

2024/5/10 第1回Quantum CAE研究会

● ブラックボックス最適化の高効率化に向けた  
Factorization Machineの学習手法

関 優也

慶應義塾大学



# 研究背景 | 組合せ最適化問題

<https://amplify.fixstars.com/en/demo>

削除  
上記URL先のデモを参照

# 研究背景 | 組合せ最適化用デバイスとアプリケーション

組合せ最適化問題専用ハードウェア開発およびその活用のためのミドルウェア開発が実施

## ハードウェア

## ミドルウェア



<https://www.dwavesys.com>



<https://annealing-cloud.com>



<https://www.global.toshiba>



<https://www.fujitsu.com>



<https://amplify.fixstars.com>

# 研究背景 | アニーリングによる最適化手順

イジングマシン・アニーリングマシンによる解法では、複数段階を経て最適化を実行する。  
本研究では、問題をデバイスが扱える形に変換する**定式化段階に着目**。

イジングマシンによる解法の流れ **本研究の対象**



応用探索

例. 巡回セールスマン問題  
ポートフォリオ最適化  
配送計画最適化  
デバイス設計の最適化  
など

論理QUBOモデルの構築

対象の組合せ最適化問題ごとにQUBO形式のコスト関数を導出する必要がある。

物理QUBOモデルへの変換

論理QUBOモデルを物理QUBOモデルへと変換する際に追加の補助変数が必要となる。

デバイスによる最適化の実行

古典のイジングマシン  
量子アニーリングマシン  
量子回路モデルに基づくデバイス  
など

# 研究背景 | QUBO表現

イジングマシンの従来解法では、バイナリ変数の2次式で最適化問題のコスト関数を定式化する必要がある。

$$f(\mathbf{x}) = c + \sum_{i \leq j} Q_{ij} x_i x_j \quad x_i \in \{0, 1\} \quad c \in \mathbb{R} \quad Q_{ij} \in \mathbb{R}$$



組合せ最適化問題のコスト関数は常にQUBO表現が可能か？



不可能な問題も存在する

# 研究背景 | ブラックボックス離散最適化問題

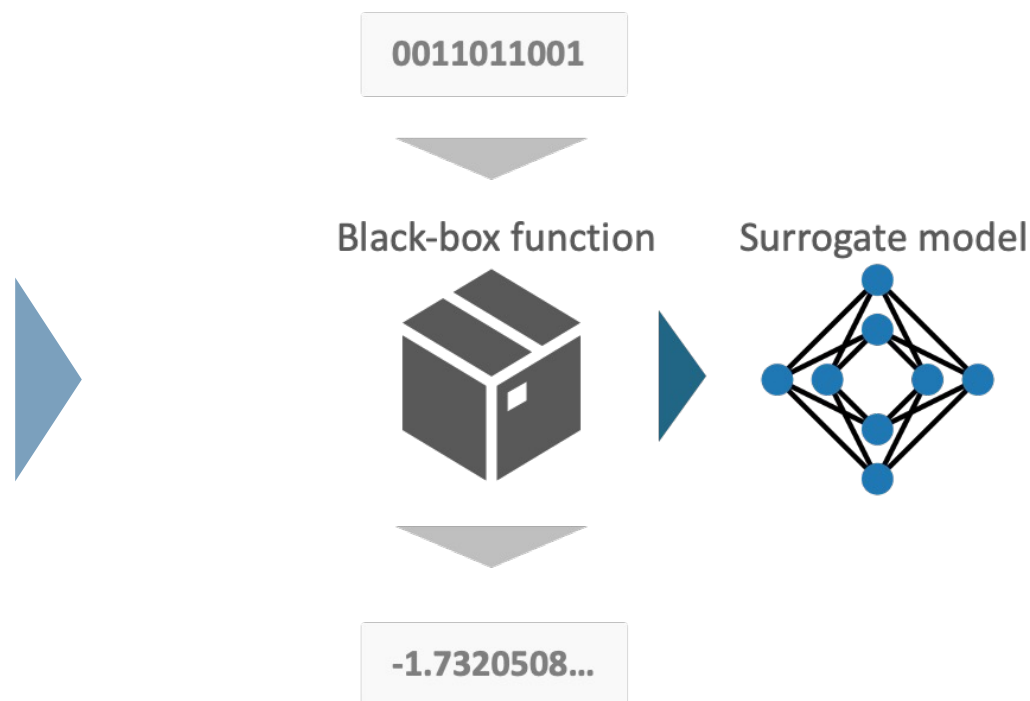
ブラックボックス最適化問題はコスト関数のQUBO定式化が困難な典型例。  
情報科学分野にはブラックボックス関数を代理モデルで表現する最適化手法が存在する。

## 典型例 | ブラックボックス最適化問題

### ブラックボックス関数

$$f(x) = ?$$

- 不明な解析形
- 高い評価コスト



# 研究背景 | FMによるコスト関数の定式化

代理モデルとして機械学習モデルの Factorization Machine (FM) を利用する。  
FMは計算時間が変数の個数の線形でしか増加しないというメリットを持つ。

## ブラックボックス関数

$$f(\mathbf{x}) = ?$$



- 関数形が不明
- 出力を得るまでに時間がかかる

## FMのモデル方程式 S. Rendle, IEEE ICDM (2010).

$$y(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^n w_i x_i + \sum_{i,j (i < j)} \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle x_i x_j$$

モデルパラメータ  $w_0, \mathbf{w}, V = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n) \in \mathbb{R}^{k \times n}$

- ✓ イジングマシンによる最適化が可能
- ✓ 入力に対する出力を  $O(kn)$  の計算量で得られる
- ✓ 学習に要する計算量も  $O(kn)$  となる
- ✓ モデルの表現能力を  $k$  で調整可能

# 研究背景 | FMAによる解法の流れ

K. Kitai et al., Phys. Rev. Research 2, 013319 (2020)

田中, 山下, 関, 日本神経回路学会誌29巻164 (2022)

<https://amplify.fixstars.com/en/demo>

## 学習データの準備

ブラックボックス関数の入出力データを準備.

Input = 

01010
00000
11111
11000

 Output = 

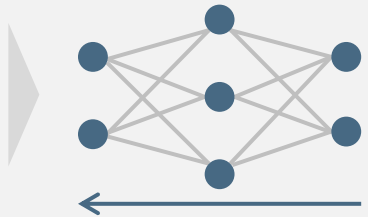
0.0
-1.0
1.0
0.0



## FMの訓練

学習データを再現するようにFMの訓練を実施.

01010
00000
11111
11000



0.2
-0.8
1.1
0.0



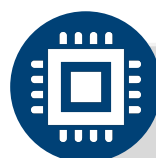
## ブラックボックス関数の評価

新たに得たサンプルに対してブラックボックス関数を評価.

01001
00000
11101
11010

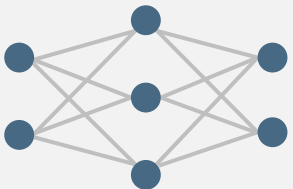


0.1
-1.0
0.9
0.2



## イジングマシンによるサンプリング

イジングマシンにより低エネルギー解をサンプリング.

 D-Wave machine 

01001
00000
11101
11010

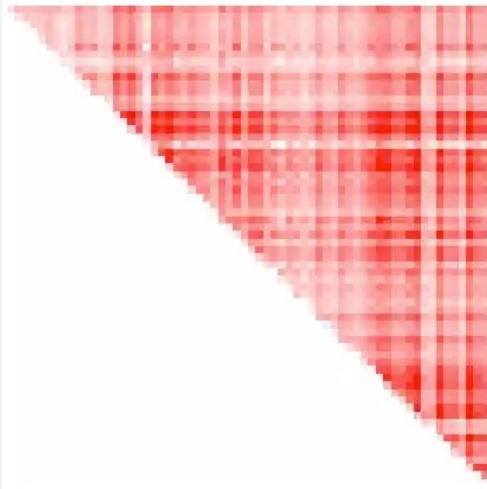


# 研究背景 | 小規模問題におけるデモンストレーション

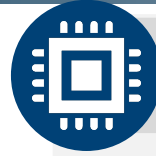
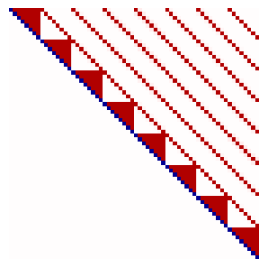


Model construction

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i \leq j} Q_{ij} x_i x_j$$



True interactions



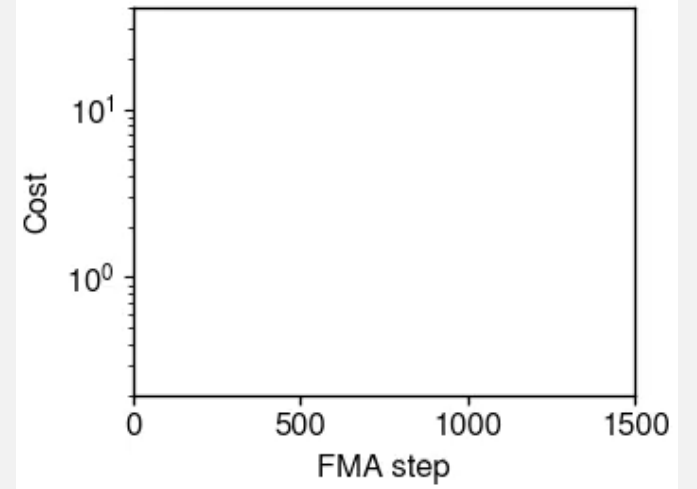
Sampling



Temporary best solution



Evaluation



# 研究背景 | FMAの材料科学への応用

<p>Design of meta materials</p> <p>削除 下記論文を参照</p> <p>K. Kitai et al., Phys. Rev. Research <b>2</b>, 013319 (2020).</p>	<p>Design of Deuterated High-Efficiency OLED Emitters</p> <p>削除 下記論文を参照</p> <p>Q. Gao et al., Intell. Comput. <b>2</b>, 0037 (2023).</p>	<p>Design of barrier materials</p> <p>削除 下記論文を参照</p> <p>K. Nawa et al., Phys. Rev. Appl. <b>20</b>, 024044 (2023) .</p>
<p>Design of photonic crystal laser</p> <p>削除 下記論文を参照</p> <p>T. Inoue, YS, et al., Opt. Express <b>30</b>, 43503-43512 (2022).</p>	<p>Development of method for material design</p> <p>削除 下記論文を参照</p> <p>YS et al., arXiv:2209.01016 (2022).</p>	

# 研究背景 | FMAによる解法の流れ (再掲)

## 本研究の着眼点

### 学習データの準備

ブラックボックス関数の入出力データを準備.

Input = 

01010
00000
11111
11000

 Output = 

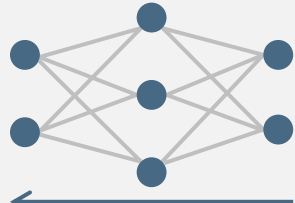
0.0
-1.0
1.0
0.0



### FMの訓練

学習データを再現するようにFMの訓練を実施.

01010
00000
11111
11000



0.2
-0.8
1.1
0.0



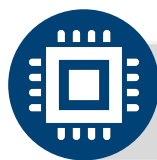
### ブラックボックス関数の評価

新たに得たサンプルに対してブラックボックス関数を評価.

01001
00000
11101
11010



0.1
-1.0
0.9
0.2



### イジングマシンによるサンプリング

イジングマシンにより低エネルギー解をサンプリング.

 D-Wave machine 

01001
00000
11101
11010

# 研究背景 | FMAによる解法の流れ (再掲)

## 訓練データの準備

ブラックボックス関数の入出力データを準備.

Input = 

01010
00000
11111
11000

 Output = 

0.0
-1.0
1.1
0.0

学習後のFMモデルは学習データセット内のサンプルに依存する.

## FMの訓練

訓練データを再現するようにFMの訓練を実施.

01010
00000
11111
11000



0.2
-0.8
1.1
0.0



効率的に低エネルギー解を得るために必要なデータはどのようなもの？

01001
00000
11101
11010



0.1
-1.0
0.9
0.2



D-Wave machine

01001
00000
11101
11010

# 本研究の目的と結果の概要

---

## 研究目標

- FMAによる低エネルギー解の探索性能を向上させる.

## 本研究の目的

- 学習データセットの特徴とFMAの性能との関係を数値的に明らかにする.
- 既存手法と比較して低エネルギー解をより探索しやすくなるサンプル生成方法を構築する.

## 今回の結果の概要

- ✓ 幾つかの特徴的な学習データセットに対する数値実験により, 高エネルギーサンプルがFMAの最適化性能に寄与する結果を得た.
- ✓ 複数温度帯からのサンプリングを活用してFMAの最適化性能が向上することを数値実験により明らかにした.

本研究の目的1

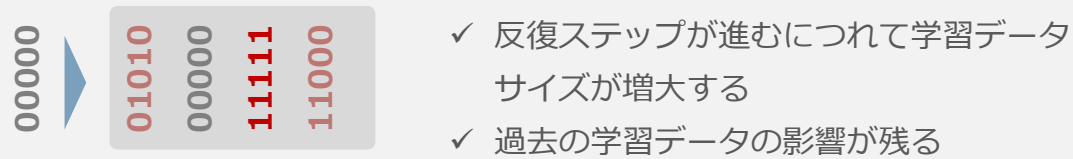
# 学習データセットの特徴とFMAの最適化性能

# セットアップ | 学習データセットの構築方法

新規学習データを既存学習データへ追加する規則を変化させた以下の4つの場合を考える。

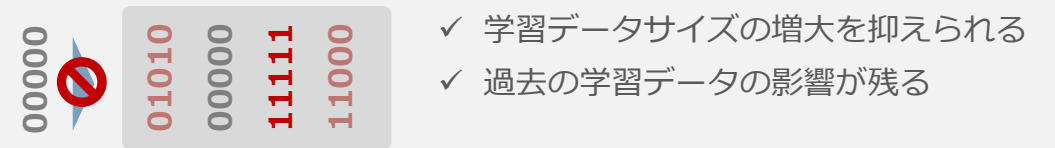
## 全サンプルデータセット

イジングマシンによって得られたサンプルを全て学習データとして利用



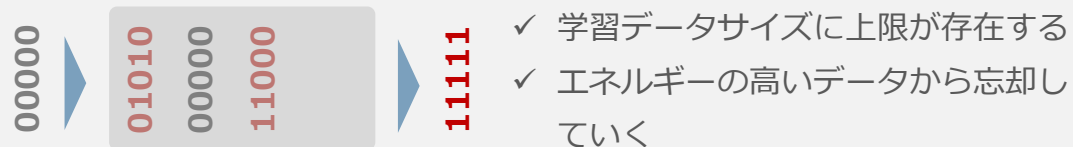
## 重複無しサンプルデータセット

重複しないサンプルのみを新たな学習データとして利用



## 低エネルギーサンプルデータセット

低エネルギーから一定個数のサンプルを学習データとして利用

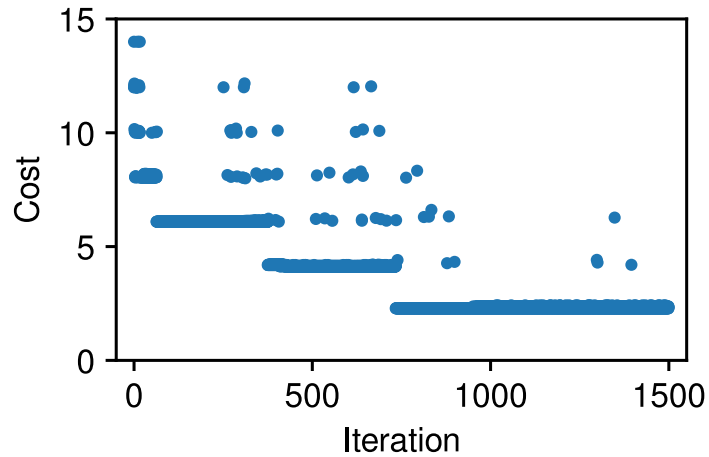


## 最新サンプルデータセット

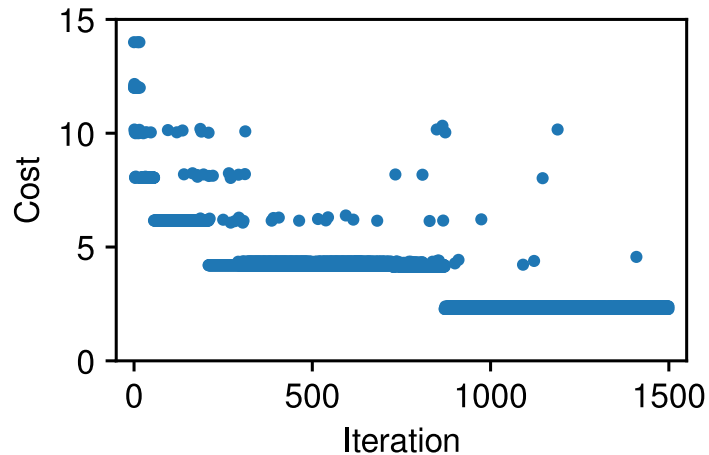
一定個数の直近のサンプルを学習データとして利用



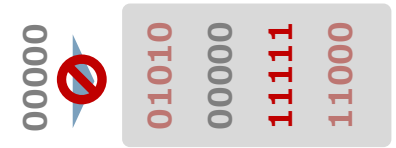
## イジングマシンにより探索されたサンプルエネルギーの反復ステップ依存性



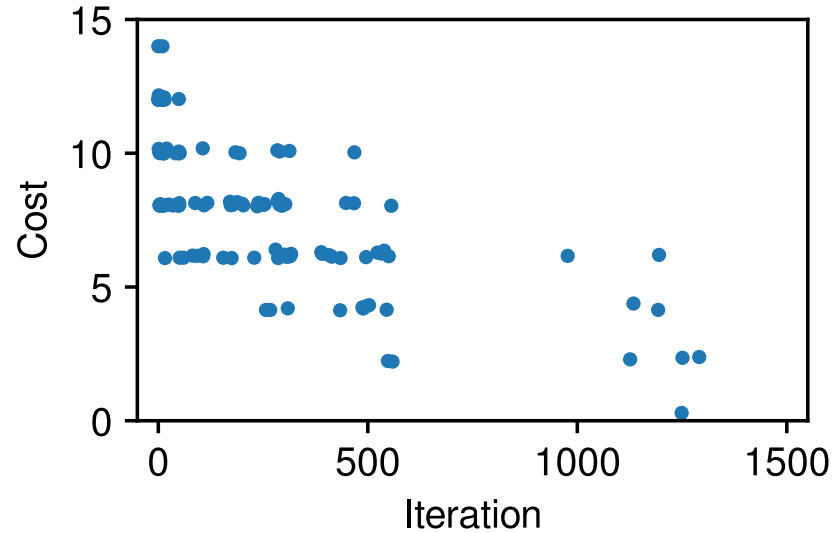
- ✓ 反復が進むにつれてエネルギーが段階的に減少している.
- ✓ エネルギーの停滞が発生している.
- ✓ 次の低エネルギーの段階に進む前に**高エネルギーサンプルが生成**されている.





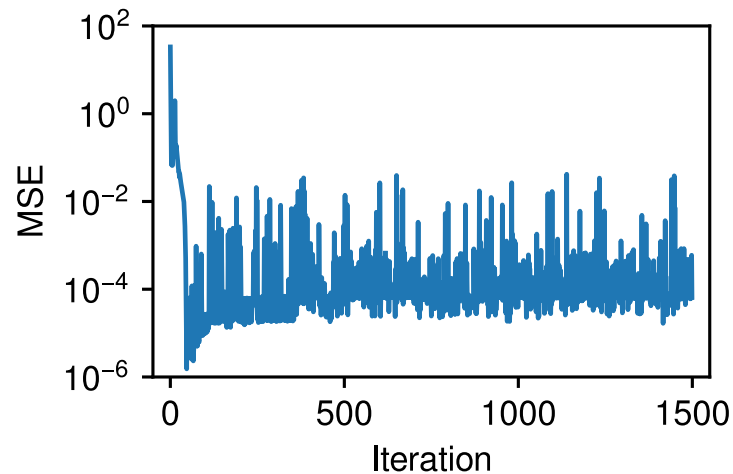
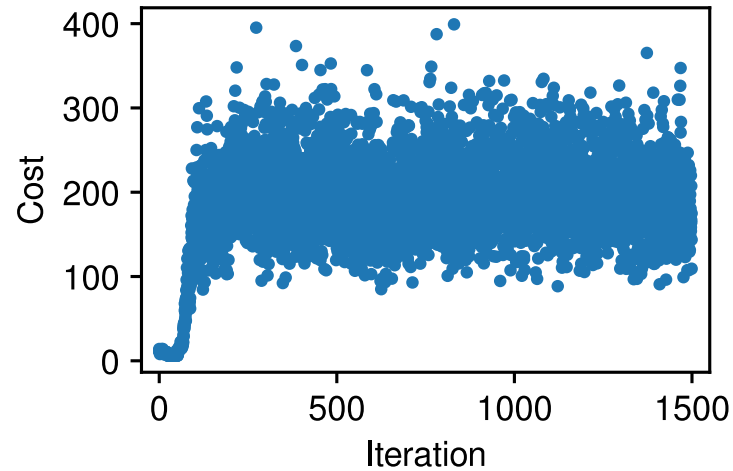


## イジングマシンにより探索されたサンプルエネルギーの反復ステップ依存性



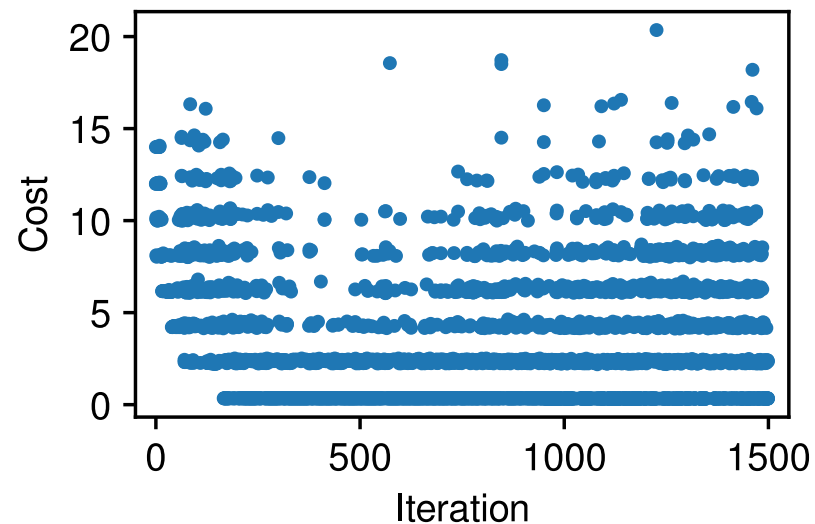
- ✓ 途中しばらく学習データが得られない段階が存在する.
- ✓ より低いエネルギーを得る前に**高エネルギーサンプル**が生成されている.

## イジングマシンにより探索されたサンプルエネルギーの反復ステップ依存性



- ✓ 反復によるエネルギーの改善が見られない.
  - ✓ 学習誤差が減少した後に高いエネルギーのサンプルが生成されている.
1. 既存サンプルをもとに低エネルギーサンプルが生成される.
  2. 学習データから高エネルギーサンプルが排除され, 低エネルギーサンプルによって学習データが占領される.
  3. 低エネルギーサンプルの重複度が増し, 有効学習データ数が減少する.
  4. 少数の低エネルギーサンプルのみを利用した学習により, 目的関数の近似精度が低下する.
  5. 高エネルギーサンプルのみが生成されるため, 学習データが更新されなくなる.

## イジングマシンにより探索されたサンプルエネルギーの反復ステップ依存性



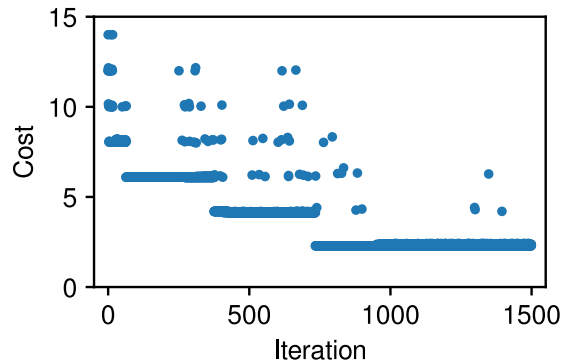
- ✓ 反復がすすんでも幅広いエネルギー帯のサンプルが生成されている。
- ✓ 古い学習データを忘却するため、FMのモデルパラメータが流動的に変化していると推測される。
- ✓ これまでの提案手法よりも低エネルギーサンプルが頻繁に得られている。

本手法の詳細な解析は以下の資料および講演を参照。

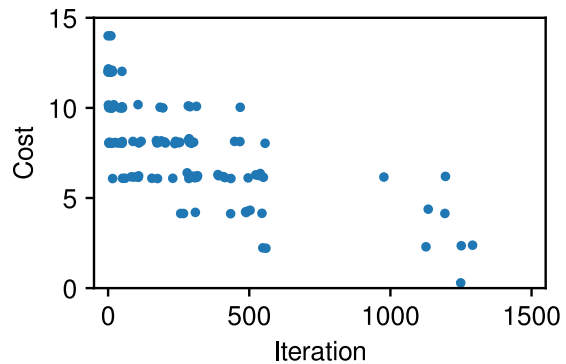
1. 中野檀, 関優也ほか, 第10回量子ソフトウェア研究発表会, (2023).
2. Mayumi Nakano, YS, et al. (to be appeared in AQC2024).

# 小括 | 学習データセットの特徴とFMAの振る舞い

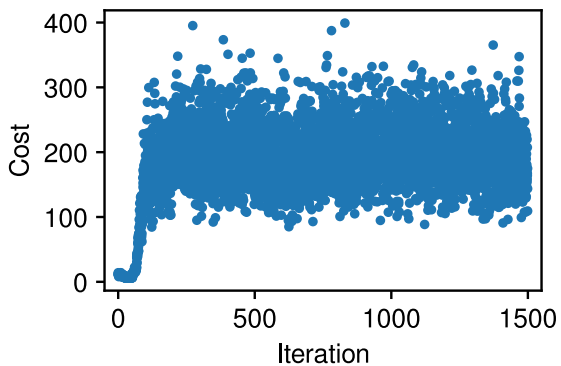
全サンプル



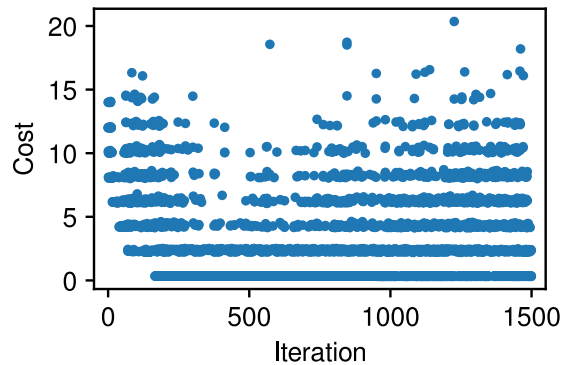
重複無しサンプル



低エネルギーサンプル



最新サンプル



- ✓ 全サンプルデータセットを用いて学習を行うと  
同じサンプルが繰り返し生成される.
- ✓ 高いエネルギーのサンプルにより低いエネルギー解が生成される.
- ✓ 少数の低いエネルギーのサンプルのみを用いて  
学習すると近似精度が悪化する.
- ✓ **高いエネルギーと低いエネルギーのサンプルを  
混ぜて学習すると低エネルギーを見つけやすい.**



**高エネルギーサンプルがFMAの性能向上へ寄与  
すると期待される**

本研究の目的2

低エネルギー一解の探索をしやすくするサンプル生成方法

# FMA効率化に向けたサンプリング方法の提案

## 学習データの準備

ブラックボックス関数の入出力データを準備。

Input = 

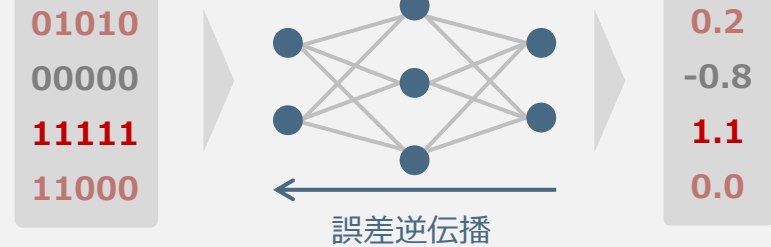
01010
00000
11111
11000

      Output = 

0.0
-1.0
1.0
0.0

## FMの訓練

学習データを再現するようにFMの訓練を実施。



高エネルギー解を意図的にサンプリング

## ブラックボックス関数の評価

新たに得たサンプルに対してブラックボックス関数を評価。



## イジングマシンによるサンプリング

イジングマシンにより低エネルギー解をサンプリング。

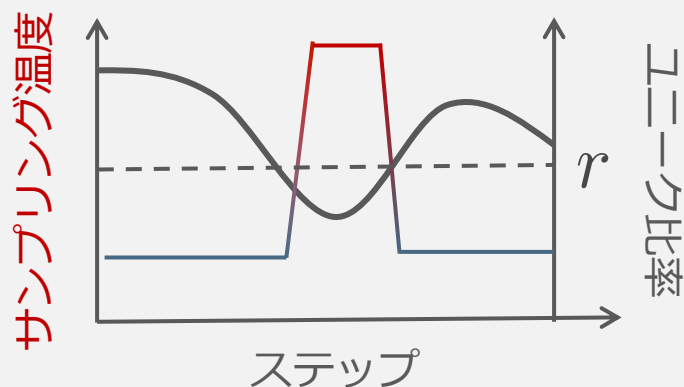


# 提案手法 | 高温の熱平衡状態からのサンプリング

低温だけでなく**高温状態からのサンプリング**を活用することで、高エネルギーサンプルを学習サンプルに追加する

## 順応的スケジューリング法

- 学習データ中のユニークなエネルギー値を持つサンプルの割合（ユニーク比率）を計測
- ユニーク比率が閾値  $r$  を下回った場合、SAによるサンプリングではなく、初期温度におけるサンプリングを実行する



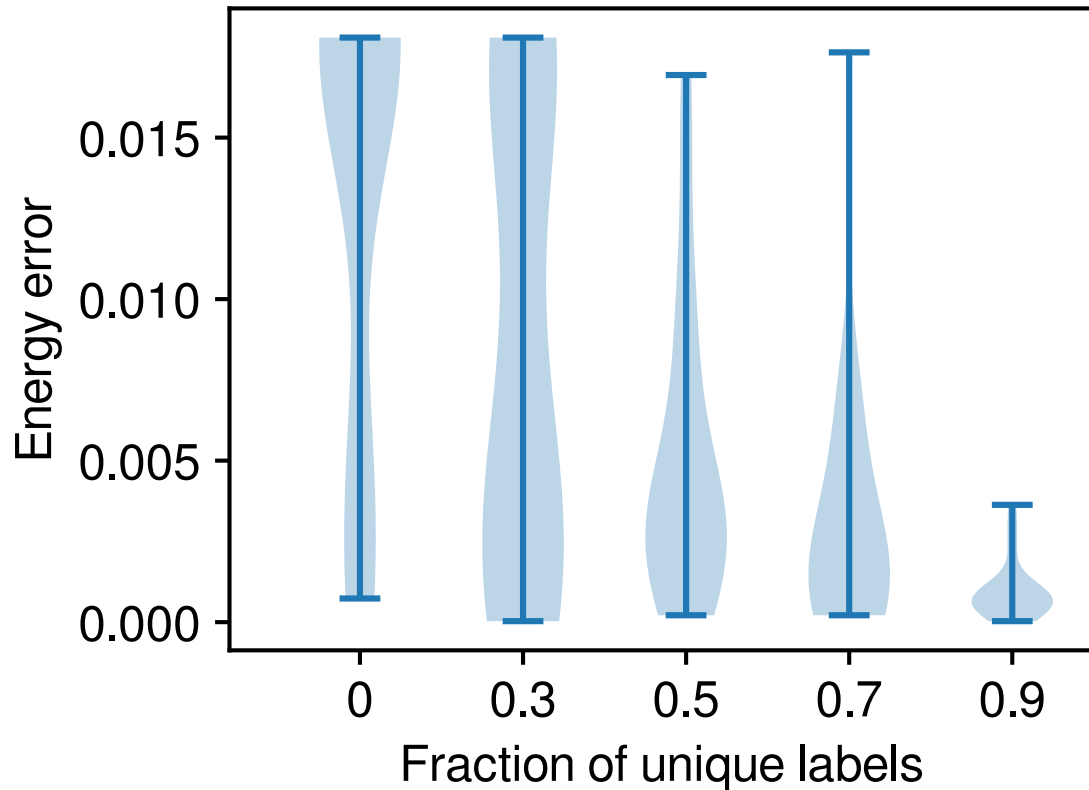
## レプリカ交換法 (Parallel tempering)

Hukushima and Nemoto, JPSJ 65, 1604 (1996)

- 複数温度帯のモンテカルロシミュレーションを同時並列的に実行する手法
- 一定ステップごとに、隣接温度帯間の状態を入れ替える
- Deterministic even-odd swap を採用



# 結果 | 順応的スケジューリング法

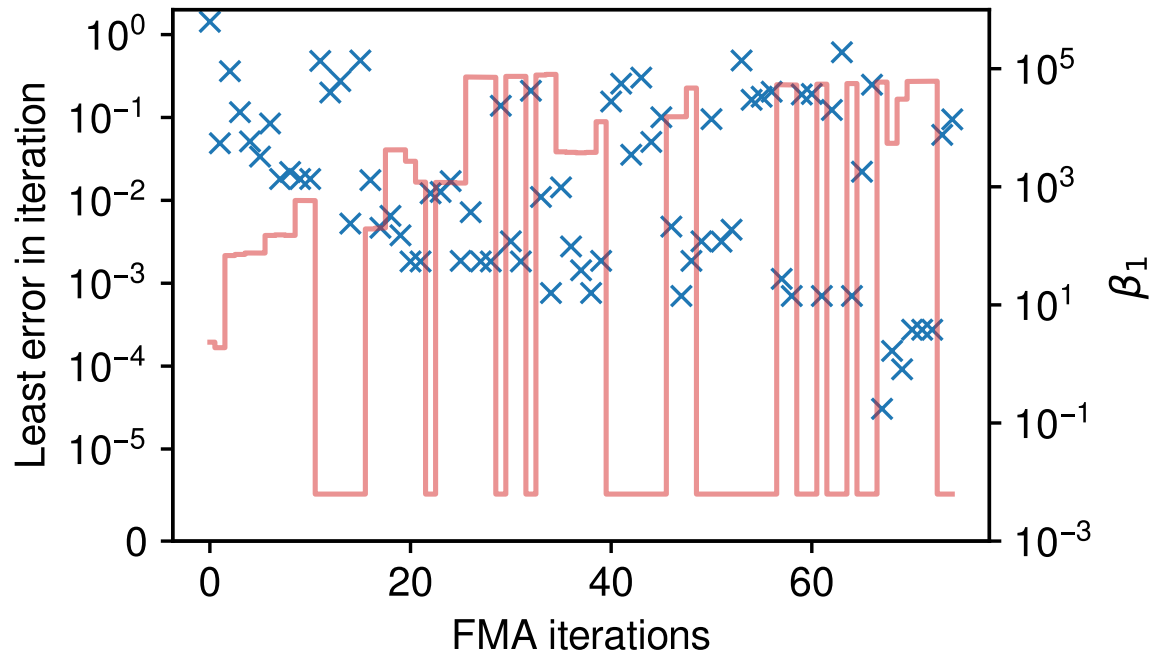


独立な試行を20回実行したときの、エネルギー誤差分布。  
横軸はユニーク比率  $r$  を表し、 $r=0$ は通常のFMAの結果に対応する。

- ✓ ユニーク比率が高くなるにつれて、エネルギー誤差が減少し、FMAの性能が向上している
- ✓ 通常のFMAでは、全サンプルを利用した学習をおこなっている
- ✓ 順応的スケジューリングが通常のFMAよりも高性能であることを示唆している



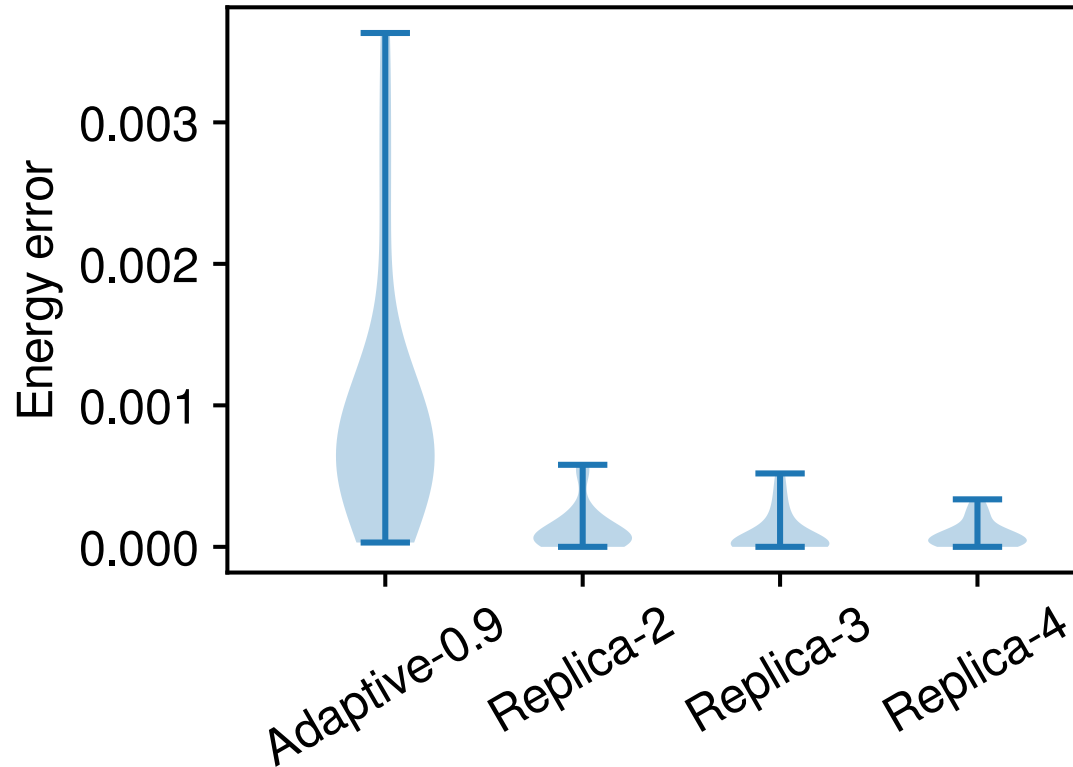
# 結果 | 順応的スケジューリング法



最終逆温度の反復ステップ依存性と反復ステップ中に得られた最善解.  
この図は $r=0.9$ の場合の結果を表す.

- ✓ ユニークラベル比率が減少したときに, 最終逆温度が減少する様子が見て取れる
- ✓ 最終逆温度が減少したときに高いエネルギーを持つサンプルが生成されている
- ✓ 最終逆温度が再び上昇した後により低いエネルギーのサンプルが生成されている

# 結果 | レプリカ交換法



サンプリングに利用するレプリカ数を2,3,4とした場合のエネルギー誤差

- ✓ レプリカ交換法のエネルギー誤差が順応的スケジューリング法の誤差よりも低い値になる
- ✓ サンプリングに利用するレプリカ数の依存性は順応的スケジューリング法との差と比べると小さい
- ✓ 順応的スケジューリングが低温と高温のサンプルを交互に生成するのに対し, レプリカ交換法は同時に生成している



**高温からのサンプルと低温からのサンプルを組み合わせることでFMAの性能向上が期待される**

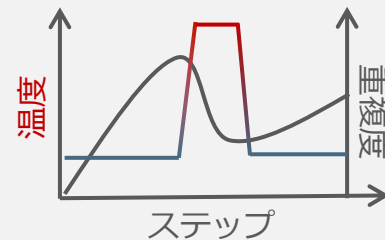
# 総括

- ✓ 機械学習手法とアニーリングを組合せたFMAは幅広い応用が可能な手法である。
- ✓ FMAによる最適化における高温サンプルの有効性を示唆する数値実験結果を得た。
- ✓ 高温からのサンプリングを利用した学習データセット生成の有効性が示された。

## 温度調整による追加サンプル生成法の提案

### 1. 順応的スケジューリング

学習サンプルの重複度が閾値を超えた時に温度を上昇



### 2. レプリカ交換法

複数温度帯から同時にサンプリングを実施

