

イジングマシンを用いた ブラックボックス多目的最適化の性能検証

山下 将司^{1,a)} 関 優也¹ 松森 唯益² 滝 雅人² 門脇 正史² 田中 宗^{1,b)}

概要：イジングモデルで表現することが困難な離散最適化問題に対してイジングマシンを適用する手法として、ブラックボックス最適化を利用する Factorization Machine with Quantum Annealing (FMQA) が知られている。先行研究では、制約条件のない単一の目的関数を含む最適化問題に FMQA が適用された。そこで我々は、複数の目的関数がある多目的最適化問題を対象に、FMQA を適用する手法を構築した。本講演では、我々の構築した手法の妥当性と、その性能検証の結果を報告する。

1. はじめに

近年、情報技術が急速に発展しフィジカル空間とサイバー空間が相互連携した IoT(Internet-of-Things) 社会の実現が間近に迫っている。IoT 社会においては、各種機器、インフラ、工場、都市などの IoT システムを最適制御することが必須となる。最適制御においては、与えられた制約条件の下で、巨大な解空間の中から最適解を探索する最適化問題を取り扱う必要がある。最適化問題の中には、入出力関係を表現する目的関数や制約条件が陽に与えられていない問題が存在する。このような場合に最適化を行うことをブラックボックス最適化と呼ぶ。

ブラックボックス最適化は、近年、工業分野における自動設計においてますます需要が高まっており、IoT 社会の実現に向けて様々な分野で需要が高まると予想される [1]。そして、ブラックボックス最適化においては、ブラックボックス関数の呼び出し回数を抑えながら効率的に最適解を探索することが要求される。また、対象とするブラックボックス最適化の決定変数が離散的な組合せ構造を持つ場合も多く存在する。このような場合に対する新しい手法として、イジングマシンを用いたブラックボックス最適化手法が提案された [2]。

イジングマシンは、組合せ最適化問題に対するメタヒューリスティクスを実装したハードウェアであり、複雑な最

適化問題を高速かつ高精度に解くことができると期待される新しい計算技術である [3]。しかし、イジングマシンの利用にはイジングモデルを用いた定式化が必要とされる [4], [5], [6] ため、ブラックボックス最適化には応用できないとされていた。しかし、先行研究 [2] において、イジングマシンと機械学習を組み合わせることによってブラックボックス最適化に対するイジングマシンの適用を可能にした新たな手法が提案された。

この手法は、Factorization Machine with Quantum Annealing (FMQA) と呼ばれ、ブラックボックス最適化における解候補の選択にイジングマシンを用いることで、高速に良解を得ることを可能にした。その結果、計算時間を短縮しながら、ブラックボックス関数の呼び出し回数を少なくすることができ、効率的にブラックボックス最適化を行うことができる。ここで、イジングマシンはイジングモデルや Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) で定式化された問題のみを扱うことができることに注意が必要である。ブラックボックス最適化のように目的関数がブラックボックス化された問題を取り扱うために、FMQA では、与えられた入出力データを元に Factorization Machine (FM) を用いて学習することで、イジングモデルや、QUBO の形に定式化しイジングマシンの適用を可能にした。

本研究では、イジングマシンの活用範囲の更なる拡大という大きな目的のもと、FMQA の適用範囲拡大を目標とする。先行研究 [2] では、ブラックボックス関数内における最適化の目的は一つのみであったが、様々な社会課題においては複雑なブラックボックス最適化問題が存在し、複数の目的を最適化したい状況に多く遭遇する。そこで、

¹ 慶應義塾大学
Keio University
〒223-0061 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1

² 株式会社デンソー
〒470-0111 愛知県日進市米野木町南山 500-1

a) mercy.under-mountain@keio.jp

b) shu.tanaka@appi.keio.ac.jp

FMQA を基礎としてブラックボックス化された多目的最適化問題に対する手法を構築し、その手法の妥当性と精度の検証を行う。今回、ブラックボックス化された多目的最適化問題の題材として tight-binding モデルの固有値設計問題と consensus 同期問題の 2 つを取り扱った。従来の FMQA では、解候補の選択に量子アニーリングを利用しているが、古典のイジングマシンを含む様々な手法も利用可能である。本研究では、多目的最適化問題に対する提案手法の検証に焦点を当てるため、通常のコンピュータ上での実装が容易なシミュレーティッドアニーリング法を利用して解候補の選択を行った。本研究では、より一般のイジングマシンを利用した手法を Factorization Machine with Annealing (FMA) と呼ぶ。

2. 方法

ブラックボックス最適化における多目的最適化を考える上で、複数の目的関数を出力するブラックボックス関数を定義する必要がある。そこで、上記で示した 2 つの問題、すなわち、tight-binding モデルの固有値設計問題と consensus 同期問題においてブラックボックス関数の入出力関係を定義する。今回、両問題ともにグラフ構造を示す入力値と、その入力値が示すグラフ構造における 2 つの特徴量を出力値として定義する。つまり、一つの入力値に対してブラックボックス化された 2 つの目的関数が定義される。そして、これら 2 つの目的関数を同時に最適化するために、線形和によって単一目的関数の問題に帰着させ、FMA を用いる。以下では、両問題におけるブラックボックス関数の定義と、FMA 手法の詳細について説明する。

2.1 Tight-binding model の固有値設計問題

Tight-binding model は固体中の電子の振る舞いを記述するための標準的な物理モデルの一つである。このモデルは、 n 個のサイトから成るグラフ上に定義される。隣接サイト間では電子のホッピング（飛び移り）が生じ、各サイトには電子が感じるポテンシャルが存在する。隣接サイト間での電子のホッピングが一定であると仮定し、ホッピングパラメータを $-t$ とする。いま、ホッピングパラメータをエネルギーの基準とし、 $t = 1$ とする。また、サイト i における電子が感じるポテンシャルを $-V_i$ とする。Tight-binding model のハミルトニアンは下記に示す $n \times n$ 対称行列で記述できる。

$$H = \begin{pmatrix} -V_1 & 0 & \dots & -1 \\ 0 & -V_2 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & -V_n \end{pmatrix} \quad (1)$$

Tight-binding model のハミルトニアンは対称行列であり、

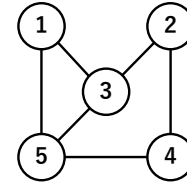


図 1: 5 サイトからなる tight-binding model の例 ($n = 5$)。頂点 i には電子が感じるポテンシャル $-V_i$ が、頂点間の辺にはホッピングパラメータ $-t (= -1)$ が存在する。

全ての固有値が実数値になる。本研究においてはこの行列の性質に着目し最適化を行う。

先にも述べたように、ブラックボックス最適化における多目的最適化を考える上で、複数の目的関数を出力するブラックボックス関数を定義する必要がある。ブラックボックス関数の入出力関係を以下のように定める。入力値を tight-binding model が定義されるグラフ構造を示す値とする。出力値は 2 つの値とする。1 つ目の出力値はハミルトニアン基底状態の固有エネルギー E_0 と第一励起状態の固有エネルギー E_1 の差 $\Delta E_{0,1} = E_1 - E_0$ が目標値 α とどれだけ離れているかを示す値とする。2 つ目の出力値は、入力した構造が、全結合の状態からどれだけ結合を切り離した状態かを示す値 n_0 とする。これら 2 つの出力値を最適化対象と設定する。全結合グラフから切り離す結合数なるべく抑えながら、ハミルトニアンの固有エネルギー差が目標値に近づく tight-binding model の構造を探索することを目的として、FMA で多目的最適化を行う。本研究では、この問題を特定の固有値を示す tight-binding model の構造を探索することを目的としていることから、tight-binding model の固有値設計問題と呼ぶこととする。この問題は、所望のエネルギーギャップを有する物質構造を設計する問題に関連付けられる。

図 1 で示される 5 サイトの tight-binding model を例に取り本問題の入力値とブラックボックス関数による出力値を具体的に説明する。この tight-binding model の構造は、以下のバイナリ値の列（ビット列）で表現できる。

$$x = (0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1) \quad (2)$$

左から順に、辺 (1, 2), (1, 3), (1, 4), (1, 5), (2, 3), (2, 4), (2, 5), (3, 4), (3, 5), (4, 5) がつながっているか否かを表す。つながっている場合は 1、つながっていない場合は 0 である。そして、この構造における tight-binding model のハミルトニアンは以下のように示される。

$$H = \begin{pmatrix} -V_1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & -V_2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -V_3 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -V_4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & -V_5 \end{pmatrix} \quad (3)$$

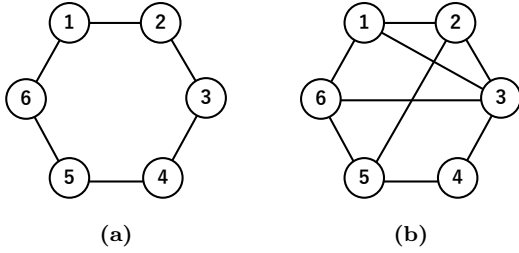


図 2: $n = 6$ のグラフ構造の例. (a) $n = 6$ の環状結合のグラフ構造. (b) $n = 6$ の環状結合のグラフ構造に対し、結合をいくつか追加した場合の例.

ハミルトニアン H の (i, j) 成分が -1 のとき、辺 (i, j) がつながっていることに対応する。また、 (j, i) 成分も -1 である。先程定義したブラックボックスの 1 つ目の出力値は、この構造における tight-binding model のハミルトニアンの基底状態と第一励起状態の固有エネルギーの差 $\Delta E_{0,1}$ を計算し、固有エネルギー差と目標値 α との差分の絶対値 $|\Delta E_{0,1} - \alpha|$ を計算することによって得られる。また 2 つ目の出力値は、全結合の状態からどれだけ隣接を切り離れたかどうか、すなわち、入力値であるビット列における 0 の個数 n_0 によって与えられる。このように出力された 2 つの目的関数 $|\Delta E_{0,1} - \alpha|$ と n_0 を同時に最小化する問題の定式化には任意性があるが、本研究では以下のようにこれらの線形和を取ることで単一目的関数の問題に帰着させ、FMA を用いて多目的最適化を行うことにする。

$$F(\mathbf{x}) = n_0 + \lambda |\Delta E_{0,1} - \alpha| \quad (4)$$

ここで λ は正の実数値である。この目的関数の値を最小化することで、切り離す結合数なるべく抑えながら、ハミルトニアンの固有値差が目標値に近づくような構造の tight-binding model を探索することが可能になる。

2.2 Consensus 同期問題

Consensus 同期問題とは、多数の要素から構成される系において、系全体が協調動作するまでに要する時間を短縮化する問題である [7]。この問題は、自然界における集団行動、複雑ネットワーク上におけるセンサデバイスの協調動作等との関連が深い。本研究においては短時間で協調動作に至るための最適なグラフ構造を FMA によって探索することを目的とする。

Consensus 同期問題はグラフ構造上に定義される問題である。まず、図 2(a) で表されるような n サイトの環状結合のグラフ構造を考える。その後、このグラフ構造に対して結合をいくつか追加し、図 2(b) で表されるような n サイトのグラフ構造を定義する。

Consensus 同期問題においては、グラフ理論におけるラプラシアン行列の固有値に着目する。いま考えるグラフは無向グラフと仮定する。ここで無向グラフを $G = (V, E)$ と表すことにする (V を頂点集合、 E を辺集合とする)。無

向グラフの頂点数を n とすると、無向グラフの隣接行列 A 、次数行列 D はともに $n \times n$ 行列となる。隣接行列 A は、

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & [(i, j) \in E] \\ 0 & [(i, j) \notin E] \end{cases} \quad (5)$$

で与えられる。また、次数行列 D は対角行列であり、

$$D_{i,j} = \begin{cases} \sum_{j=1}^n A_{i,j} & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (6)$$

で与えられる。これらを用いてラプラシアン行列は

$$L = D - A \quad (7)$$

と定義される。したがって、ラプラシアン行列は下記のような $n \times n$ 対称行列で記述できる。

$$L = \begin{pmatrix} l_1 & 0 & \dots & -1 \\ 0 & l_2 & \dots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & l_n \end{pmatrix} \quad (8)$$

ここで、ラプラシアン行列は 2.1 節における tight-binding model の固有値設計問題で考えたハミルトニアンと同様、対称行列であり、全ての固有値は実数となる。Consensus 同期問題についてもこの行列の特性について着目し最適化を行う。

Tight-binding model の固有値設計問題の場合と同様に、複数の目的関数を出力するブラックボックス関数を定義する。ブラックボックス関数の入出力関係を以下のように定める。入力値を、追加する結合を示す値とする。出力値は 2 つの値とする。1 つ目の出力値はラプラシアン行列の第 2 最小固有値 λ_2 と最大固有値 λ_n の比を示す値 $Q = \lambda_2 / \lambda_n$ とする。2 つ目の出力値はグラフ構造における平均次数 $\langle k \rangle$ とする。この値は

$$\langle k \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l_i \quad (9)$$

によって計算できる。ここで、ラプラシアン行列の固有値比 Q はネットワークの同期速度に関係する値であり、この値が小さくなるほど同期速度が速くなることが知られている。また、ネットワークの同期を考える際に結合の追加は一般にコストがかかると想定されるため、追加する結合の数がなるべく少ない方が望ましい。そこで、結合追加後の平均次数 $\langle k \rangle$ をなるべく抑えながら、ラプラシアン行列の固有値比 Q が小さくなるようなグラフ構造を探索することを目的として、FMA で多目的最適化を行う。本研究ではこの問題を consensus 同期に最適なグラフ構造、つまり短時間で協調動作に至るための最適なグラフ構造を探索することを目的としていることから、consensus 同期問題と呼

ぶこととする。

図 2(b) で示されるような構造を例に取り本問題の入力値とブラックボックス関数による出力値を具体的に説明する。この構造は、以下のバイナリ変数で表された入力値によって結合が追加された構造である。

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

左から順に、(1, 3), (1, 4), (1, 5), (2, 4), (2, 5), (2, 6), (3, 5), (3, 6), (4, 6) に結合が追加されるか否かを表す。結合が追加される場合は 1, 追加されない場合は 0 である。そして、このグラフ構造におけるラプラシアン行列は以下で表される。

$$L = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \quad (11)$$

1 つ目の出力値は、ラプラシアン行列の第 2 最小固有値 λ_2 と最大固有値 λ_n の比 $Q = \lambda_2/\lambda_n$ を計算することによって得られる。2 つ目の出力値は、式 (9) を用いて平均次数を計算することによって得られる。ここで、上記の場合の平均次数は

$$\langle k \rangle = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 l_i = \frac{1}{6} (3 + 3 + 4 + 2 + 3 + 3) = 3 \quad (12)$$

となる。このように出力された 2 つの目的関数 Q と $\langle k \rangle$ を同時に最小化する多目的最適化問題を考える。本研究では tight-binding model の固有値設計問題と同様、重み ω を用いた線形和によって単一の目的関数の問題に帰着させ、FMA を用いて多目的最適化を行うことにする。ここで ω は (0, 1) の正の実数値である。

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}) &= \omega Q + (1 - \omega) \langle k \rangle \\ &= \omega (\lambda_2/\lambda_n) + (1 - \omega) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n l_i \end{aligned} \quad (13)$$

この目的関数の値を最小化することで、平均次数をなるべく抑えながら、ラプラシアン行列の固有値比が小さくなるような consensus 同期に適したグラフ構造を探索することが可能になる。

2.3 FMA による最適化

先にも述べたように、上記で定義した両問題の目的関数 $F(\mathbf{x})$ は $\mathbf{x}$ を用いて直接表現することができないため、直接イジングマシンを適用することができない。そこで FMA では、Factorization Machine (FM) によって、目的関数 $f(\mathbf{x})$ を推定する。

$$f(\mathbf{x}) = \omega_0 + \sum_{i=1}^N u_i x_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^K v_{i,k} v_{j,k} x_i x_j, \quad x_i \in \{0, 1\}. \quad (14)$$

上式のパラメータ $w_0, u_i, v_{i,k}, v_{j,k}$ は、入力 $\mathbf{x}$ と対応する出力 $f(\mathbf{x})$ のデータ（以降、学習データと呼ぶ）から決定される。この推定モデルを、下記で与えられる QUBO で表現し直す。

$$\mathcal{H} = \omega_0 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Q_{i,j} x_i x_j, \quad x_i \in \{0, 1\}. \quad (15)$$

式 (14) と式 (15) から、

$$Q_{i,j} = \begin{cases} \sum_{k=1}^K v_{i,k} v_{j,k} & (i \neq j) \\ \sum_{k=1}^K v_{i,k}^2 + u_i & (i = j) \end{cases} \quad (16)$$

であるため、推定モデルから QUBO に変換することが可能である。ここで、 $x_i \in \{0, 1\}$ であることから、 $x_i^2 = x_i$ を用いた。また、QUBO は下の式で定義されるイジングモデルと等価である。

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{i,j} s_i s_j + \sum_{i=1}^N h_i s_i, \quad s_i \in \{+1, -1\}. \quad (17)$$

このように FM を用いることでイジングモデルによる目的関数の表現が可能となりブラックボックス最適化問題に対してもイジングマシンを適用することができるようになる。

3. 結果

3.1 Tight-binding model の固有値設計問題

本研究では、小規模系での tight-binding model の固有値設計問題に対して FMA を利用した多目的最適化を行い、その妥当性を検証した。6 サイトの tight-binding model のハミルトニアンは 6×6 行列で表現され、15 個のバイナリ変数を持つ。よって、 $2^{15} = 32768$ 個の解候補が存在する。このように問題が小規模なため全探索による厳密解の算出が可能であり、厳密解と比較することで FMA によって得られた解と厳密解との差を評価することができる。以降、厳密解と各手法によって探索された解との差が小さいほど、その手法における解精度が高いと表現することとする。本研究では、ランダム探索とベイズ最適化を比較対象とし、FMA の最適化性能を調べた。

式 (4) で与えられる目的関数中の係数 λ を 2.0 に設定した場合について FMA の最適化性能を調べた。今回の計算で用いた条件は、初期学習データ数 100、学習データをもとに最適化を行った回数（以降、試行回数とよぶ）は 900 回である。FM のハイパーパラメータ K は 8 とした。初期学習データのとり方と FMA 内部の SA にランダム要素を含むため、同一問題を複数回解いてその結果を集計した。こ

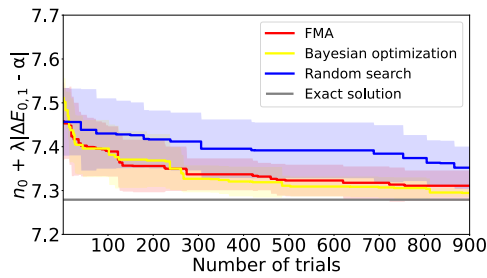


図 3: 6 サイトの tight-binding model の固有値設計問題に対する最適化過程. 式 (4) 中のパラメータを $\lambda = 2.0$ とした場合. 赤色線が FMA, 青色線がランダム探索, 黄色線がベイズ最適化による最適解探索の軌跡. 10 サンプルの平均値を実線, 標準偏差を帯で示す. 灰色の線は $\lambda = 2.0$ としたときの目的関数 $F(\mathbf{x})$ [式 (4)] の最小値を全探索で厳密に求めた値.

表 1: FMA とベイズ最適化における 1 サンプルデータあたりの平均総計算時間. 6 サイトの tight-binding model の固有値設計問題で, 式 (4) 中のパラメータを $\lambda = 2.0$ とした場合.

	総計算時間 (s)
FMA	3070
ベイズ最適化	31386

の回数をサンプルデータ数と呼ぶことにする. 今回はサンプルデータ数は 10 とした. ここで, tight-binding model のハミルトニアン対角成分における $\{V_i\}$ の値は $[0, 1]$ の一様分布から生成した.

図 3 の横軸は試行回数, 縦軸は目的関数の値を示す. 試行回数は, 初期学習データを FM で学習した時点をも 0 としている. 軌跡は横軸に示す試行回数時点で, 各手法によって求められた最小の目的関数 $F(\mathbf{x})$ [式 (4)] の最小値の集合を示す. 軌跡が厳密解に近い手法は解精度が高いと考えられる. 図 3 から, FMA の解精度がランダム探索に比べて高い結果であることがわかる. また, FMA は, ベイズ最適化と同等の解精度であった.

各手法の平均総計算時間を表 1 に示す. 今回, 1 回の試行で目的関数 $F(\mathbf{x})$ [式 (4)] を評価するのにかかる時間がほとんど必要ない問題を考えているため, 上記の計算時間は次の解候補の選択に要する時間の合計とみなせる. 表 1 を見ると FMA はベイズ最適化の約 10 分の 1 の計算時間である. 従って, 計算時間の観点から見ると FMA の方がベイズ最適化よりも解候補の選択に要する時間が短くてよいと考えられる.

以上の結果より, 小規模な tight-binding model の固有値設計問題においては他手法に比べ FMA が多目的最適化に対して有用であるということが示唆された.

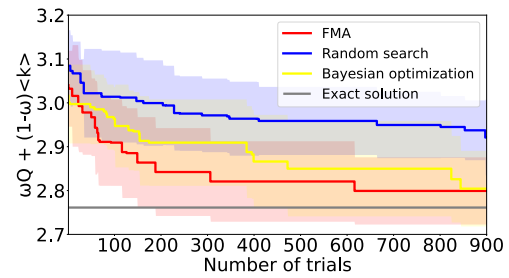


図 4: 7 サイトの consensus 同期問題に対する最適化過程. 式 (13) 中のパラメータを $\omega = 0.5$ とした場合. 赤色線が FMA, 青色線がランダム探索, 黄色線がベイズ最適化による最適解探索の軌跡. 10 サンプルの平均値を実線, 標準偏差を帯で示す. 灰色の線は $\omega = 0.5$ としたときの目的関数 $F(\mathbf{x})$ [式 (13)] の最小値を全探索で厳密に求めた値.

表 2: FMA とベイズ最適化における 1 サンプルデータあたりの平均総計算時間. 7 サイトの consensus 同期問題で, 式 (13) 中のパラメータを $\omega = 0.5$ とした場合.

	総計算時間 (s)
FMA	2964
ベイズ最適化	25958

3.2 Consensus 同期問題

小規模系での consensus 同期問題に対して FMA を利用して多目的最適化を行い, その妥当性を検証した. 本研究では, 7 サイトの consensus 同期問題に対する FMA の性能を検証した. この問題のラプラシアン行列は 7×7 行列で表現され, バイナリ変数の個数は 14 個となる. よって, $2^{14} = 16384$ 個の解候補が存在する. このように小規模問題を取り扱っているため, tight-binding model の固有値設計問題の場合と同様に全探索により厳密解を求め, 厳密解と比較することで FMA による解精度を評価することができる. 本問題でも, ランダム探索とベイズ最適化を比較対象とし, FMA の最適化性能を調べた.

式 (13) で与えられる目的関数における係数 ω を 0.5 に設定した場合について調べた. 今回用いた条件は初期学習データ数 100, 試行回数の最大値は 900 回である. FM のハイパーパラメータ K は 8 とした. また, サンプルデータ数を 10 とした.

図 4 は, 図 3 と同様に最適化過程の目的関数値 $F(\mathbf{x})$ [式 (13)] の軌跡を示す. 図 4 より FMA (赤色線) の解精度が他手法 (ランダム探索, ベイズ最適化) に比べて良い結果であることがわかる. また, FMA による目的関数の値は, 全探索による厳密解との差が徐々に小さくなっており, さらに試行を重ねることでより良い解が探索できる可能性がある. また, 900 回試行後の FMA とベイズ最適化で得られた目的関数値は差がなかった.

そこで各手法の平均総計算時間を表 2 に示す. 同表の計

算時間は、前節で取り扱った問題と同様、1回の試行で目的関数 $F(\mathbf{x})$ [式 (13)] の評価に要する時間がほとんど必要ないため、次の解候補の選択に要する時間の合計とみなせる。前節で取り扱った問題と同様、単純な総計算時間の観点から見るとFMAの方がベイズ最適化よりも解候補の選択に要する時間が短くてよいと考えられる。以上の結果より、小規模な consensus 同期問題においても tight-binding model の固有値設計問題の場合と同様に他手法に比べFMAが多目的最適化に対して有用であるということが示唆された。

表1と表2において、FMAの計算時間の違いに対し、ベイズ最適化の計算時間の違いは顕著である。ベイズ最適化のどの部分に計算時間の違いが生じるか、また、問題サイズに対するベイズ最適化の計算時間のスケーリングについては今後の課題である。

4. まとめ

本研究では、イジングマシンの活用範囲のさらなる拡大を大きな目的とし、FMAの適用範囲の拡大を目標とした。そこで、先行研究 [2] において、未知の領域であったブラックボックス化された多目的最適化問題に対してFMAを利用する手法を構築し、その手法の妥当性と性能の検証を行った。その際、性質の似た2つの問題

- tight-binding model の固有値設計問題
- コンセンサス同期問題

を対象とした。今回、上記の2つの問題に対して小規模系を想定しそれぞれの場合でFMAによる多目的最適化の性能を調査した。多目的最適化の性能の評価軸として、多目的最適化問題を単一目的最適化問題で表現する際のハイパーパラメータを固定した場合における解精度並びに計算時間の2つを設定した。

第一の評価軸については、どちらの問題に対してもFMAはランダム探索と比較して優位性が見られた。また、ベイズ最適化と比較しても同程度の解精度であるということがわかった。

第二の評価軸について、同程度の最適化性能を示したベイズ最適化と総計算時間の比較を行った。結果としては、どちらの問題もベイズ最適化に比べ10分の1程度の計算時間であった。

以上をまとめると、FMAは他手法に比べ解精度並びに計算時間の両面で優位である可能性が高い。今回、FMAを用いてブラックボックス最適化問題における多目的最適化を行ない、その有用性が示されたが、初期条件やハイパーパラメータの調整による最適化性能への影響についてはまだまだ検証が必要である。そして、本研究では2つの問題を題材としたがこれら一連の研究を進めることで、FMAが有用である問題を明確化し実社会における課題に対してFMAを適用することを大きな目標とする。

参考文献

- [1] Terayama, K., Sumita, M., Tamura, R. and Tsuda, K.: Black-Box Optimization for Automated Discovery, *Accounts of Chemical Research*, Vol. 54, No. 6, pp. 1334–1346 (2021).
- [2] Kitai, K., Guo, J., Ju, S., Tanaka, S., Tsuda, K., Shiomi, J. and Tamura, R.: Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines, *Phys. Rev. Research*, Vol. 2, p. 013319 (online), DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.013319 (2020).
- [3] 田中宗, 松田佳希: イジングマシン分野の研究開発動向, 表面と真空, Vol. 63, No. 3, pp. 96–103 (2020).
- [4] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems, *Frontiers in physics*, p. 5 (2014).
- [5] Tanana, S., Tamura, R. and Chakrabarti, B. K.: *Quantum Spin Glasses, Annealing and Computation*, Cambridge University Press (2017).
- [6] Tanahashi, K., Takayanagi, S., Motohashi, T. and Tanaka, S.: Application of Ising Machines and a Software Development for Ising Machines, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 88, No. 6, p. 061010 (online), DOI: 10.7566/JPSJ.88.061010 (2019).
- [7] Olfati-Saber, R.: Ultrafast consensus in small-world networks, *Proceedings of the 2005, American Control Conference, 2005.*, pp. 2371–2378 vol. 4 (online), DOI: 10.1109/ACC.2005.1470321 (2005).