

Factorization Machineとイジングマシンを利用した 整数変数最適化

関 優也^{1,a)} 田村 亮^{2,3,b)} 田中 宗^{4,5,c)}

概要: Factorization Machine (FM) とイジングマシンを組み合わせることでブラックボックス最適化問題を解く手法が提案された。この手法では、ブラックボックス関数から得たサンプルで FM の学習を行い、その FM から構築したモデルを元に評価すべきサンプル候補の選定を行う。サンプル候補の選定の際にイジングマシンが利用される。この学習と選定を反復して得られたサンプルの中から真の最適解を探索するのである。従来手法では、バイナリ変数で表現された最適化問題に対する解析が行われているが、最適化問題の中には整数変数によって表現される問題も多く存在する。本研究では、従来手法で扱っていなかった整数変数を持つ問題を対象とし、整数変数の表現方法ごとに手法の性能を数値的に解析する。

1. はじめに

近年、イジングマシンやアニーリングマシンの開発が進んでいる [1–10]。これらのデバイスは、主にイジングモデルや QUBO モデルの低エネルギー解を探索するために用いられる。イジングモデルや QUBO モデルは組合せ最適化問題との相性が良く、多くの問題をモデル化できる [11–13]。実問題への応用も進められており、応用問題探索とその問題のモデル化が進められている [14]。

イジングマシンの応用拡大に向けて解決すべき課題のひとつが、解析形の不明なコスト関数の最適化問題のモデル化である。一般のコスト関数の中にはイジング変数やバイナリ変数で定式化困難なものもあり、このような問題に対してイジングマシンを直接適用することは困難であった。モデル化が困難な例の一つが、ブラックボックス最適化問題

である。ブラックボックス最適化問題とは、与えられた入力に対するコスト関数の出力を観測できるが、コスト関数の解析形は不明な場合の最適化問題のクラスを指す。コスト関数の解析形が不明なため、イジングやバイナリ変数によるコスト関数の定式化が不可能である。ブラックボックス最適化の中には、深層ニューラルネットワークの学習におけるハイパーパラメータの最適化 [15] や、既存のデータを元にした材料探索の自動化 [16–18] など、実用上の重要度の高い問題が存在する。よって、ブラックボックス最適化問題に対するイジングマシンの応用方法を考えることには大きな意義がある。

イジングマシンによるブラックボックス最適化問題へのアプローチとして提案された手法の一つが、北井らによる Factorization Machine with Quantum Annealing (FMQA) である [19]。FMQA では、解析的な定式化が困難なコスト関数を Factorization Machine (FM) [20] と呼ばれる機械学習モデルによって表現することで、イジングマシンの適用を可能にした。イジングマシンを用いることで、表現したコスト関数の解候補が組合せ爆発を起こす場合でも、実行可能な時間内でブラックボックス最適化を行える。北井らは論文 [19] において、大気窓に含まれる周波数帯の熱輻射を行う波長選択輻射材料の探索に対して FMQA を適用し、高い性能を実現する材料構造探索に成功した。その後の研究において、プリント回路基板の縮結点配置設計に対する FMQA の適用 [21] などが試みられている。また、FMQA に着想を得たゲート式量子コンピュータ向けブラックボックス最適化手法の検討 [22] や、ブラックボックス連続最適化手法の検討 [23] が行われている。

¹ 慶應義塾大学
Graduate School of Science and Technology, Keio University,
Kanagawa 223–8522, Japan
² 物質・材料研究機構
International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science, Ibaraki, 305–0044 JAPAN
³ 東京大学
Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Chiba, 277–8568 Japan
⁴ 慶應義塾大学
Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University, Kanagawa 223–8522, Japan
⁵ 早稲田大学
Green Computing System Research Organization, Waseda University, Tokyo 162–0042, Japan
a) yuya.seki@keio.jp
b) tamura.ryo@nims.go.jp
c) shu.tanaka@appi.keio.ac.jp

本研究で提案する手法は、従来のFMQAの応用範囲をさらに拡大するものである。FMQAにおけるモデル化では変数はバイナリ値を取るものとしていたが、より一般の最適化問題においては変数が3つ以上の整数値をとる場合も多い。そのような場合に用いられる方法としては、複数のビットを組み合わせることで整数を表現する手法が挙げられる。本研究では、複数ビットによる整数表現方法をいくつか取り上げ、それぞれにおける提案手法の性能を数値的に評価した。整数変数を取り扱う上で必要となる新たな手順を導入し、提案手法の正当性を検証可能な小規模な問題において動作確認を行った。北井らによって提案されたFMQAでは、コスト関数の最適解探索に量子アニーリングマシンを利用していた。それに対し、本研究では通常のコンピュータ上での実行が容易なシミュレーテッドアニーリング法を利用して最適解探索を行った。これにより、量子アニーリングマシン実機のノイズの影響を排除し、整数変数の表現方法の差異に焦点を当てた結果の解析を行うことができる。我々は、FMQAにおける量子アニーリングマシンを非量子のイジングマシンを含む一般のデバイスによって置き換えた手法を、Factorization Machine with Annealing (FMA) と呼ぶことにする。

本講演原稿の構成は以下の通りである。まず、2節でブラックボックス最適化について導入し、既存の最適化手法とFMAとの関連について触れる。3節では、Factorization Machine (FM) について説明する。FMのモデル方程式を説明したのち、順伝播と逆伝播の計算が効率的に行えることを示す。また、説明変数がバイナリ値をとる場合に、FMのモデル方程式がQUBO形式となることを説明する。これは、推定したFMのモデル方程式の低エネルギー解をイジングマシンで探索可能であることを意味している。4節では、FMAによる最適化の手順について簡単にまとめる。その後、5節において、整数変数の最適化問題に対する我々の提案手法について説明する。我々の手法はFMAを拡張する形で提案するので、FMAからの差分に着目して説明を加える。また、本研究で利用した整数表現方法の導入もこの節で行う。6節では、提案手法の性能を調査するために用いた小規模な問題の定義と、その結果について説明する。最後に7節で本研究をまとめる。

2. ブラックボックス最適化

ブラックボックス最適化問題とは、定式化が困難なコスト関数の最小化（最大化）を行う問題である。例としては、深層学習におけるハイパーパラメータ最適化や既存のデータを元にした材料探索の自動化などが挙げられる。大規模な深層ニューラルネットワークの学習や実際の実験に長い時間を要することから分かるように、ブラックボックス関数の評価には大きな時間的・経済的コストが発生する。そのため、できるだけブラックボックス関数の呼び出し回

数を少なくしつつ、コスト関数の最小値を探索する必要がある。

ブラックボックス最適化を行う手法開発は、上述のような実用上重要な問題に対するアプローチを提供する上で大きな意義を持つ。最も単純な方法は、最適解ないし準最適解をランダムに探索する手法である。ブラックボックス関数への入力となる説明変数の値をランダムに生成し、評価したブラックボックス関数値の中で最も良い数値を与える入力を解とする方法である。別の方法として、近似的に計算された勾配を利用した準最適解探索が挙げられる。説明変数の初期値を一つ定めたのち、その周辺でブラックボックス関数を評価することで、初期値の周辺の勾配を近似的に評価する。そして、その勾配情報をもとに、より解の性能が向上する方向へと説明変数の値を更新する。更新を繰り返すことで、準最適解を探索することができる。これらの方法は、性能の高い解を探索するまでにブラックボックス関数の多くの呼び出しを必要とするため、ブラックボックス関数の呼び出しコストが高い状況では、長い計算時間を要してしまうという欠点がある。

ブラックボックス最適化を行う際に、関数の呼び出し回数を抑える方法の一つにサロゲートモデリングがある[24,25]。サロゲートモデリングとは、最適化したいブラックボックス関数を、評価が容易な別のモデルで近似する手法を指す。ブラックボックス関数を最適化する代わりに、サロゲートモデルの最適解を探索することで、解の探索を効率化する。サロゲートモデリングに分類される手法の一つが、ガウス過程回帰を利用したベイズ最適化である*1。この方法では、既知のサンプルからガウス過程による回帰モデルを生成し、そのモデルから構築した獲得関数をサロゲートモデルとして利用する。本研究で提案する手法の元となったFMAもこの分類に入る。FMAでは、既知のサンプルをFactorization Machineで学習することで、QUBO形式のサロゲートモデルを構築し、その後、イジングマシンを利用してQUBOモデルの最適解を探索する。次の3節でFactorization Machineについて解説した後、4節でFMAについて説明する。

3. Factorization Machine

Factorization Machine (FM) は、サポートベクターマシンとFactorizationモデルを組み合わせた、機械学習の推論モデルである[20]。サポートベクターマシンとは異なり、高次の項の係数間に相関を持たせることで、スパースな学習データでも高い性能を達成できる。FMは、回帰問題や2値分類問題、ランキング問題といった幅広い応用を持つ有用な手法である。この節では、Rendleによって導入された、2次の項までを含むFMの説明を行う。まず、 n 個の

*1 ベイズ最適化を行うためのパッケージとしては、例えばPHYSBO[26]が挙げられる。

説明変数とハイパーパラメータ k を持つ FM のモデル方程式を導入し、順伝播の計算量が kn の線形で抑えられることを示す。次に、変数がバイナリ値を取る場合にモデル方程式が QUBO モデルと見做せることを示す。また、モデル方程式の学習コストについても触れる。モデル方程式のモデルパラメータに関する微分に要する計算量が kn の線形で抑えられることを示し、効率的に逆伝播を計算できることを見る。

3.1 FM のモデル方程式

2 次の FM のモデル方程式は以下で与えられる:

$$y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = c + \sum_{i=1}^n q_i x_i + \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i < j)}}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j. \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{x} \equiv (x_1, \dots, x_n)$ は説明変数ベクトルを表し、 $c \in \mathbb{R}$ と $q_i \in \mathbb{R}$ 、 $\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^k$ ($i = 1, \dots, n$) は学習すべきモデルパラメータである。これら全てのモデルパラメータをまとめたベクトルを $\boldsymbol{\theta}$ で表現した。整数 k は、モデル方程式の表現力を制御するパラメータであり、 k を十分に大きく取ると任意の 2 次の係数行列を表現できる。しかし、学習データが少ない状況においては、 k の大きさを制限して故意に表現力を落とすことでモデルの汎化性能を向上させることができる。本研究において、 k を FM のランクと呼ぶ。記号 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は内積を表す。2 次の項の和は、 $1 \leq i < j \leq n$ を満たす全ての (i, j) の組について取る。

順伝播の計算量が線形であることを示すために、FM のモデル方程式 (1) の 2 次の項を次のように書き直す:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i < j)}}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i \rangle x_i^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \left[\sum_{i,j=1}^n v_{i,l} v_{j,l} x_i x_j - \sum_{i=1}^n v_{i,l}^2 x_i^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^k \left[\left(\sum_{i=1}^n v_{i,l} x_i \right)^2 - \sum_{i=1}^n v_{i,l}^2 x_i^2 \right]. \quad (2) \end{aligned}$$

ここで、 $v_{i,l}$ はベクトル \mathbf{v}_i の l 成分を表す。式 (2) より、2 次の項を $O(kn)$ の計算量で求められることがわかった。モデル方程式の 1 次以下の項は線形時間で計算できるので、FM のモデル方程式全体の計算量は $O(kn)$ である。

次に、説明変数が 0 か 1 のバイナリ値をとる場合に、FM のモデル方程式が QUBO 形式となることを確認する。まず、 $n \times n$ 行列 $Q = (Q_{i,j})$ を次のように定義する:

$$Q_{i,j} \equiv \begin{cases} q_i & (i = j), \\ \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle & (i \neq j). \end{cases} \quad (3)$$

このとき、FM のモデル方程式 (1) は次のように書き下せる:

$$y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = c + \sum_{\substack{i,j=1 \\ (i \leq j)}}^n Q_{i,j} x_i x_j. \quad (4)$$

行列 Q の非対角項が FM のモデル方程式の 2 次の項に対応する。また、 $Q_{i,i}(x_i)^2 = q_i x_i$ なので、行列 Q の対角項がモデル方程式の 1 次の項に対応することもわかる。以上から、FM のモデル方程式が QUBO 形式 (4) で表現できることが示された。

3.2 FM の学習に関する計算複雑性

この節では、FM の学習の際に利用するモデル方程式の偏微分係数が kn の線形時間で評価可能であることを示す。この性質のおかげで、説明変数の数が多い問題においても高速に学習を行える。

FM の学習は、訓練データとして与えられた説明変数の値と対応するラベルの組 $\{(\mathbf{x}^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (\mathbf{x}^{(N)}, y^{(N)})\}$ に対して、損失関数を最小化するようにモデルパラメータを更新することで行う。ここで、 N は訓練データ数を表す。損失関数として、本研究では次の平均二乗誤差を用いた:

$$L_{\text{MSE}}(\boldsymbol{\theta}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(y(\mathbf{x}^{(i)}; \boldsymbol{\theta}) - y^{(i)} \right)^2. \quad (5)$$

モデルパラメータの更新のために損失関数の勾配を計算する必要がある。損失関数 (5) より、FM のモデル方程式のモデルパラメータに関する偏微分係数 $\partial y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) / \partial \theta$ が重要なことがわかる。ここで、 θ はどれか一つのモデルパラメータを指す。FM のモデル方程式 (1) より、この偏微分係数は以下のように求められる:

$$\frac{\partial y(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \theta} = \begin{cases} 1 & (\theta = c), \\ x_i & (\theta = q_i), \\ \left(\sum_{j=1}^n v_{j,l} x_j \right) x_i - v_{i,l} x_i^2 & (\theta = v_{i,l}). \end{cases} \quad (6)$$

ここで、 $v_{i,l}$ に関する偏微分係数は、式 (2) から導出できる。式 (6) の右辺最後の式の第一項は、 $O(n)$ の計算量を必要とする。しかし、括弧内が i には依らないため、計算結果をメモ化することにより計算量を抑えることができる。結果として、 $v_{i,l}$ ($i = 1, \dots, n; l = 1, \dots, k$) に関する全ての偏微分係数を求めるための計算量が $O(kn)$ であることがわかる。他のモデルパラメータの偏微分係数を全て求めるための計算量は $O(n)$ なので、全体の計算量が $O(kn)$ となる。

4. Factorization Machine with Annealing

この節では、本研究で利用するサロゲートモデルを利用

したブラックボックス最適化手法について説明する。ここで説明する手法は、北井らによって提案されたFMQA [19]とほぼ同じ手法である。FMのモデル方程式の低エネルギー解探索のためにイジングマシンを利用するので、説明変数はバイナリ値を取るものとする。つまり、FMのモデル方程式はQUBO形式となる。前述したように、FMQAではQUBOモデルの低エネルギー解を求めるために量子アニーリングマシンを利用しているが、本研究では、量子アニーリングマシン実機のノイズの影響を排除してFMAの有効性を明確に調べるため、性質のよく知られたシミュレーテッドアニーリング(SA)法を利用した。

FMAでは、学習、サンプリング、評価の3つの段階を反復することで最適解を探索する。反復を繰り返すたびに新たなサンプルを生成し、得られた全てのサンプル内の最も良い解を最終的な出力とする。以下では、各段階について順番に説明する。

学習段階では、これまでに得られたサンプルを訓練データとして利用してFMの学習を行う。最初の学習段階ではFMAが生成したサンプルが存在しないため、事前にいくつかのサンプルを生成しておく必要がある。一つのサンプルは、説明変数の値とそれに対するブラックボックス関数の値のペアから成る。既存サンプルに対する平均二乗誤差(5)を最小化するようにモデルパラメータを更新する。更新に利用できるアルゴリズムとしては、確率的勾配降下法やモーメンタム法[27]、Adam法[28]などがある。この研究では、Adam法を利用した。

サンプリング段階では、学習したFMのモデル方程式の低エネルギー解を生成して評価すべきサンプル候補の選定を行う。今の場合、FMのモデル方程式がQUBO形式なので、イジングマシンをそのまま適用可能である。本研究では、一般的なSA法を利用して低エネルギー解の探索を行った。一回の反復で複数のサンプルを生成することで、ブラックボックス関数の低エネルギー領域の情報を多く取り込めると期待される。

評価段階では、選定したサンプル候補に対するブラックボックス関数値を計算する。サンプリング段階で選定したサンプル候補を入力としたときのブラックボックス関数の値を計算し、入力と出力のペアを訓練データに追加する。

以上3つの段階を、新たなサンプルが見つからなくなるか、指定した反復回数の上限に達するまで反復する。そして、全てのサンプルの中で最もコスト関数の値が最小のものを最終的な出力とする。

5. 整数変数の最適化問題におけるFMA

これまでのFMAは、イジングマシンを利用するために、説明変数が取り得る値をバイナリ値に限定していた[19,21]。しかし、説明変数が整数値を取る問題も多く存在する。イジングマシンを活用する上で、整数を扱うための手法開

発は重要な課題である。この課題に対応する方法としては、一つの整数を複数のバイナリ変数を使って表現する方法が挙げられる。バイナリ値と整数との対応関係の取り方によっていくつかの整数表現方法が存在する。本研究では、整数表現方法として、2進数表現、One-hot表現、Domain-wall表現の3つの表現方法を利用して、整数変数のブラックボックス最適化問題へFMAの適用範囲を拡大し、その性能を評価した。この節では、まず整数表現方法について説明した後、整数変数のブラックボックス最適化問題に対するFMAを説明する。

5.1 整数表現方法

まず、2進数展開を利用した整数表現方法を説明する。この方法は、一般的に、コンピュータ上での整数表現方法の中で頻りに利用されている。2進数展開を利用した表現において、符号付き整数 m とビット列 $x = (x_0, \dots, x_{d-1})$ は以下の対応がある：

$$m = x_0 + 2x_1 + \dots + 2^{d-2}x_{d-2} - 2^{d-1}x_{d-1}. \quad (7)$$

ここで、正の整数 d は2進数展開の桁数を表す。

次に、One-hot表現を利用した整数表現方法を説明する。この方法では、単一のアクティブビットの位置によって整数を表現する。つまり、 d ビットの内、一つのビットのみが1を取り、残り全てのビットが0の状態のみを考え、 d 個の状態それぞれを整数に割り当てる。本研究では、アクティブビットの位置が右に行くにつれて対応する整数が大きくなる対応関係を採用する。表現する最小の整数を m_0 と置くと、以下の様に定式化できる：

$$m = m_0 + \sum_{i=0}^{d-1} ix_i. \quad (8)$$

また、One-hot制約条件は次で与えられる：

$$\sum_{i=0}^{d-1} x_i = 1. \quad (9)$$

最後に、Domain-wall表現について説明する。この方法では、アクティブビットと非アクティブビットとの境界の位置で整数を表現する。この境界のことをDomain wallと呼ぶ。左側に連続した1があり、その後は全て0の状態のみを考え、Domain wallが一つのみ存在する状態だけを考える。また、これらの状態に加え、全て0と全て1の状態も考慮に入れる。 d 桁のビット列を利用することで、 $d+1$ 個の整数を表現可能となる。通常、全て0の状態を最小の整数に、全て1の状態を最大の整数に対応させ、Domain wallの位置が右にくるにつれて大きな整数になる様な対応関係を取る。表現する最小の整数を m_0 とすると、整数 m を以下の式で表現できる：

$$m = m_0 + \sum_{i=1}^{d-1} i(x_{i-1} - 2x_{i-1}x_i + x_i) + dx_{d-1}. \quad (10)$$

5.2 FMA の手順

整数変数のブラックボックス最適化問題に対する FMA の適用方法についてまとめる。これまでの FMA との違いは、ブラックボックス関数が整数変数を入力として持つことである。よって、イジングマシンの出力を整数に変換するデコーダーが必要となる。また、One-hot 表現や Domain-wall 表現を利用した場合、ビット列の取り得る値に制限があるため、無効なビット列を除去するフィルターも必要となる。この節では、従来の FMA との違いのみに着目して説明する。

提案手法では、従来の FMA のサンプリング段階と評価段階との間にもう一つの段階を追加する。この段階は、無効なサンプルを除去するフィルターと整数へのデコーダーから構成される。まず、フィルターにより無効なサンプルを除外する。One-hot 表現を利用した場合は、2つ以上のアクティブビットを持つサンプルとビット列が全て 0 のサンプルを除外する。Domain-wall 表現の場合であれば、Domain wall の数が 2 以上のサンプルを取り除く。フィルターは整数表現に対して無効なビット列を取り除くだけでなく、ブラックボックス関数への入力として不適切なサンプルの除去にも利用できる。これに関しては、6.1 節において具体例と共に説明する。次に、整数へのデコーダーは、SA が返した QUBO モデルの低エネルギー解を対応する整数へと変換する。フィルターを通過したサンプルは全て有効なので、前述の整数表現方法を利用して整数へと変換するだけで良い。

サンプリング段階における QUBO 形式も修正が必要となる。One-hot 表現と Domain-wall 表現の場合は、無効なサンプルをできるだけ生成しないために、ペナルティ法を利用して無効なサンプルのコストを上昇させる。ペナルティ法を利用した場合のコスト関数は以下で与えられる：

$$H(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L) = H_{\text{QUBO}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L) + pC(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L). \quad (11)$$

ここで、 $\mathbf{x}_l = (x_{l,0}, \dots, x_{l,d-1})$ はコスト関数の l 番目の整数値変数を表現するためのビット列を表す。右辺の第 1 項と第 2 項は、それぞれ FM の学習によって得られた QUBO 形式のコスト関数とペナルティ関数を表す。ペナルティ関数は、無効なビット列に対して正の値（ペナルティ）を返す関数であり、正のパラメータ p によってペナルティの大きさを制御する。一般的に、適切なペナルティ係数を解析的には求められないため、事前のテストシミュレーションが必要となる。本研究では、以下の One-hot 制約のペナルティ関数を利用した：

$$C(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L) = \sum_{l=1}^L \left(\sum_{i=1}^{d-1} x_{l,i} - 1 \right)^2. \quad (12)$$

また、Domain-wall 制約のためのペナルティ関数としては、

以下の式を用いた：

$$C(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L) = 2 \sum_{l=1}^L \left(\sum_{i=1}^{d-1} x_{l,i} - \sum_{i=0}^{d-2} x_{l,i} x_{l,i+1} \right). \quad (13)$$

6. 適用問題と結果

この節では、提案手法の性能を評価するために利用した適用問題とその結果について説明する。本研究では、水素分子の基底状態探索に FMA を適用した。ブラックボックス関数は、量子状態ベクトルを入力とし、それに対応する水素分子のエネルギーを返す。水素分子の場合、量子状態ベクトルの要素は一般に実数を取るが、要素を整数で近似することで提案手法を適用可能にした。水素分子間の距離を変化させたときの基底エネルギーを計算することで最も安定な構造を探索する問題に対して手法を適用し、それぞれの整数表現方法について結果の振る舞いを観察した。

6.1 水素分子の基底状態探索

水素分子のエネルギーを表現するために、第二量子化したハミルトニアンを利用する：

$$H = h_0 + \sum_{p,q=1}^4 h_{pq} c_p^\dagger c_q + \sum_{p,q,r,s=1}^4 h_{pqrs} c_p^\dagger c_q^\dagger c_r c_s. \quad (14)$$

ここで、 h_0 は原子核間のポテンシャルエネルギー由来の定数であり、 h_{pq} と h_{pqrs} はそれぞれ 1 電子積分と 2 電子積分を表す。これらの積分は通常のコピーで効率的に計算可能である [29,30]。原子間距離依存性は全てこれらの積分に含まれるため、原子間距離を変えるたびに 1 電子積分と 2 電子積分を計算する必要がある。演算子 c_p^\dagger (c_p) は、モード p にフェルミ粒子を生成（消滅）させる演算子を表す。水素分子の量子状態は 4 つのモードで表現され、量子状態ベクトルは 16 個の成分を持つ。本研究では、16 次元の整数ベクトルの空間内で水素分子の低エネルギー解を探索する。

本研究では、与えられた量子状態に対応する水素分子のエネルギー期待値を計算する関数をブラックボックス関数として用いた。正確には、水素分子のエネルギー期待値の関数形が与えられているためブラックボックス関数の定義から外れているが、提案手法の有効性を明確に調べるために、性質の明らかな関数をブラックボックス関数の代わりとして採用した。この関数は、量子状態ベクトルの成分を表す 16 個の引数を持つ。この 16 個の引数から規格化した量子状態ベクトルを構成し、その量子状態ベクトルに対するハミルトニアンの期待値を計算することで目的の出力を得る。ただし、ブラックボックス関数への入力の内、全て 0 のベクトルは対応する量子状態が存在しないため無効な入力となることに注意する。よって、全て 0 の入力はフィルターを利用して除外する。

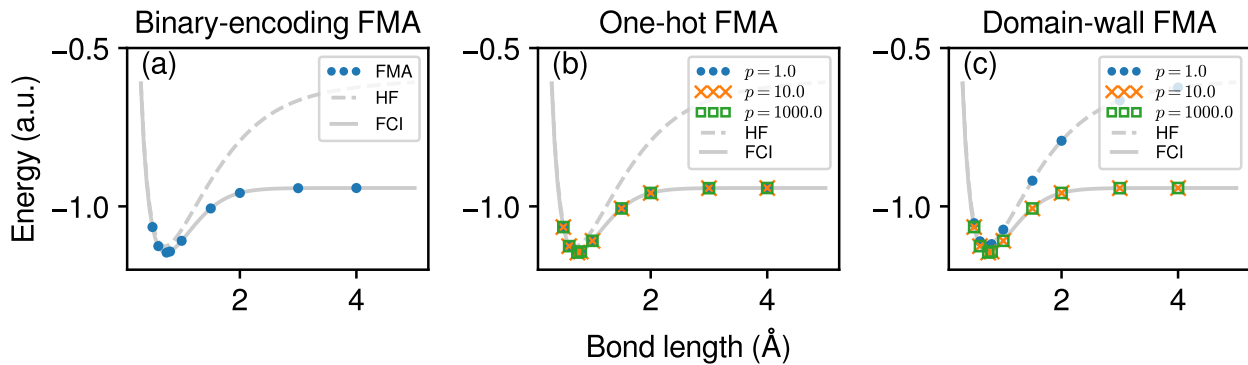


図 1 水素分子の基底エネルギーの原子間距離依存性. エネルギーの単位には原子単位系を, 長さの単位にはオングストロームを用いた. それぞれの原子間距離に対して, 初期条件を変えながら独立に FMA を 10 回試行し, その中で最もエネルギーの低い解を示している. (a) 2 進数展開を利用した FMA の結果. 青色の点が FMA の結果を表している. ビット列の桁数は 8 とし, -64 から 63 までの整数を利用した. FM のランクは $k = 4$ とした. 灰色の破線と実線は, それぞれ Hartree-Fock (HF) 法と完全配置間相互作用 (FCI) 法で計算した基底エネルギーを表す. (b) One-hot 表現を利用した FMA の結果. ビット列の桁数は 64 とし, -32 から 31 までの整数を利用した. FM のランクは $k = 8$ とした. (c) Domain-wall 表現を利用した FMA の結果. ビット列の桁数は 63 で, 表現できる整数の範囲は One-hot 表現のときと揃えた. FM のランクは $k = 8$ である. ペナルティ係数が $p = 1$ のときは, Domain-wall 表現の制約を満たす解をシミュレーティッドアニーリングで求めることができなかったため, 厳密解を求められていない. しかし, ペナルティ係数を大きくすることで, 厳密解に近い解を見つけることができる.

6.2 結果

水素分子の基底エネルギーの原子間距離依存性を図 1 に示す. ペナルティ係数の大きさに注意が必要ではあるが, 全ての整数表現方法において, 提案手法が厳密な基底エネルギーに近い解を探索可能であることを数値的に示すことができた. 結果の比較のために, Hartree-Fock (HF) 法と完全配置間相互作用 (FCI) 法で計算した水素分子の基底エネルギーも図示する. HF 法は, 最も基本的な近似手法であり, 定性的な分子の振る舞いを調べる際に利用される. 一方, FCI 法は与えられたハミルトニアンでの厳密な基底エネルギーを計算できる. 実際, FCI 法によって計算した基底エネルギーと, ハミルトニアン (14) の厳密対角化によって計算した基底エネルギーが一致する. 全ての整数表現方法において, FMA が厳密解に近い基底エネルギーを導出できていることが確認できる. ただし, Domain-wall 表現を利用した場合は, ペナルティ係数が 1 のときはペナルティが小さすぎるため, SA で Domain-wall 制約を満たす解を探索できなかった. 講演においては, それぞれの整数表現方法の違いについて FMA の収束性や解の精度の観点からも議論する予定である.

7. まとめ

本研究では, 整数変数のブラックボックス最適化問題を FMA を利用して解く方法を提案した. 整数を表現するい

くつかの方法に対して FMA が動作することを, 水素分子の基底エネルギー計算を例に数値的に確認した. また, それぞれの整数表現方法間の違いについても調査した. 本研究結果は, イジングマシンの応用範囲拡大に大きく寄与することが期待される.

謝辞 この研究は, 一部, 総合科学技術・イノベーション会議 SIP(戦略的イノベーション創造プログラム)「光・量子を活用した Society5.0 実現化技術」, JSPS 科研費 19H01553, 21K03391 の支援を受けて実施された.

参考文献

- [1] Johnson, M. W., Amin, M. H. S., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A. J., Johansson, J., Bunyk, P., Chapple, E. M., Enderud, C., Hilton, J. P., Karimi, K., Ladizinsky, E., Ladizinsky, N., Oh, T., Perminov, I., Rich, C., Thom, M. C., Tolkacheva, E., Truncik, C. J. S., Uchaikin, S., Wang, J., Wilson, B. and Rose, G.: Quantum annealing with manufactured spins, *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198 (2011).
- [2] Barends, R., Shabani, A., Lamata, L., Kelly, J., Mezzacapo, A., Heras, U. L., Babbush, R., Fowler, A. G., Campbell, B., Chen, Y., Chen, Z., Chiaro, B., Dunsworth, A., Jeffrey, E., Lucero, E., Megrant, A., Mutus, J. Y., Neeley, M., Neill, C., O’Malley, P. J. J., Quintana, C., Roushan, P., Sank, D., Vainsencher, A., Wenner, J., White, T. C., Solano, E., Neven, H. and Martinis, J. M.: Digitized adiabatic quantum computing with a superconducting circuit, *Nature*, Vol. 534, No. 7606, pp. 222–226 (2016).

- [3] Rosenberg, D., Kim, D., Das, R., Yost, D., Gustavsson, S., Hover, D., Krantz, P., Melville, A., Racz, L., Samach, G. O., Weber, S. J., Yan, F., Yoder, J., Kerman, A. J. and Oliver, W. D.: 3D integrated superconducting qubits, *npj Quantum inf.*, Vol. 3, No. 1, pp. 1–5 (2017).
- [4] Maezawa, M., Fujii, G., Hidaka, M., Imafuku, K., Kikuchi, K., Koike, H., Makise, K., Nagasawa, S., Nakagawa, H., Ukibe, M. and Kawabata, S.: Toward practical-scale quantum annealing machine for prime factoring, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 88, No. 6, p. 061012 (2019).
- [5] Novikov, S., Hinkey, R., Disseler, S., Basham, J. I., Albash, T., Risinger, A., Ferguson, D., Lidar, D. A. and Zick, K. M.: Exploring More-Coherent Quantum Annealing, *2018 IEEE Int. Conf. on Rebooting Comput. (ICRC)*, IEEE, pp. 1–7 (2018).
- [6] Mukai, H., Tomonaga, A. and Tsai, J.-S.: Superconducting Quantum Annealing Architecture with LC Resonators, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 88, No. 6, p. 061011 (2019).
- [7] Tsukamoto, S., Takatsu, M., Matsubara, S. and Tamura, H.: An accelerator architecture for combinatorial optimization problems, *Fujitsu Sci. Tech. J.*, Vol. 53, No. 5, pp. 8–13 (2017).
- [8] Aramon, M., Rosenberg, G., Valiante, E., Miyazawa, T., Tamura, H. and Katzgraber, H. G.: Physics-Inspired Optimization for Quadratic Unconstrained Problems Using a Digital Annealer, *Front. Phys.*, Vol. 7, p. 48 (2019).
- [9] Yamaoka, M., Yoshimura, C., Hayashi, M., Okuyama, T., Aoki, H. and Mizuno, H.: A 20k-Spin Ising Chip to Solve Combinatorial Optimization Problems With CMOS Annealing, *IEEE J. Solid-State Circuits*, Vol. 51, No. 1, pp. 303–309 (2016).
- [10] Goto, H., Tatsumura, K. and Dixon, A. R.: Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems, *Sci. Adv.*, Vol. 5, No. 4, p. eaav2372 (2019).
- [11] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems, *Front. Phys.*, Vol. 2, p. 5 (2014).
- [12] Tanahashi, K., Takayanagi, S., Motohashi, T. and Tanaka, S.: Application of Ising Machines and a Software Development for Ising Machines, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 88, No. 6, p. 061010 (2019).
- [13] Tanaka, S., Tamura, R. and Chakrabarti, B. K.: *Quantum spin glasses, annealing and computation*, Cambridge University Press (2017).
- [14] AI&ロボット委員会量子コンピュータ推進WG：拡大する量子コンピューティングその社会実装ポテンシャル、モバイルコンピューティング推進コンソーシアム (MCPC) (オンライン), 入手先 (https://www.mcpc-jp.org/news/pdf/20200325_potential.pdf) (参照 2022-03-01).
- [15] Eggenberger, K., Feurer, M., Hutter, F., Bergstra, J., Snoek, J., Hoos, H. H. and Leyton-Brown, K.: Towards an empirical foundation for assessing bayesian optimization of hyperparameters, *NIPS workshop on Bayesian Optimization in Theory and Practice*, Vol. 10, No. 3 (2013).
- [16] Ju, S., Shiga, T., Feng, L., Hou, Z., Tsuda, K. and Shiomi, J.: Designing Nanostructures for Phonon Transport via Bayesian Optimization, *Phys. Rev. X*, Vol. 7, p. 021024 (2017).
- [17] Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O. and Walsh, A.: Machine learning for molecular and materials science, *Nature*, Vol. 559, No. 7715, pp. 547–555 (2018).
- [18] Terayama, K., Sumita, M., Tamura, R. and Tsuda, K.: Black-Box Optimization for Automated Discovery, *Acc. Chem. Res.*, Vol. 54, No. 6, pp. 1334–1346 (2021).
- [19] 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, No. 1, p. 013319 (2020).
- [20] Rendle, S.: Factorization machines, *2010 IEEE International conference on data mining*, IEEE, pp. 995–1000 (2010).
- [21] 松森唯益, 滝雅人, 門脇正史: QUBO ソルバーによるプリント回路基板の縮結点配置設計, 第4回量子ソフトウェア研究発表会 13, (株) デンソー (2021).
- [22] Gao, Q., Jones, G. O., Sugawara, M., Kobayashi, T., Yamashita, H., Kawaguchi, H., Tanaka, S. and Yamamoto, N.: Quantum-Classical Computational Molecular Design of Deuterated High-Efficiency OLED Emitters, *arXiv preprint arXiv:2110.14836* (2021).
- [23] Izawa, S., Kitai, K., Tanaka, S., Tamura, R. and Tsuda, K.: Continuous black-box optimization with quantum annealing and random subspace coding, *arXiv preprint arXiv:2104.14778* (2021).
- [24] Brochu, E., Cora, V. M. and De Freitas, N.: A tutorial on Bayesian optimization of expensive cost functions, with application to active user modeling and hierarchical reinforcement learning, *arXiv preprint arXiv:1012.2599* (2010).
- [25] Audet, C., Denni, J., Moore, D., Booker, A. and Frank, P.: A surrogate-model-based method for constrained optimization, *8th symposium on multidisciplinary analysis and optimization*, p. 4891 (2000).
- [26] Motoyama, Y., Tamura, R., Yoshimi, K., Terayama, K., Ueno, T. and Tsuda, K.: Bayesian optimization package: PHYSBO, *arXiv preprint arXiv:2110.07900* (2021).
- [27] Rumelhart, D. E., Hinton, G. E. and Williams, R. J.: Learning representations by back-propagating errors, *Nature*, Vol. 323, No. 6088, pp. 533–536 (1986).
- [28] Kingma, D. P. and Ba, J.: Adam: A method for stochastic optimization, *arXiv preprint arXiv:1412.6980* (2014).
- [29] Reeves, C. M. and Fletcher, R.: Use of Gaussian Functions in the Calculation of Wavefunctions for Small Molecules. III. The Orbital Basis and Its Effect on Valence, *J. Chem. Phys.*, Vol. 42, No. 12, pp. 4073–4081 (1965).
- [30] O-hata, K., Taketa, H. and Huzinaga, S.: Gaussian expansions of atomic orbitals, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 21, No. 11, pp. 2306–2313 (1966).