

令和元年6月14日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15H03699

研究課題名(和文)量子アニーリングが拓く機械学習と計算技術の新時代

研究課題名(英文)New era driven by quantum annealing for machine learning and computation

研究代表者

大関 真之 (Ohzeki, Masayuki)

東北大学・情報科学研究科・准教授

研究者番号：80447549

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,900,000円

研究成果の概要(和文)：基盤研究Bの課題としてあげた「素因数分解と計算量の関係」と「量子アニーリングの非自明な量子揺らぎの利用」について、2つの成果を上げることができた。まず前者については、素因数分解においてエネルギーとエントロピーの構造を解析することにより、自由エネルギー形状が明らかとなった。後者の結果については、全く予想もしていない大きな進展であり、いわゆる量子モンテカルロ法でシミュレートできないとされる非擬似古典確率的な系であっても、適応的な横磁場を用いることで量子モンテカルロ法を実行することができることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

素因数分解の問題について、2度の相転移を経る構造を持っている可能性を示唆する結果も得ており、単純な断熱的な量子アニーリングを実行するのではなく、非断熱的な量子アニーリングを実行する価値があることがわかる。

限定的な計算手法ではあるものの、このアイデアを拡張することによって新しい研究計画の策定を伴い、D-Wave Systems社の量子アニーリングマシンを利用した研究活動の展開について企図することとなった。量子アニーリングマシンを利用することで、量子モンテカルロ法にかかる計算時間を大幅に縮減する可能性がある。いずれの成果も量子アニーリングの活用の方向性を示すものであり、単純な横磁場から脱却を促す。

研究成果の概要(英文)：Two achievements have been attained with regard to "the relationship between prime factorization and computational complexity" and "the use of non-trivial quantum fluctuation of quantum annealing" mentioned in the subjects of basic research B.

For the former, the free energy shape is clarified by analyzing the structure of energy and entropy for prime number decomposition.

The latter half of the result is a large progress that is never predicted, and even for non-stochastic systems that can not be simulated by the quantum Monte Carlo method in a straightforward way, the quantum Monte Carlo method can be implemented using an adaptive transverse magnetic field.

研究分野：機械学習、量子力学、統計力学

キーワード：量子アニーリング 機械学習 負符号問題

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

物流における配送経路の選択、荷物の配分等を始めとして、システム的设计にはコストの低減と同時に効率を求め、利便性の高い最適解が求められる。これを数理的に定式化したものを最適化問題と呼ぶ。大規模なシステムにおいて、数え上げの手段で最適解を求めるのは手数が指数関数的に増加するため事実上不可能となる。そこで確率的探索により最適解を目指す手法があり、熱揺らぎを用いた熱アニーリング、量子揺らぎを利用した量子アニーリングがある。後者は特に近年 D-wave 社の実装報告から、その学術的な検証研究が徹底的に行われ、産官学を超えた注目が寄せられている。

2. 研究の目的

本研究課題では、ごく最近カナダの民間会社 D-wave が実現したとされる、量子コンピュータの基本技術の量子アニーリングの有効性を既存の観点とは異なる側面から明らかにする。これまで量子アニーリングはその基礎的検討と巡回セールスマン問題に代表される難しい最適化問題の解法としての性能評価が行われてきた。本研究課題では、より着実に評価できる明示的な事例として素因数分解問題を通して決着させる。またそのような特殊な問題に閉じない、より汎用的な諸問題、特に主に現代の社会基盤技術を支える機械学習に現れる最適化問題の解法としての量子アニーリングの性能について領域横断的な研究を行う。

3. 研究の方法

研究期間の前半期には、量子アニーリングの計算技術としての可能性を、これまでの相転移の性質だけではなく、多数回の相転移などの相転移の構造に注目して明らかにする。特に一般に広く知られた素因数分解の量子計算による加速問題を、量子アニーリングの視点から相転移の構造の問題に置き換えて集中的検討を行う。後半期には、現代の基幹技術である機械学習への利用を見据えて、連続状態量子アニーリングの提案及び性能評価を通じて、量子アニーリングの“つかえる技術”としての昇華を目指す。従来型のアルゴリズムの性質から適切な実装法を検討することで、量子アニーリングそのものの高速化法についても整備する。

4. 研究成果

量子アニーリングを利用した際に、量子ゆらぎを利用した最適化問題を解くという点に焦点が当てられるが、この量子ゆらぎを残したままに結果とすると、量子ゆらぎによる非自明な効果を利用することができる。今年度の研究成果として顕著なものは、機械学習における最適化問題において、量子ゆらぎを利用した最適化を実行した場合に、汎化性能と呼ばれるコスト関数以外に解の性質の評価を行うことで、量子ゆらぎの効果を検証したものが挙げられる。量子ゆらぎを導入した場合に、汎化性能が向上するということ、いわゆるニューラルネットワークの最適化問題において確認した。汎化性能が向上するメカニズムについても検討を行い、トンネル効果による離脱だけでなく、量子ゆらぎが持つ広い谷の極小を選択的に選ぶ性質についても議論した。機械学習といった応用例についての量子ゆらぎの効果だけでなく、純粹に量子系の性質を探るといった基礎科学に資する部分の研究についても充実した成果をあげることができ

た。量子系のダイナミクスについて、新たな検討を加えた。量子速度限界と呼ばれる量子系特有のダイナミクスに関する不等式を、古典系においても確率分布の時間発展において対応物が存在することを発見した。さらに量子スピングラス模型の解析において頻繁に利用される静的近似について、一部の模型では厳密であることを証明した。今後量子スピングラス模型において、このアプローチが有効であるのかを検討していく。

量子アニーリングを利用した際に、量子ゆらぎを利用した最適化問題を解くという点に焦点が当てられるが、この量子ゆらぎを残したままに結果とすると、量子 ゆらぎによる非自明な効果を利用することができる。今年度の研究成果として顕著なものは、機械学習における最適化問題において、量子ゆらぎを利用した最適化を実行した場合に、汎化性能と呼ばれるコスト関数以外に解の性質の評価を行うことで、量子ゆらぎの効果を検証したものが挙げられる。量子ゆらぎを導入した場合に、汎化性能が向上するというのを、いわゆるニューラルネットワークの最適化問題において確認した。汎化性能が向上するメカニズムについても検討を行い、トンネル効果による離脱だけでなく、量子ゆらぎが持つ広い谷の極小を選択的に選ぶ性質についても議論した。機械学習といった応用例についての量子ゆらぎの効果だけでなく、純粹に量子系の性質を探るという基礎科学に資する部分の研究についても充実した成果をあげることができた。量子系のダイナミクスについて、新たな検討を加えた。量子速度限界と呼ばれる量子系特有のダイナミクスに関する不等式を、古典系においても確率分布の時間発展において対応物が存在することを発見した。さらに量子スピングラス模型の解析において頻繁に利用される静的近似について、一部の模型では厳密であることを証明した。今後量子スピングラス模型において、このアプローチが有効であるのかを検討していく。

量子アニーリングを利用した際に、量子ゆらぎを利用した最適化問題を解くという点に焦点が当てられるが、この量子ゆらぎを残したままに結果とすると、量子 ゆらぎによる非自明な効果を利用することができる。今年度の研究成果として顕著なものは、機械学習における最適化問題において、量子ゆらぎを利用した最適化を実行した場合に、汎化性能と呼ばれるコスト関数以外に解の性質の評価を行うことで、量子ゆらぎの効果を検証したものが挙げられる。量子ゆらぎを導入した場合に、汎化性能が向上するというのを、いわゆるニューラルネットワークの最適化問題において確認した。汎化性能が向上するメカニズムについても検討を行い、トンネル効果による離脱だけでなく、量子ゆらぎが持つ広い谷の極小を選択的に選ぶ性質についても議論した。機械学習といった応用例についての量子ゆらぎの効果だけでなく、純粹に量子系の性質を探るという基礎科学に資する部分の研究についても充実した成果をあげることができた。量子系のダイナミクスについて、新たな検討を加えた。量子速度限界と呼ばれる量子系特有のダイナミクスに関する不等式を、古典系においても確率分布の時間発展において対応物が存在することを発見した。さらに量子スピングラス模型の解析において頻繁に利用される静的近似について、一部の模型では厳密であることを証明した。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 24 件)

Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe, Shinichiro Taguchi, Improving solutions by embedding larger subproblems in a D-Wave quantum annealer, Scientific Reports, 査読有、9 巻、2019、2098、<https://doi.org/10.1038/s41598-018-38388-4>

Ryoji Miyazaki, Masayuki Ohzeki, Distributions of steady states in a network of degenerate optical parametric oscillators in solving combinatorial optimization problems,

Physical Review A、査読有、Vol.98、2018、053839、
https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.053839

Masayuki Ohzeki, Shuntaro Okada, Masayoshi Terabe, Shinichiro Taguchi、Optimization of neural networks via finite-value quantum fluctuations、Scientific Reports、査読有、8巻、2018、9950、https://doi.org/10.1038/s41598-018-28212-4

Shunta Arai, Masayuki Ohzeki, Kazuyuki Tanaka、Deep Neural Network Detects Quantum Phase Transition、Journal of Physical Society of Japan、査読有、87巻、No.3、2018、033001、https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.033001

Masayuki Ohzeki、Quantum Monte Carlo simulation of a particular class of non-stoquastic Hamiltonians in quantum annealing、Scientific Reports、査読有、7巻、2017、41186、doi:10.1038/srep41186

〔学会発表〕(計 122 件)

Masayuki Ohzeki、Adversarial generative network - new generation of image generation、ISMRM Annal Meeting 2018、2018

Masayuki Ohzeki、Quantum annealing and its application by an initiative from Tohoku University (Video Presentation)、INS (International Conference on Nanoelectronics Strategy)、2018

Masayuki Ohzeki、Sparse modeling for quantum Monte-Carlo simulation、International Meeting on “High-Dimensional Data-Driven Science” (HD3-2017)、2017

Masayuki Ohzeki、Sparse modeling: how to solve the ill-posed problem、Machine Learning and Many-Body Physics、2017

Masayuki Ohzeki、Tutorial on Machine learning - toward deep learning from physics -, Fourth Workshop on Tensor Network States Algorithms and Applications、2016

〔図書〕(計 7 件)

照井 伸彦 (編集), 小谷 元子 (編集), 赤間 陽二 (編集), 花輪 公雄 (編集), 片岡 駿 (著), 大関 真之 (著), 安田 宗樹 (著), 田中 和之 (著)、共立出版、画像処理の統計モデリング: 確率的グラフィカルモデルとスパースモデリングからのアプローチ、2018、246

須藤 彰三 (監修), 岡 真 (監修), 西森 秀稔 (著), 大関 真之 (著)、共立出版、量子アニーリングの基礎、2018、160

大関 真之、オーム社、ベイズ推定入門 -モデル選択からベイズ的最適化まで-、2018、192

大関 真之、小学館、先生、それって「量子」の仕業ですか?、2017、190

西森 秀稔、大関 真之、日経 BP 社、量子コンピュータが人工知能を加速する、2016、192

大関 真之、オーム社、機械学習入門 ボルツマン機械学習から深層学習まで、2016、208

麻生 英樹、安田 宗樹 他、近代科学社、深層学習、2015、288

〔産業財産権〕

出願状況 (計 4 件)

名称: 組合せ最適化システム及び組合せ最適化方法
発明者: 大関 真之
権利者: 同上
種類: 特許

番号：2019-058191
出願年：2019年
国内外の別：国内

名称：組合せ最適化問題処理装置、組合せ最適化問題処理方法及びプログラム
発明者：大関 真之
権利者：同上
種類：特許
番号：2019-055494
出願年：2019年
国内外の別：国内

名称：経路推定システム、経路推定方法、及び経路推定プログラム
発明者：大関 真之
権利者：同上
種類：特許
番号：2018-176928
出願年：2018年
国内外の別：国内

名称：変数埋込方法及び処理システム
発明者：大関 真之
権利者：同上
種類：特許
番号：2018-117045
出願年：2018年
国内外の別：国内

取得状況（計 0 件）

〔その他〕
ホームページ等

6 . 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：安田 宗樹
ローマ字氏名：Yasuda Muneki
所属研究機関名：山形大学
部局名：大学院理工学研究科
職名：准教授
研究者番号（8桁）：20532774

(2)研究分担者

研究分担者氏名：田中 宗
ローマ字氏名：Tanaka Shu
所属研究機関名：早稲田大学
部局名：グリーン・コンピューティング・システム研究機構
職名：主任研究員（研究院准教授）
研究者番号（8桁）：40507836

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、研究者個人に帰属されます。