

Graduate School of Fundamental Science and Engineering
Waseda University

博士論文審査報告書
Doctoral Dissertation Review Report

論文題目
Dissertation Title

Driving Ising Machines

- From QUBO Visualization and Modeling to Hyperparameter Tuning -

イジングマシンの活用方法に関する研究

— QUBO可視化と定式化から
ハイパーパラメータのチューニングまで —

申請者
(Applicant Name)
Matthieu PARIZY
パリジ マチュール

Department of Computer Science and Communications Engineering Research on Information
System Design

February, 2023

Society5.0の根幹をなすサイバーフィジカルシステムには、多数の選択肢の中から最適なもの（最適解と呼ばれる）、あるいは最適に近いもの（準最適解と呼ばれる）を選択する問題が多数存在する。例えば、物流において多数の地点を巡回する経路を求める際に総経路長を最小化する問題や、創薬分野において最も有効性の高い構造を求める問題等である。これらの問題は、一般的に組合せ最適化問題と呼ばれる。組合せ最適化問題の中には、問題のサイズが大きくなると、最適解を得るために指数関数的に計算時間が増加する問題クラスが存在する。サイバーフィジカルシステムを効率よく構成するためには、計算量の観点で難しい問題クラスであっても、組合せ最適化問題を高速かつ最適に解くことが強く求められている。

組合せ最適化問題を効率よく解く計算機として、量子アニーリングマシンに代表されるイジングマシンが注目されている。近年、量子アニーリングマシンあるいは半導体や光を使ったイジングマシンハードウェアが国内外で発表され、一部は実用化も始まっている。イジングマシンは、内部にイジングモデルと呼ばれる統計力学上の数理モデルを持ち、イジングモデルの最小エネルギー状態（基底状態）を求めることで、等価的に組合せ最適化問題を解くものである。実際にイジングマシンによって組合せ最適化問題を解くためには、まず、組合せ最適化問題をイジングモデルで表現し、その後、イジングマシンでイジングモデルの基底状態を求める。最後に、得られた基底状態のイジングモデルから元の組合せ最適化問題の最適解（あるいは準最適解）を得る。イジングモデルは、数理的に等価な **QUBO**（**Quadratic Unconstrained Binary Optimization**）モデルに置き換えて表現される場合もある。一方、イジングマシンハードウェアは、現在、発展途上のものであり、組合せ最適化問題を単純にイジングモデルあるいは **QUBO** モデルで表現しても、必ずしも常にその基底状態を発見できるわけではない。イジングマシンでイジングモデルあるいは **QUBO** モデルの基底状態を効率よく求めるためには、イジングモデルや **QUBO** モデルのエネルギー地形を解析し局所最適解から脱出する手法の構築、組合せ最適化問題に含まれる整数値をイジングモデルや **QUBO** モデルで効率よく表現する手法の構築、そしてイジングマシンが持つさまざまなハイパーパラメータの最適化手法の構築が不可欠となる。

以上の背景のもと、本論文では、イジングマシンによって組合せ最適化問題を効率よく解くために、**QUBO** モデルのエネルギー地形の可視化と局所最適解の脱出手法、**QUBO** モデルの表現に必要な変数の数を大きく増加させることなく、またイジングマシンによる解探索が容易となるような整数の表現手法、さらに実際のイジングマシンを例に、イジングマシンが持つさまざまなハイパーパラメータを最適化する手法に焦点を当て、これらについて論じている。

本論文は、以下の 5 章より構成される。

第 1 章では、本論文の背景と目的および概要をまとめている。

第 2 章では、2 次元ナップザック問題を取り上げ、これを QUBO モデルで表現した上で、そのエネルギー地形の可視化と局所最適解からの脱出方法に関して論じている。2 次元ナップザック問題とは、ナップザックに品物を挿入し、挿入された品物の価値の最大化を目的とする。挿入される品物の合計重量を制約以下にし、さらに価値計算に 2 次項を許容する 2 次元ナップザック問題は、不等式制約を持ち、これを QUBO モデルで表現すると、エネルギー地形が多く局所最適解を持つ。そこで本論文では、2 次元ナップザック問題の QUBO モデルにおいて、局所最適解近傍のエネルギー地形を可視化し、その上でナップザックに挿入済みの品物と未挿入の品物を交換することにより、効率よく局所最適解から脱出する手法を提案している。実際に、実イジングマシンで評価した結果、提案した局所最適解脱出手法を適用することで、多くの 2 次元ナップザック問題インスタンスにて最適解や準最適解を得ることに成功している。また古典的なシミュレーテッドアニーリング手法と比較し、実行時間・解の最適性の両面において、イジングマシンと提案した局所最適解脱出手法の組合せ手法の優位性を確認している。

第 3 章では、ポートフォリオ最適化問題を取り上げ、これを QUBO モデルで表現した上で、イジングマシンで効率的に求解する方法を論じている。ポートフォリオ最適化問題では、整数値を含む定式化が必要となり、整数値を QUBO モデルで表現することが不可欠となる。整数値を QUBO モデルで表現する方法、すなわち整数エンコード手法には、バイナリ表現やユナリー表現などがあるが、必要となる変数数とイジングモデルによる求解の両面でどれも一長一短がある。そこで本論文では、10 進数表現と 1-hot 符号化と呼ばれる手法を組み合わせることでこの問題を解決し、変数の数を小さく抑えた上で、イジングマシンで効率的に解くための表現を提案している。実際に、実イジングマシンで評価した結果、従来の整数エンコード手法と比較して、提案する整数エンコード手法は、解の最適性において優位性を持つことが示されている。

第 4 章では、実イジングマシンが持つ多数のハイパーパラメータの最適化手法を提案している。従来、イジングマシンハイパーパラメータの最適化は、利用者の経験に基づき設定される場合が多かったが、本論文では、ベイズ最適化手法に基づく新たなイジングマシンハイパーパラメータ最適化手法を提案し、複数の組合せ最適化問題によってその優位性を確認している。

第 5 章では、本論文全体を総括している。

以上が本論文の概要であるが、本論文では、イジングマシンの活用方法に関して、エネルギー地形の可視化、局所最適解の脱出、整数値表現、ハイパーパラメータ最適化の観点から理論的・実験的な評価を行っている。これらの成果は、高度情報通信社会に不可欠となるイジングマシン計算技術の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士（工学）早稲田大学の学位論文として価値あるものと認める。

2023 年 2 月

審査員 主査 早稲田大学教授 博士(工学)早稲田大学 戸川 望

早稲田大学教授 博士(工学)早稲田大学 木村啓二

早稲田大学教授 工学博士(京都大学) 木村晋二
