

田中 宗

早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構
主任研究員・研究院准教授

機械学習の高速化を指向した量子アニーリングの研究

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題では、量子アニーリングを用いた機械学習の高速化を目的とした研究を推進している。2018 年度、本研究課題において二つの成果を得た。第一に、相互情報量を用いた特徴量選択に対する量子アニーリングの適用、第二に、マテリアルズ・インフォマティクスに対する量子アニーリングの適用である。それぞれについて以下に述べる。

相互情報量を用いた特徴量選択に対する量子アニーリングの適用

機械学習において特徴量選択は、モデルの複雑さの軽減、モデルの精度の向上、過学習を減らす等といった役割を果たす重要なプロセスである。確率変数間の相関を表す量として、相互情報量がある。本研究では、 n 個の特徴量から k 個の特徴量を選択するという制約のもと、相互情報量を最大化するという戦略を立て、それを量子アニーリングマシンの入力形式である Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) 形式へ変換する方法を見出し、QUBO 形式を量子アニーリングマシンで処理した。その結果、典型的な既存手法である線形緩和法、タブーサーチ、TPower 法に比べて計算時間と精度の観点から量子アニーリングの優位性を実験的に示唆する結果を得た。

マテリアルズ・インフォマティクスに対する量子アニーリングの適用

マテリアルズ・インフォマティクスにおいて、複雑な構造を持つ物質群の中から最も性能の高い物質構造の発見は重要な課題である。本研究では、様々な構造の中から最も熱放射効率の高いメタマテリアル構造を発見するため、ブラックボックス最適化を量子アニーリングで実行する方法を構築した。その結果、典型的な既存手法であるランダムサーチやガウシアン過程と比べて計算時間と精度の観点から量子アニーリングの優位性を実験的に示唆する結果を得た。

§ 2. 研究実施体制

①研究者： 田中宗（早稲田大学グリーン・コンピューティング・システム研究機構 主任研究員・
研究院准教授）

②研究項目

- ・相互作用情報量を用いた特徴量選択に対する量子アニーリングの適用のための定式化
- ・マテリアルズ・インフォマティクスに対する量子アニーリングの適用のための定式化
- ・定式化された各問題を量子アニーリングマシンで処理