

# イジングモデルに基づく機械学習に関する研究

情報科学研究科 博士後期課程1年 熊谷政仁

## 背景・目的

### 組合せ最適化問題を解くことに特化した計算手法の発展

- シミュレーテッドアニーリング (SA) や量子アニーリング (QA) による効率的な解の探索
- 磁性体の相互作用を表すイジングモデルで問題を表現する必要
- アプリケーションの研究開発が求められている

### イジングモデルに基づく機械学習

- 機械学習は、高度なAIを開発する上で必要不可欠
- 機械学習における入力値と予測値の差分で表される目的関数の最適化は組合せ最適化問題  
→ 機械学習にアニーリングアルゴリズムを導入

### イジングモデルの機械学習への応用を開拓

### 研究の目的：イジングモデルを活用した機械学習の実現

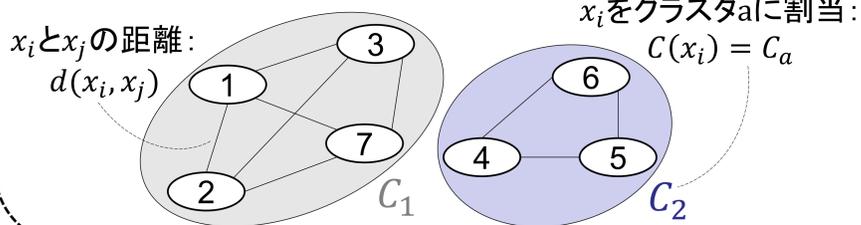
代表的な機械学習手法として、データの分類を行うクラスタリングに着目

## イジングモデルに基づくクラスタリングに関する取り組み

### クラスタリングの目的関数

$$H = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^K \sum_{C(i)=C_a} \sum_{C(j)=C_a} d(x_i, x_j) \quad \dots (1)$$

※  $N$ : データ数  
 $K$ : クラスタ数



### イジングモデルによるクラスタリングの表現 [1]

- スピンの向き (0/1) を示すバイナリ変数の導入

$$q_a^i = \begin{cases} 1 & (C(i) = C_a) \\ 0 & (C(i) \neq C_a) \end{cases}$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N d(x_i, x_j) \sum_{a=1}^K q_a^i q_a^j + \sum_{i=1}^N \lambda_i \left( \sum_{a=1}^K q_a^i - 1 \right)^2$$

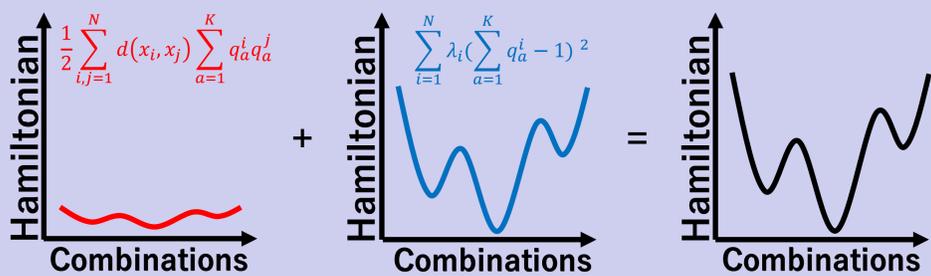
バイナリ変数でクラスタ割当を表現した目的関数

全てのデータがただ一つのクラスタに属する制約関数

### 課題：問題サイズが大きくなるとクラスタリング品質が低下

- イジングモデル中の係数に関する条件

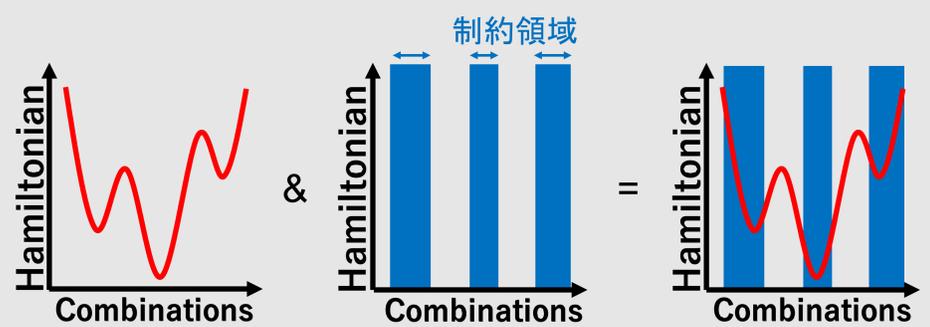
$$0 < d(x_i, x_j) < 1 \quad \lambda_i = (N - K)$$



- データ数  $N$  が大きいと係数  $d(x_i, x_j)$  の影響がほとんど現れない

### 提案：制約を外部で定義するクラスタリング手法

- 目的関数の最適化と独立して制約領域を設定



- データ数に関わらず、制約充足と目的関数の最適化が可能

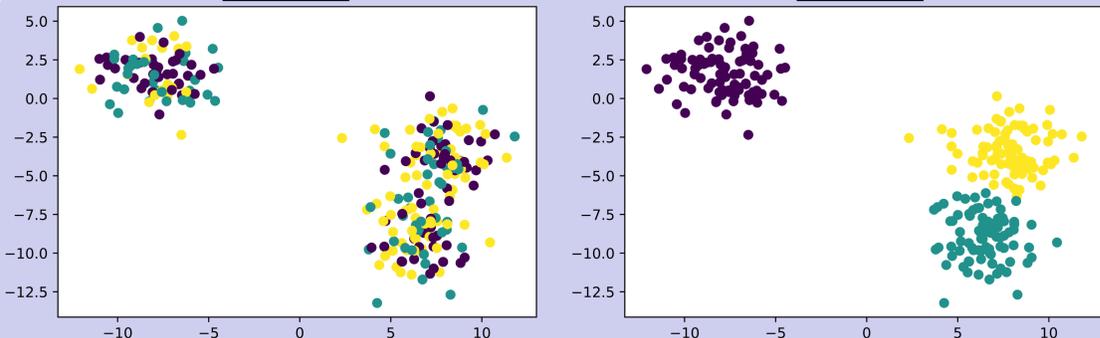
## 評価

ベクトル型システムSX-Aurora TSUBASA (CPU (Intel Xeon 6126)とVE (NEC Vector Engine Type 10B)で構成) を用いて、提案手法を従来手法と比較して評価：提案手法においては制約を外部で定義するSA [2], 従来手法においてはSAによる最適化を実行。

### ①クラスタリング結果 (K=3, N=256)

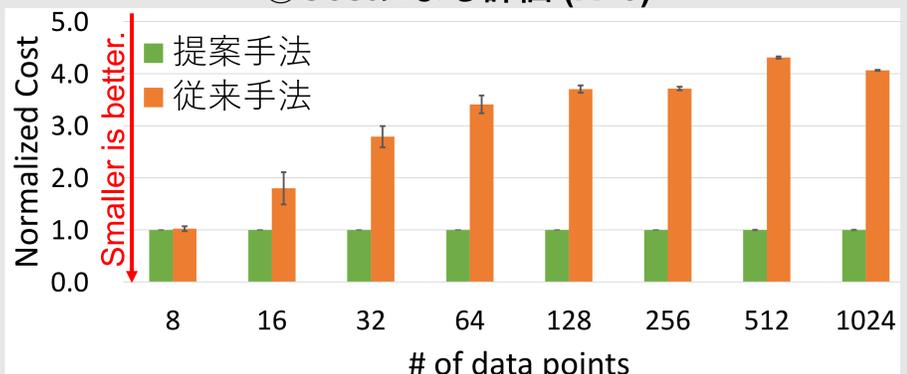
従来手法

提案手法



- 従来手法では、全てのデータがただ一つのクラスタに割り当てられる制約は満たしているが、クラスタリングには失敗
- 提案手法では、制約を満たしながら近いデータ点同士のグループ化に成功

### ②Costによる評価 (K=3)



- データ数が8の場合は、係数  $d(x_i, x_j)$  と  $\lambda_i$  の差が開きにくいいため、提案手法と従来手法は同程度の品質
- データ数が大きくなると提案手法と従来手法のCost差が開いていき、データ数512以上では4倍以上の差

## まとめ・今後の課題

- イジングモデルに基づくクラスタリングにおける品質低下の課題を、制約を目的関数と独立して定義することで解決
- 今後、得られた知見を他のイジングモデルに基づく機械学習手法にも適用していく

[1] Vaibhav Kumar, Gideon Bass, Casey Tomlin, and Joseph Dulny. Quantum annealing for combinatorial clustering. Quantum Information Processing, 17(2):39, 2018.

[2] Fumiyo Takano, Motoi Suzuki, Yuki Kobayashi, and Takuya Araki. QUBO solver for combinatorial optimization problems with constraints. Technical Report 4, NEC Corporation, nov 2019.