用に向けた最適化問題ベンチマーク処理例をシェア頂いて本プロジェクト側で評価する活動を進めている他、アニーリング最適化アルゴリズムの面でも、意見交換を進める中で新しいアイデアが生まれつつある。
- (b) これ以外に、アニーリング最適化に関しては、本プロジェクトで提案した STATICA/Amorphica(詳細は後述)技術を、国内の主要なアニーリング技術の関係チーム(企業及び大学)5 者以上に既に紹介し、今後の協業の道筋をつけている。特に、量子アニーリング系のスタートアップとして知られている Jij とは、Jij が開発している最適化プラットフォームに我々の技術を組み込むべく、継続的に打ち合わせを行っている。
- (c) アーキテクチャ Gr メンバーの高前田准教授(東大)の提案が「信頼される AI システムを支える基盤技術」CREST 領域に採択された(テーマ名「D3-AI: 多様性と環境変化に寄り添う分散機械学習基盤の創出」)。D3-AI は、本時空間展開 CREST でのアルゴリズム-アーキテクチャ協創の取り組みを土台として、更に深く信頼される AI 分野に切り込んでいくプロジェクトである。
- (d) 社会応用アルゴリズム Gr リーダーの湊教授(京大)の科研費・学術変革(A)「アルゴリズム基盤」がスタートし、一部の社会応用アルゴリズム Gr メンバーが双方に参加している。こちらともアルゴリズム-アーキテクチャ連携が始まっており、更に深みを増したアルゴリズム的知見の投入を期待している。
- (e) アニーリング技術のアーキテクチャ提案に関しては世界的にトップグループとして目されるようになっており、シンガポール国立大学、南洋大学、UC Santa Barbara、国立台湾大学、香港科技大などから共同研究を打診され、検討中である。