

令和 5 年 6 月 17 日現在

機関番号：11501

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2022

課題番号：20K23342

研究課題名（和文）統計力学的近似と解析に基づく量子機械学習の理論および実装法の構築

研究課題名（英文）Developing theory and implementation for quantum machine learning based on statistical mechanical approaches

研究代表者

高橋 茶子（Takahashi, Chako）

山形大学・大学院理工学研究科・助教

研究者番号：60878297

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：研究期間全体を通して、量子機械学習の枠組みに拡張が期待できる機械学習の基礎的な問題に取り組むことができた。量子機械学習への応用を考えるにあたって重要なモデルクラスであるマルコフ確率場において、自由エネルギーをAnnealed Importance Sampling（焼きなまし重点サンプリング）と呼ばれるサンプリング法を用いて近似的に評価する方法を開発したことが主な成果である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で扱ったマルコフ確率場に属する統計的機械学習モデルは非常に広汎な用途を持ち、特に現在の人工知能技術を支える深層学習モデルや生成モデルなどの基礎モデルである制限ボルツマンマシンに対する理論面での貢献があると考えられる。また、量子機械学習モデルへの拡張がすでに提案されている機械学習モデルも扱ったことから、本研究の成果が今後の量子機械学習における理論的または数値的な知見を与える可能性もある。

研究成果の概要（英文）：We addressed fundamental problems in machine learning that are expected to be extended to the quantum machine learning framework. The main result is developing a method for the approximate evaluation of free energy in Markov random fields, an important model class when considering applications to quantum machine learning, using a sampling method called annealed importance sampling.

研究分野：統計的機械学習、情報統計力学

キーワード：ボルツマンマシン 統計的機械学習

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

データを活用するための取り組みとして統計的機械学習が広く実践されるようになった。統計的機械学習への情報科学以外の観点からのアプローチは年々盛んになっており、物理学のうち量子力学分野では、量子力学的な効果(量子ゆらぎ)を取り入れることで拡張した機械学習モデルを扱う研究領域は量子機械学習 [Biamonte et al., 2017; Schuld and Petruccione, 2018] と呼ばれ始めた。従来の機械学習モデルに比べて量子機械学習モデルが飛躍的に優位な性能を示すことが、古典コンピュータを用いた量子ゆらぎの再現法(量子モンテカルロ法)による数値実験を通していくつか報告されている [Amin et al., 2018]。

また、量子機械学習モデルを実装できる新しいタイプの計算機(量子アニーラ)が登場したことにより、量子モンテカルロ法の計算時間のボトルネック部分を量子アニーラの計算で置き換え、学習の高速化を図るという方針も模索されている。探索的な段階にある量子機械学習の研究は、このように急激に進展しつつあるものの、量子機械学習モデルの持つ複雑さに起因して理論研究が困難であるという現状がある。

## 2. 研究の目的

本研究では、「量子機械学習がうまくいく条件は何か? 従来の機械学習に対する理論的優位性は示せるか?」「量子機械学習アルゴリズムを古典コンピュータで高速に実行することはできるか?」に対する答えを、統計力学の手法を用いて用意することを当初の目的としていた。具体的には、下記の2点を目的に掲げていた。

(1) 統計力学の解析手法を用いて量子機械学習が原理的に持つ性能を理論的に評価し、量子ゆらぎの導入が与える影響を統計的機械学習理論の見地から明らかにする。

(2) 統計力学の近似手法を用いて、古典コンピュータで実装可能な効率的な量子機械学習アルゴリズムを開発し、理論と実験の両面から性能を評価する。

研究期間開始後は当初の方針を転換し、量子機械学習モデルやアルゴリズムを直接扱うのではなく、まずは一般的な(古典)統計的機械学習モデルに対するアプローチを中心にして研究を行うこととした。

## 3. 研究の方法

統計的機械学習においてしばしば用いられるボルツマンマシンや制限ボルツマンマシンなどのモデルを含むマルコフ確率場を主な対象として、解析やアルゴリズムの開発を行う。マルコフ確率場のさまざまな計算アルゴリズムには、統計力学におけるイジング模型に対して用いられてきた統計力学的近似法や、それらを発展させた手法がよく用いられる。本研究では、主に annealed importance sampling や平均場近似と呼ばれる近似手法を用いた。

また、本研究のメインではなく副産物的な位置にはなるが、敵対的機械学習のいくつかのテーマについて後述のような成果が得られた。これらの研究で扱ったモデルはいずれも量子機械学習モデルへの拡張がすでに提案されており、前述の統計力学的近似法を用いたアルゴリズム開発が期待されるため、本研究のメイン部分とも関連が深い。

## 4. 研究成果

### (1) 周辺化 annealed importance sampling による自由エネルギー評価

統計的機械学習モデルにおける自由エネルギーとは、モデルの分配関数の負の対数をとった量のことである。統計的機械学習以外のさまざまな分野においても、確率モデルの自由エネルギーの評価は重要な課題である。本研究で対象とする確率モデルのマルコフ確率場にはさまざまな種類があり、例えば統計的機械学習においてしばしば用いられるボルツマンマシンや制限ボルツマンマシン、深層機械学習モデルである深層ボルツマンマシンなどのモデルの計算処理において、自由エネルギーの計算が必要になる場合が数多くある。しかしながら、分配関数の計算には指数関数的な計算量が必要であり、ほとんどの場合厳密に計算することが難しいため、何らかの効果的な近似を用いることが一般的である。

自由エネルギーの近似に用いられる近似法の一つに、annealed importance sampling (焼きなまし重点サンプリング法) と呼ばれるサンプリング法がある。本研究では、周辺化された確率モデルにおける annealed importance sampling を用いた自由エネルギー評価法を定式化し、周辺

化を行わない通常の高率モデルに対して annealed importance sampling を行う場合と比べて、高精度に自由エネルギーを近似できることを理論的に示した。また、制限ボルツマンマシンを用いて人工データによる数値実験を行い、周辺化された制限ボルツマンマシンに対する annealed importance sampling による自由エネルギー近似がもとの制限ボルツマンマシンに対する annealed importance sampling に比べて優れた精度で計算できることを示した (図1を参照)。

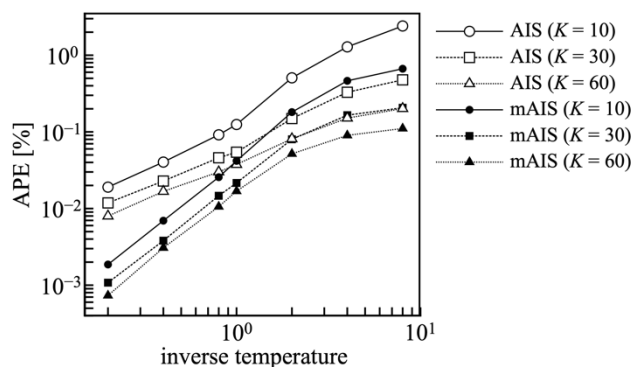


図1: 制限ボルツマンマシンにおける自由エネルギー近似の数値実験における、平均絶対パーセント誤差 (APE)。APE が小さいほど、自由エネルギー近似の性能が優れていると解釈できる。横軸は逆温度と呼ばれるパラメータである。AIS は周辺化していない場合の annealed importance sampling であり、mAIS が周辺化したモデルに対する annealed importance sampling である。結果は 1000 回の試行の平均値をプロットしたものである。

## (2) 量子機械学習モデルへの拡張が期待される、敵対的機械学習に関する研究成果

統計的機械学習におけるマルコフ確率場モデルや量子機械学習のモデルを直接扱ったわけではないものの、量子の枠組みへの拡張が期待できる機械学習の分野として、敵対的機械学習についての研究テーマもいくつか扱った。敵対的機械学習とは、機械学習を用いたシステムや、機械学習に用いるデータなどを対象とした敵対的攻撃や、それらに対する防御などの対策を扱う分野の総称であり、機械学習の発展に伴って近年研究が進んでいる分野である。これまでに報告されている敵対的攻撃は、敵対的サンプル攻撃、ポイズニング攻撃、抽出攻撃の3種類に大別される。敵対的サンプル攻撃およびポイズニング攻撃について得た成果のうち、一部を下記に報告する。

① グラフ構造を持ったデータの機械学習にしばしば用いられるグラフニューラルネットワークと呼ばれるモデルを対象として、グラフに単一のノードを追加するだけの敵対的サンプル攻撃を定式化し、ノード分類問題を解くグラフニューラルネットワークに対して有効であることを数値的に示した。グラフニューラルネットワークを量子の枠組みに拡張した量子グラフニューラルネットワークはすでに提案されており [Verdon et al., 2019a]、本成果はこのような量子モデルに対する理論的・数値的評価の基礎となる可能性がある。

② 教師データが少数しか入手できない場合のモデルの学習方法として、メタ学習と呼ばれる枠組みが提案されている。本研究では、勾配法に基づくメタ学習によって訓練した畳み込みニューラルネットワークに対するバックドアポイズニング攻撃の影響を数値的に調べた。近年は量子メタ学習の試みも始まっており [Verdon et al., 2019b]、本成果が今後の量子メタ学習における敵対的攻撃についての研究に対し、何らかの知見を提供する可能性がある。

### <引用文献>

[Biamonte et al., 2017] Biamonte, Jacob, et al. "Quantum machine learning." Nature 549.7671 (2017): 195-202.

[Schuld and Petruccione, 2018] Schuld, Maria, and Francesco Petruccione. Supervised learning with quantum computers. Vol. 17. Berlin: Springer, 2018.

[Amin et al., 2018] Amin, Mohammad H., et al. "Quantum boltzmann machine." Physical Review X 8.2 (2018): 021050.

[Verdon et al., 2019a] Verdon, Guillaume, et al. "Quantum graph neural networks." arXiv preprint arXiv:1909.12264 (2019).

[Verdon et al., 2019b] Verdon, Guillaume, et al. "Learning to learn with quantum neural networks via classical neural networks." arXiv preprint arXiv:1907.05415 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Muneki Yasuda, Chako Takahashi	4. 巻 106
2. 論文標題 Free energy evaluation using marginalized annealed importance sampling	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.106.024127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件／うち国際学会 3件）

1. 発表者名 屋敷真吾, 高橋茶子, 鈴木幸太郎
2. 発表標題 データ拡張を用いた GNN に対するバックドア攻撃
3. 学会等名 2023年 暗号と情報セキュリティシンポジウム (SCIS2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 川口和久, 豊永憲治, 高橋茶子, 中井雄士, 鈴木幸太郎
2. 発表標題 グラフスペクトルのステガノグラフィへの応用
3. 学会等名 日本応用数理学会第19回研究部会連合発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 川口和久, 豊永憲治, 高橋茶子, 中井雄士, 鈴木幸太郎
2. 発表標題 グラフスペクトルを用いたグラフに対するステガノグラフィ
3. 学会等名 RCC・ISEC・IT・WBS合同研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Chako Takahashi
2. 発表標題 Weight parameter estimation from compressed data on Boltzmann machines via L2-norm minimisation
3. 学会等名 The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ganma Kato, Chako Takahashi and Koutarou Suzuki
2. 発表標題 Backdoor poisoning attacks on meta-learning-based few-shot classifiers
3. 学会等名 The 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 加藤頑馬, 高橋茶子, 鈴木幸太郎
2. 発表標題 メタ学習に基づく Few-Shot 分類に対するバックドアポイズニング攻撃
3. 学会等名 情報処理学会第190回マルチメディア通信と分散処理・第96回コンピュータセキュリティ合同研究発表会 (DPS190/CSEC96)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安田宗樹, 高橋茶子
2. 発表標題 周辺化 annealed importance sampling による自由エネルギー評価
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shingo Yashiki, Chako Takahashi, Koutarou Suzuki
2. 発表標題 Targeted universal adversarial examples via single node injection on graph convolutional networks
3. 学会等名 2021 International Conference on Advanced Informatics: Concepts, Theory and Applications (ICAICTA2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 加藤頑馬, 高橋茶子, 鈴木幸太郎
2. 発表標題 メタ学習に基づく Few-Shot 分類に対するバックドアポイズニング攻撃
3. 学会等名 情報処理学会第190回マルチメディア通信と分散処理・第96回コンピュータセキュリティ合同研究発表会 (DPS190/CSEC96)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安田宗樹, 高橋茶子
2. 発表標題 周辺化 annealed importance sampling による自由エネルギー評価
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 執筆者：70名、技術情報協会	4. 発行年 2022年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 560
3. 書名 機械学習・ディープラーニングによる“異常検知”技術と活用事例集	

〔産業財産権〕

〔その他〕

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------