Society5.0 を支える革新的コンピューティング技術 2018 年度採択研究代表者

2019 年度 実績報告書

本村 真人

東京工業大学科学技術創成研究院 教授

学習/数理モデルに基づく時空間展開型アーキテクチャの創出と応用

§1. 研究成果の概要

本プロジェクトは、アーキテクチャ、機械学習、社会応用アルゴリズム、数理科学の4グループ体制で、相互に協力しながら研究開発を遂行している。

アーキテクチャグループ

数理科学グループと共同で研究を進めてきた確率セルラオートマタ(SCA)動作によるアニーリング方式に関して、全スピン結合・全スピン並列更新が可能な新しいアーキテクチャの提案と試作チップ開発を行った. 集積回路のオリンピックと呼ばれる International Solid-State Circuits Conference 2020 (2020 年 2 月)の AI 分野セッションで論文発表・デモ展示を行い、高い評価を得た. また、IEEE Spectrum、日経新聞本誌など、メディアにも多く掲載された.

機械学習グループ

時空間展開型・エッジ知能コンピュータの中核技術の一つであるアンサンブル・オンライン学習エッジアクセラレータの技術確立には、時空間展開アーキテクチャに適した新しいアンサンブル学習とオンライン学習アルゴリズムと、その効率良いハードウェア上の実装法が重要である. FPGA実装における HW 量の削減に関して、昨年度末に開発したランダムフォレスト(RF)識別器の実装における、構成決定木ノードの異なる識別テスト数削減問題を解くアルゴリズムに関し、拡張および有効性の検証を行った. この成果は、機械学習のトップ国際会議である ECML/PKDD2019 に採択され、2019 年 9 月に発表を行った。また、得られたアンサンブル識別子からコンパクトな論理回路を実現する方法として、質問学習を用いる方法の開発を開始した. システムの実運用や社会応用に関する研究項目として、頑健かつ自律的な実運用を可能にするために多腕バンディット法を用いたブラックボックス関数の能動的探索アルゴリズムに関する成果が、機械学習分野の最難関学術誌 Mach. Learning 誌に掲載された. 決定木アンサンブルを用いた逐次実験計画に関して、

予測分散を用いた最適実験計画手法を開発し、化学分野における触媒設計問題へ適用し、極めて優れた研究として、触媒計算分野の権威ある学術誌 ChemCatChem の FrontCover 論文に採択された。また、実世界の多様な構造データに適用するための Graph Neural Networks の学習に関する新しい技術を提案した。さらに、構造データへの周辺技術として、複数高速データストリームを扱う世界で初めてのオンライン接尾辞木索引を開発し、トップ学術誌に採択された。

社会応用アルゴリズムグループ

現状のアニーリングマシンで表現されるスピン間の相互作用は、2体相互作用(2つのスピンの 積)に限られており、組合せ最適化問題等のコスト関数を2次関数で表現する必要があった。この ため、さらなる応用先への展開や、また、アンサンブル学習への適用においても識別性能のさらな る向上が困難となっていた。このため、日立北大ラボでは、北大情報科学科・理学部数学科と連携 し、プログラミングコンテストを開催するなど、多体相互作用(多数のスピンの積)を扱うためのアル ゴリズム開発の強化を推進してきた。19 年度は、本アルゴリズムを通じて考案された、多体問題埋 込アルゴリズムを CMOS アニーリングマシンに適用し、従来アルゴリズムよりも少ないメモリ消費量 で多体問題をイジングモデルに変換できることを確認した[3]。また、人口減少や少子高齢化に伴 い複雑化する社会課題解決に向けた新サービスを構築する上で、周囲の環境変化に対してロバ スト性や順応性を有する時空間最適化技術が必要になる。このため、買物支援サービスを例に時 空間最適化技術を具体的な最適化問題として数学的に定義し、さらに、本課題に関するプログラミ ングコンテストを開催した([4] 日立北大ラボ×北海道大学 社会創造数学コンテスト 2019, https://atcoder.jp/contests/hokudai-hitachi2019-1)。 コンテスト参加登録者数は 1000 名を超え、 本技術開発構築に向けた新たな知見を得た。一方、中長期的な研究課題として、時空間展開型 アーキテクチャを特徴づける命令セットとはどのようなものであるかを考え、ハードウェアとソフトウェ アを統合的に扱う新しいアルゴリズム基盤技術の構築を目指し、プロジェクトメンバ間での技術的な 議論をさらに進めた。

数理科学グループ

[数-1] 時分割のアイデアに基づくグラフ埋め込みアルゴリズムを考案して、埋め込みに必要な分割ステップ数の評価を行った。[数-2] 1 回の更新で複数のスピンを同時に反転しうる MCMCの一つである SCA を考察し、十分高温では混合時間が系の大きさの対数程度であること、平均スピン反転数/単位時間が従来の Glauber の場合よりも大きくなる pinning パラメターq の範囲が存在すること、標準的な SA の温度スケジュールを用いて基底状態を探索できること、誤差の範囲内でスピン配位間の順序が変わらないような q の範囲が存在することを数学的に証明した。[数-3] ハミルトニアンに含まれる局所磁場や結合定数を或る桁から先を無視した場合や、局所磁場と結合定数が同時に小さい点を全て無視した場合、誤差の範囲内でスピン配位間の順序が変動しないための十分条件を求め、完全グラフ上のスピングラスに応用した。

[数-4] 2019年2月に日立北大でプログラミングコンテストを行った。数学的に難しい問題であったのにかかわらず 111 名が参加し、大きな反響があった。優勝者のコードは既存のアルゴリズムと同等あるいはいくつかのケースではそれを上回る性能を示した。この結果は、優勝者との共著で国際

会議 26th International Symposium on Artificial Life and Robotics にて発表した。この技術の開発により、STATICA で解き得る問題のクラスを一層広げることができると期待される。その他、数式処理分野でのトップカンファレンスである International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC2020)に論文が受理された[4]。

- [1] K Yamamoto; K Ando; N Mertig; T Takemoto; M Yamaoka; H Teramoto; A Sakai; S Takamaeda-Yamazaki; M Motomura, "STATICA: A 512-Spin 0.25M-Weight Full-Digital Annealing Processor with a Near-Memory All-Spin-Updates-at-Once Architecture for Combinatorial Optimization with Complete Spin-Spin Interactions," Digest of International Solid-State Circuits Conference, 2020. [2] Atsuyoshi Nakamura and Kento Sakurada, "An Algorithm for Reducing the Number of Distinct Branching Conditions in a Decision Forest", Proc. of the European Conference on Machine Learning and Principles and Practice of Knowledge Discovery in Database 2019, Lecture Notes in Computer Science, vol. 11906, 2020 (in printing)
- [3] Sugie Y, Mertig N, Iwata Y, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Komatsuzaki T and Takemoto T, "Compiling higher order binary optimization problems into annealing processors," 25th International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 25th 2020), Beppu, Japan, Jan 22–24, 2020.
- [4] H. Teramoto and K. Nabeshima, "Parametric Standard System for Mixed Module and its Application to Singularity Theory", Proceedings of the International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC 2020), accepted for publication.

§ 2. 研究実施体制

(1)アーキテクチャグループ

- ① 研究代表者: 本村 真人 (北海道大学 大学院情報科学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - アンサンブル・オンライン学習エッジアクセラレータ
 - ・多目的エネルギー最小化エンジン

(2)機械学習グループ

- ① 主たる共同研究者:有村 博紀 (北海道大学 大学院情報科学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・ 高精度アンサンブルーオンライン学習 HW の研究開発
 - ・ 高信頼性・安全性の学習アルゴリズムの研究開発
 - ・ 時空間展開型-機械学習 HW の自動運用技術・応用技術

(3)社会応用アルゴリズムグループ

- ① 主たる共同研究者:湊 真一(京都大学情報学研究科教授)
- ② 研究項目
 - ・アニーリング計算の応用展開・評価
 - ・ 次世代アニーリング計算モデル
 - ・ 時空間展開 HW-SW 統合アルゴリズム
 - 時空間展開型-最適化問題応用

(4)数理科学グループ

- ① 主たる共同研究者:坂井 哲 (北海道大学 大学院理学研究院 准教授)
- ② 研究項目
 - ・最適グラフ埋め込み指導原理
 - ・確率セルラオートマタ(SCA)型高速サンプリング理論
 - ・ 対結合ゆらぎ基底状態安定性理論
 - ・数理モデル社会展開