

令和元年6月14日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K13849

研究課題名(和文) 詳細釣り合いの破れが生み出す革新的機械学習アルゴリズム

研究課題名(英文) Innovative machine learning algorithm driven by violation of detailed balance condition

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) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：詳細釣り合いを破ると、定常状態への収束が加速するという事実を踏まえて、古典確率過程を利用する機械学習の分野における画期的なアルゴリズムを開発するのが本研究課題である。2016年のPhysical Review E 93 (2016) 012129を皮切りに、物理的な過程として詳細釣り合いの破れが果たす役割を理解して、古典確率過程を超えて、量子確率過程に踏み込み、多様なアルゴリズム創出を目指した。Scientific Reports, (2017) 41186やScientific reports, 8 (2018) 9950では量子ゆらぎを活用した機械学習アルゴリズムの実証実験を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

機械学習の発展は現代科学の礎を築く上で最重要課題であり、その物理学的視座に基づく新規アルゴリズム創出は、決して発見論的ではなく、検証可能であり確固たる理論体系の元に築き上げられる。場当たり的な手法ではない普遍的な手法となるため、その構造の理解と手法の水平展開の容易さから、今後10年に渡る研究の展開の起点となることが期待される。

研究成果の概要(英文)：This study is to develop an innovative algorithm in the field of machine learning that uses classical stochastic processes, based on the fact that the convergence to steady state accelerates when the detailed balance is broken. Starting with Physical Review E 93 (2016) 012129 in 2016, we understand the role played by detailed balance as a physical process, go beyond classical stochastic processes, and step into quantum stochastic processes to create diverse algorithms I aimed at. The basic theory for exploiting quantum systems that are difficult to handle due to the presence of the negative sign problem was developed in Scientific Reports, (2017) 41186, and in scientific reports, 8 (2018) 9950, machine learning utilizing quantum fluctuation A demonstration experiment of the algorithm was conducted.

研究分野：機械学習、量子力学、統計力学

キーワード：詳細釣り合い 古典確率 量子ゆらぎ 機械学習 汎化性能

1. 研究開始当初の背景

確率過程を利用した手法の代表例はマルコフ連鎖モンテカルロ法が挙げられる。20 世紀に 発 明された 10 大アルゴリズムに数えられる程、汎用的で有効な手法である。教科書には、必ず 「詳細釣り合いを満たす遷移確率を利用する」という文言がある。しかし詳細釣り合い 条件は 十分条件ではない。必ずしも満たす必要はないのだ。このような常識の壁に果敢に 挑戦する ことで、諏訪・藤堂法、ねじれ詳細釣り合い、そして大関・一木法の提案につなが った。大関・ 一木法はふたつ以上の系のなかでやりとりする確率の流れを利用することで詳 細釣り合いの 破れを引き起こす。一方機械学習分野では、得られたデータから複数の独立した確率過程を利用 するコントラスト・ダイバージェンス法(以下 CD 法)、最小確率 流法などが提案されて いる。

機械学習の基本的な戦術は、データによる経験平均・分散に適合する期待値・分散を持つ確率 分布を求めることでデータの機構を明らかにする。しかしながら機械学習分野において通常扱 われる手法では、必ずしも正確に確率分布を用意できていないと いう事実が暗黙の了解と共に 聖域化していた重大な 問題点として残っている。確率過程における局所安 定解の存在、高次元 化するデータを利用するための 計算量の増大等が主な要因である。これら全てを解決するた めに、統計力学の知見を総動員する。まず 局所安定解からの脱出には、交換モンテカルロ法の利 用と大関・一木法の融合により解決する。計算量の増大に対しては、確率勾配法の援用と大関・ 一木法を利用した緩和過程の加速で解決する。

2. 研究の目的

計測技術の発展により、大規模で高次元なデータの取得が可能となり、急 に注目を集めている 機械学習分野では、マルコフ連鎖モンテカルロ法を中心とした確率過程が利用されている。 この確率過程に課される基本的常識のひとつ「詳細釣り合い」を破ることで、緩和時間の短縮、 サンプル効率の向上が確認されつつある。正確な計算を実行するための猶予が必ずしも許 されない高次元データにおける「機械学習」分野に輸入することで、高次元データの機構抽出 を正確に実行できるアルゴリズムの創出・計算ライブラリの設計を行う。

3. 研究の方法

研究期間の 1 年目では、詳細釣り合いの破れを利用した計算技術である大関・一木法の未解 明な点である臨界緩和の除去、さらに離散変数への展開を通して、機械学習の諸問題に有効か つ 利用しやすい形への発展を目指す。2 年目ではコントラスト・ダイバージェンス法及 び 最小確率流法について詳細釣り合いの破れの効果の評価を行う。最終年度では、機械学習の 標準ライブラリとして利用しやすい形でのアルゴリズムの公開に向けて、実データでの利用に よるベンチマーク、スパース性を利用した変数選択問題での利用による有効性の実証を行う。

4. 研究成果

物理的な確率過程を含むダイナミクスを活用することにより機械学習における新規アルゴリズムを創出するという取り組みをこれまで行ってきた。今年度は、量子系のダイナミクスに注目して、量子アニーリングにおける有限の量子ゆらぎを利用した最適化手法について検討を行った。またその量子系のダイナミクスにおける性質について検討を加え、いわゆる量子速度限界が、古典系の確率過程についても制限を加えるものであることを見出した。この成果は挑戦的萌芽研究の結実としてふさわしく、次の課題へとつながるものとなる。古典確率過程は機械学習のアルゴリズムにおいて頻繁に利用され、またその性能評価においても活用される手法である。その古典確率過程に対して不変的な不等式が存在する事実は、機械学習アルゴリズムに対しても不変的な不等式を与えることへとつながる。残念ながら終了年度内にその機械学習アルゴリズムに対する不等式を導出するには至らなかったが、引き続き次の課題として検討を加える。量子系のダイナミクスを活用して、汎化性能が引き上がるという結果を得ることに成功した。この効果は、従前の汎化性能と正則化項の関係として取られるかどうか、その点についても未解決問題として残った。引き続き今後の課題として検討することで量子機械学習の枠組みを形成する礎として本研究結果を据える。強化学習や実際上汎化性能の向上が求められる舞台での実応用例の検討も開始したり、今後の研究課題がいくつも創出されて、概ね良好な成果を上げることができた。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 24 件)

Shunta Arai, Masayuki Ohzeki, Kazuyuki Tanaka, Dynamics of Order Parameters of Non-stoquastic Hamiltonians in the Adaptive Quantum Monte Carlo Method, Physical Review E, 査読有、Vol.99、2019、032120、<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.032120>

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：一木 輝久

ローマ字氏名：Ichiki Akihisa

所属研究機関名：名古屋大学

部局名：未来社会創造機構

職名：特任准教授

研究者番号（8桁）: 40711156

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。