

令和 6 年 5 月 23 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K11838

研究課題名（和文）量子アニーリングマシンと高性能計算機とをシームレスに連携するプログラミング基盤

研究課題名（英文）A programming framework for hybrid systems by quantum annealing machines and high-performance computing systems

研究代表者

小松 一彦（KOMATSU, KAZUHIKO）

東北大学・サイバーサイエンスセンター・准教授

研究者番号：50813888

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、量子アニーリングマシンがGPUなどに次ぐ新たなアクセラレータとして、高性能計算機と融合して活用されることを見越し、従来のアプリケーション開発者が慣れ親しんだ高性能計算機のプログラミング環境からも量子アニーリングマシンを活用できるプログラミング基盤の要素技術を研究開発する。これにより、アプリケーション開発者の負担を抑制しつつ、量子アニーリングマシンを活用でき、量子アニーリングマシンと高性能計算機を融合した将来の情報処理基盤の確立に貢献する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子アニーリングマシンと高性能計算機のプログラミング環境は異なっており、従来の高性能計算機を利用してアプリケーション開発者が、量子アニーリングマシン向けのプログラミングを使いこなすのは容易ではない。この現状を打破するために、従来のプログラム技術を最大限に活用して、量子アニーリングマシンを高性能計算機の新しいアクセラレータとしてシームレスに活用できるプログラミング基盤を研究開発することにより、アプリケーション開発者が容易に量子アニーリングマシンと高性能計算機を適材適所に計算できる環境を提供する。これにより、学術的および社会的意義の高いアプリケーション開発に貢献する。

研究成果の概要（英文）：This research integrates quantum annealing machines as a next generation accelerator following GPUs, within high-performance computing systems. To achieve this, this research develops fundamental technologies for a programming framework that enables traditional application developers to leverage quantum annealing machines seamlessly from the familiar programming environments of high-performance computing systems. This aims to alleviate the burden on application developers while facilitating the utilization of quantum annealing machines, thereby contributing to the establishment of future computing infrastructures that seamlessly integrate quantum annealing machines with high-performance computing systems.

研究分野：高性能計算，量子計算

キーワード：イジングマシン アニーリングマシン クラスタリング

1. 研究開始当初の背景

組み合わせ最適化問題に特化した量子アニーリングを採用した量子アニーリングマシンが、大量のデータを抱えるデータ科学分野において、注目を集めている。量子アニーリングでは、組み合わせ最適化問題の組み合わせを量子のエネルギーとして扱い、エネルギーが最も低い安定状態を探索することで、高速かつ高精度な計算を実現する。量子アニーリングの計算概念を採用する量子アニーリングマシンは、組み合わせ最適化問題のような得意な計算を高速化する高性能計算機における「新しいアクセラレータ」として捉えることができる。このため、量子アニーリングマシンと高性能計算機との密な連携による協調計算が必要不可欠である。しかしながら、量子アニーリングマシンと高性能計算機のプログラミング環境は異なっており、従来の高性能計算機を利用していたアプリケーション開発者が、量子アニーリングマシン向けのプログラミングを使いこなすのは容易ではない。

2. 研究の目的

本研究では、GPU などの高性能計算機で用いられてきた従来のアクセラレータのプログラム技術を最大限に活用して、量子アニーリングマシンを高性能計算機の新しいアクセラレータとしてシームレスに活用できるプログラミング基盤の要素技術の確立を目的としている。これによって、アプリケーション開発者が容易に量子アニーリングマシンと高性能計算機を適材適所に計算できる環境を構築する。

3. 研究の方法

本研究では、目的を達成するために、3つの研究項目を設定し、研究を遂行する。量子アニーリングマシンへのオフロードの検討と性能分析の研究項目1では、高性能計算機向けアプリケーションの分析を行い、アクセラレータ向け付加情報やライブラリを精査する。そして、量子アニーリングマシンへのオフロード方法の検討および性能分析を行う。ライブラリを多用している機械学習向けプログラムなどの分析を行い、量子アニーリングマシンへのオフロードによる性能向上の可能性を検討する。次に、量子アニーリングマシンに適している計算部分を、量子ソルバを用いて実装し性能評価および分析を進める。量子アニーリングマシンのためのプログラム基盤の研究項目2では、従来のアクセラレータ特有のプログラム記述と同等のインタフェースを用いて、量子アニーリングマシンにオフロードするためのプログラム基盤の要素技術を研究開発する。研究項目3では、量子ソルバを活用するためのプログラム基盤の設計を行う。研究項目1および2と連携して、量子アニーリングマシンへオフロードを行い、量子ソルバを活用するプログラム基盤の研究開発を行う。

4. 研究成果

機械学習向けプログラムの分析を行い、量子アニーリングマシンへのオフロード方法の検討および性能分析を行った。具体的には、教師なし学習の1つであるクラスタリング手法に着目し、そのプログラム分析、そしてクラスタリングの処理の一部を組み合わせ問題として量子アニーリングマシンへオフロードする手法の開発を行った。量子アニーリングマシンにオフロードすることで高いクラスタリング精度を実現可能なイジングモデルに基づくクラスタリングを実現することができる。K-meansなどに代表される疑似最適クラスタリング手法とは異なり、同一クラスタ内距離の総和の合計値を最小化することで、厳密なクラスタリングを実現する。

イジングマシンを用いてクラスタリングを行う組み合わせクラスタリングは、クラスタ内のデータ間距離総和が小さくなるような、クラスタ割り当てを求める問題であり、次式の最小値を求めることで、高品質なクラスタリング結果である厳密解が求まる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^K \sum_{c(i)=c_a} \sum_{c(j)=c_a} d(x_i, x_j)$$

組み合わせクラスタリングをアニーリングマシンで実行するために、ラグランジュの未定乗数法により制約条件を表現した制約関数を QUBO 問題に組み込む。組合せクラスタリングでは、各データ点 x_i が、クラスタ C_a に属するかどうかをバイナリ変数 q_a^i で表し、次式で示すようにクラスタ内の距離の和を最小化する問題として定式化を行う。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N d(x_i, x_j) \sum_{a=1}^K q_a^i q_a^j + \sum_{i=1}^N \lambda_i \left(\sum_{a=1}^K q_a^i - 1 \right)^2$$

N 、 K はそれぞれデータ点数とクラスタ数を表す。第1項は目的関数であり、同一クラスタ内距離総和をクラスタ間で足しあわせた項である。第2項は制約関数であり、ラグランジュの未定乗数法によって組み込まれた制約に関する項である。制約関数では、各点が1つのクラスタにのみ割り当てられるため、全ての変数のうちいずれか1つのみが1でその他は全て0という One-Hot

制約で表現する。

n-ビット精度のハードウェアを用いてアニーリングを行う時に、係数として与えられる距離 $d(x_i, x_j)$ について以下の関係が成り立つ。

$$d(x_i, x_j) \leq \frac{2(2^n - 1)}{(N - K)(K - 2)}$$

この式から、n ビット精度のハードウェアを用いたとしても、 $d(x_i, x_j)$ に与えられる数値の最大値は $2(N-K)(K-2)$ 倍に減少することがわかる。これは、制約関数中の未定乗数が非常に大きな値を設定する必要があるために、目的関数の最適化に必要な距離 $d(x_i, x_j)$ の精度を低下させていることを意味する。このように、QUBO 問題に制約関数を含む問題の場合には、未定乗数を含む制約関数と目的関数の係数の差が増大し、探索が困難になり、解の精度が低下しやすくなる。

これにより、従来の手法ではビット精度不足によりクラスタリングが困難なデータ数が大きい場合においても、クラスタリングが実現できることを明らかにした。開発した非階層型クラスタリングを用いて、マテリアル開発の可視化を行った結果を図 1 に示す。

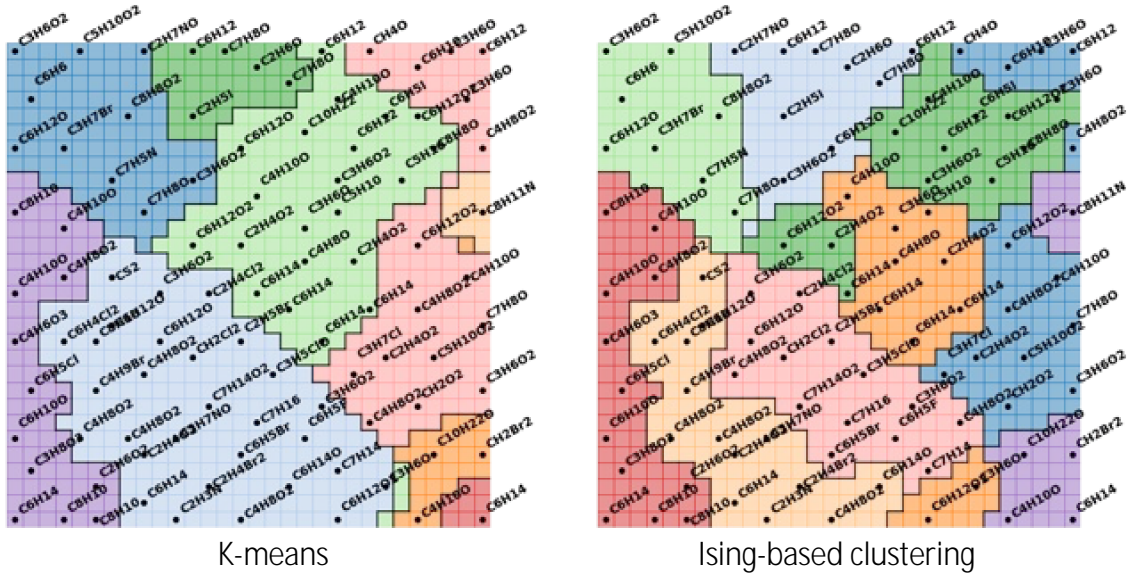


図 1 材料開発におけるクラスタリング結果

また、精度を比べると、図 2 のようになる。開発したクラスタリングが 38%もの低い Cost 値(同一クラスタ内距離総和を全てのクラスタで足し合わせた値)を達成しており、より高い品質で可視化できていることが明らかになった。

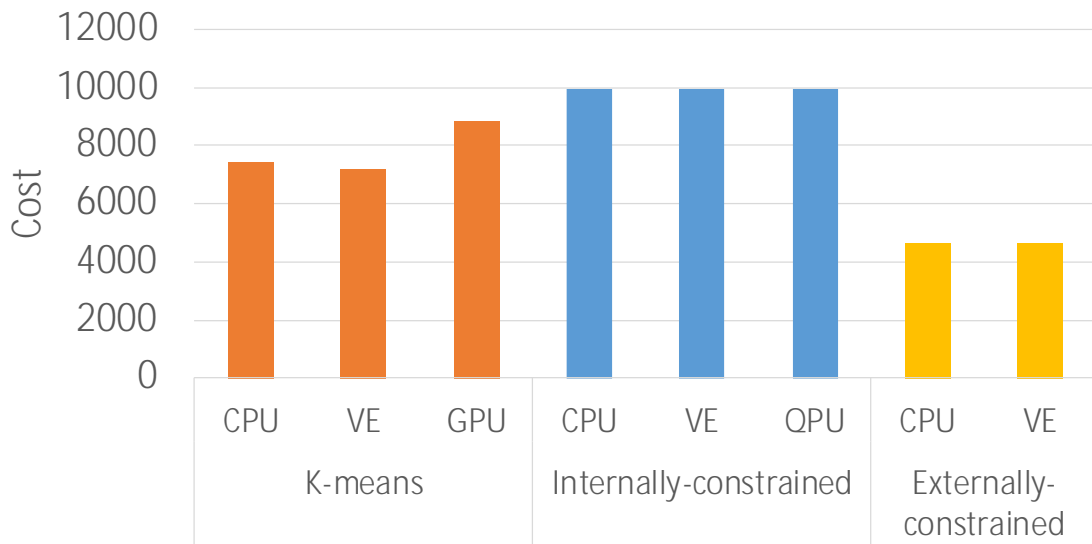


図 2 クラスタ内距離総和(Cost)の比較

この結果に基づき、アプリケーション開発者が、従来のクラスタリングと同様の使い勝手で利用できる量子アニーリングマシンを活用するプログラム開発基盤について開発を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Aoyama Kaho, Komatsu Kazuhiko, Kumagai Masahito, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Analysis of Precision Vectors for Ising-Based Linear Regression	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies 2022	6. 最初と最後の頁 251 ~ 261
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/978-3-031-29927-8_20	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 -
1. 著者名 Kumagai Masahito, Komatsu Kazuhiko, Takano Fumiyo, Araki Takuya, Sato Masayuki, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 11
2. 論文標題 An External Definition of the One-Hot Constraint and Fast QUBO Generation for High-Performance Combinatorial Clustering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Journal of Networking and Computing	6. 最初と最後の頁 463 ~ 491
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15803/ijnc.11.2_463	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Kumagai Masahito, Komatsu Kazuhiko, Sato Masayuki, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Ising-Based Combinatorial Clustering Using the Kernel Method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of 2021 IEEE 14th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc)	6. 最初と最後の頁 197-203
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/MCSoc51149.2021.00037	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 -
1. 著者名 Komatsu Kazuhiko, Kumagai Masahito, Qi Ji, Sato Masayuki, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 -
2. 論文標題 An Externally-Constrained Ising Clustering Method for Material Informatics	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of 2021 Nineth International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW)	6. 最初と最後の頁 201-204
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/CANDARW53999.2021.00040	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 -

1. 著者名 Kumagai Masahito, Komatsu Kazuhiko, Takano Fumiyo, Araki Takuya, Sato Masayuki, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 -
2. 論文標題 Combinatorial Clustering Based on an Externally-Defined One-Hot Constraint	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of 2020 Eighth International Symposium on Computing and Networking (CANDAR)	6. 最初と最後の頁 59-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CANDAR51075.2020.00015	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4件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 小野田誠, 小松一彦, 熊谷政仁, 佐藤雅之, 小林広明
2. 発表標題 QUBO問題における制約重み分割による解の高精度化に関する一検討
3. 学会等名 情報処理学会 第85回全国大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kazuhiko Komatsu
2. 発表標題 A feasibility study of quantum computing for the next-generation computing infrastructure: Early evaluation of annealing machines
3. 学会等名 34th Workshop on Sustained Simulation Performance (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小松一彦, 小野田誠, 熊谷政仁, 小林広明
2. 発表標題 組み合わせクラスタリングによるアニーリングマシンの評価
3. 学会等名 第185回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会 (SIWoPP2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahito Kumagai, Kazuhiko Komatsu, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 An Evaluation of a Hierarchical Clustering Method Using Quantum Annealing
3. 学会等名 Research Poster in ISC High Performance 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔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