

# 量子アニーリングを用いた クラスタ分析

田中 宗 (早稲田大学 高等研究所)



機械学習における重要な技術であるクラスタ分析に対する、量子アニーリングの性能評価を行った。

量子モンテカルロ法を用いた擬似シミュレーションの結果、シミュレーテッドアニーリングに比べ、**量子アニーリングの方が、性能面で優位であることを示唆する結果を得た。**

本講演では、量子アニーリングの基礎について述べた後、我々の研究結果について紹介する。

K. Kurihara, S. Tanaka, and S. Miyashita, UAI2009

I. Sato, K. Kurihara, S. Tanaka, H. Nakagawa, and S. Miyashita, UAI2009

I. Sato, S. Tanaka, K. Kurihara, S. Miyashita, and H. Nakagawa, *Neurocomputing*, 121, 523 (2013)

# 共同研究者

佐藤 一誠 博士 (東大 情報基盤センター、さきがけ研究員)



栗原 賢一 博士 (グーグル株式会社)



宮下 精二 教授 (東大院理 物理学専攻)



中川 裕志 教授 (東大 情報基盤センター)



# 2つのキーワード

量子アニーリング

量子性を用いた  
新計算技術

クラスタ分析

分かることは  
分けること

# 講演の流れ

## 量子アニーリングの基礎

- 物理学と情報科学
- 量子アニーリングの性能に関する先行研究
- 量子アニーリングマシン D-Wave の性質

## 量子アニーリングを用いたクラスタ分析

- クラスタ分析のモデリング
- 量子アニーリングの導入方法
- 量子アニーリングの優位性

多数の要素の協同効果を表現する、最も簡単な統計力学模型

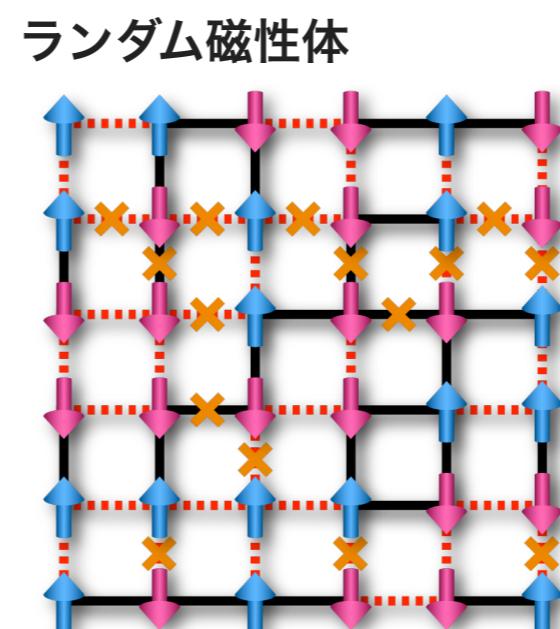
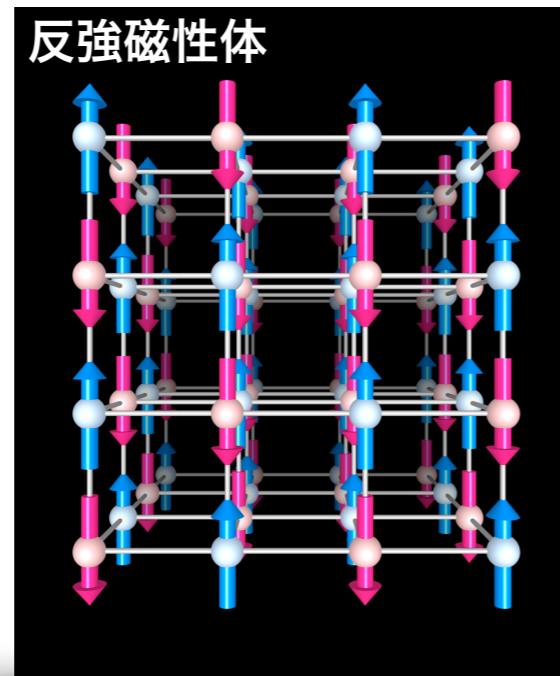
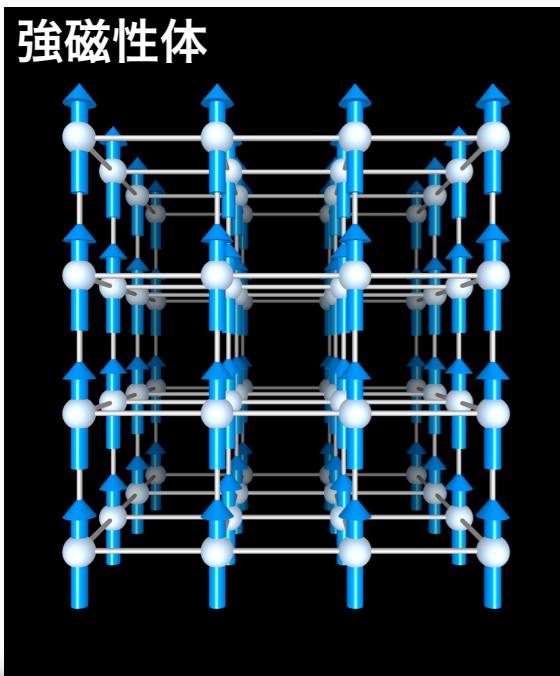
$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

$\sigma_i^z = \pm 1$  

スピン間の相互作用      スpinに働く磁場

$J_{ij} > 0$  : 強磁性的相互作用

$J_{ij} < 0$  : 反強磁性的相互作用



一般に、  
基底状態を  
求めることは難しい

# 物理学と情報科学 組合せ最適化問題

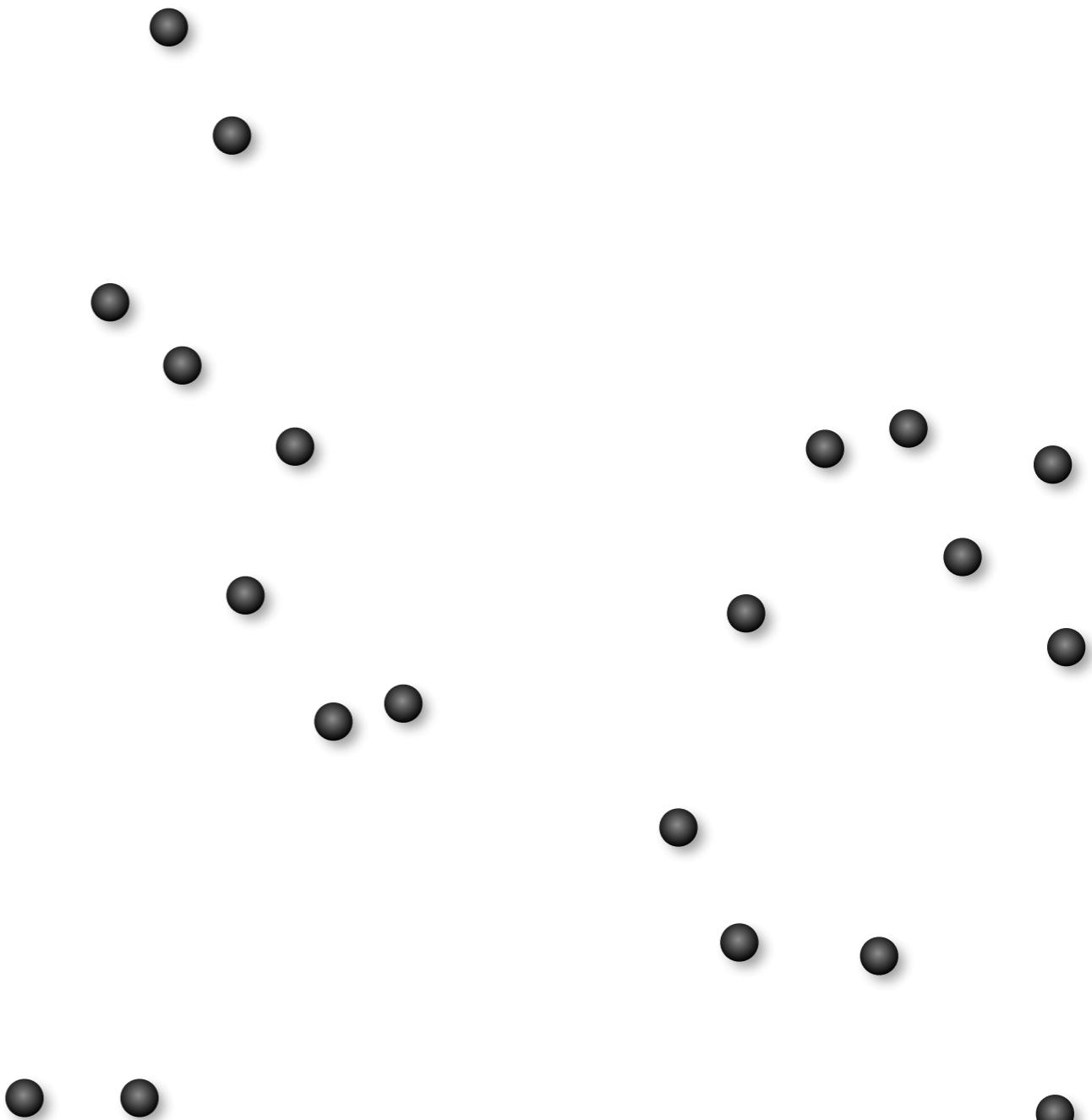
---

多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

### 巡回セールスマン問題

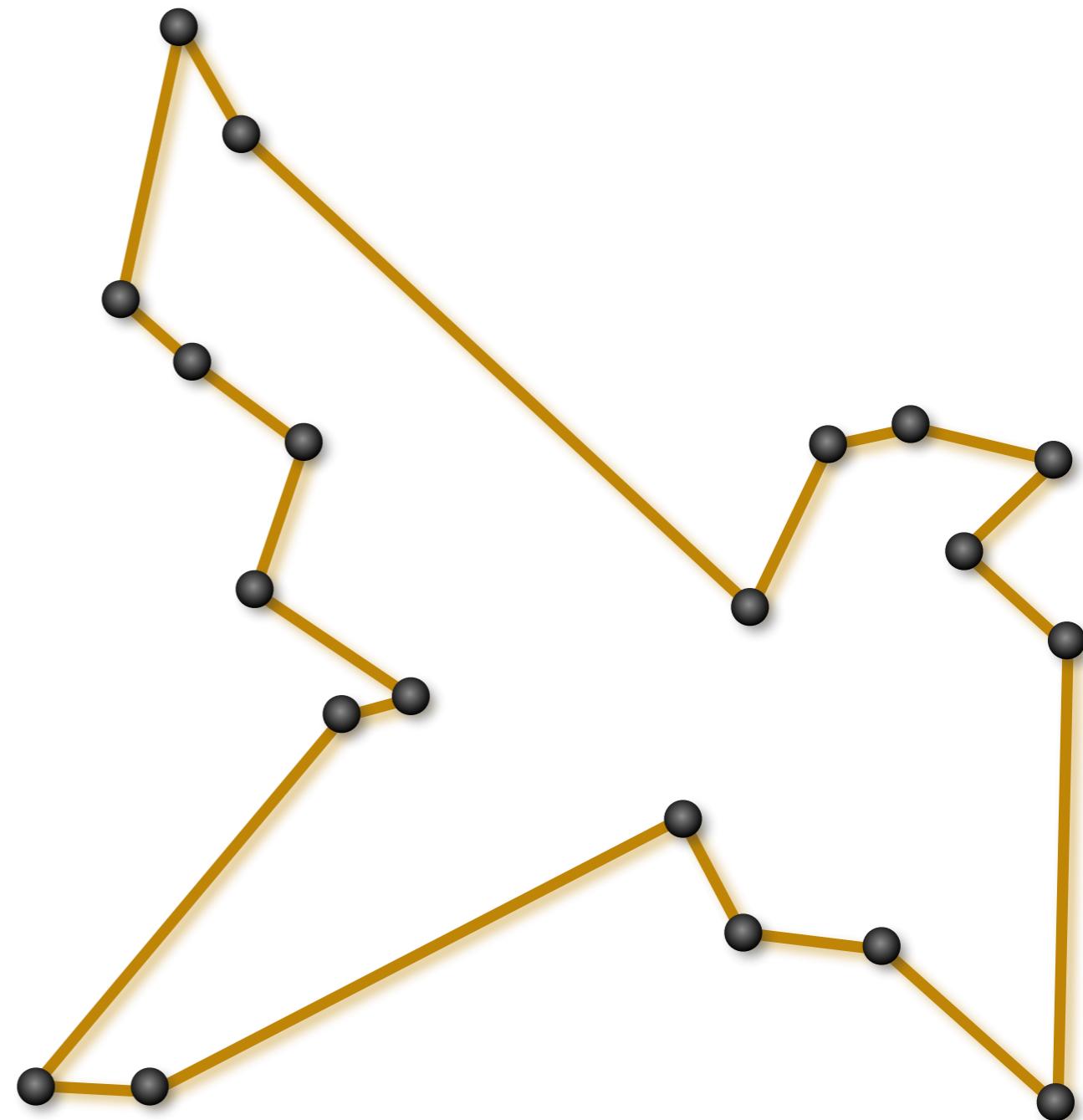
- ✓ 各点を一度だけ通過
- ✓ 全ての点を回る
- ✓ **コストを最小**にする条件



## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

### 巡回セールスマン問題

- ✓ 各点を一度だけ通過
- ✓ 全ての点を回る
- ✓ **コストを最小**にする条件



## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

### 巡回セールスマン問題

- ✓ 各点を一度だけ通過
- ✓ 全ての点を回る
- ✓ **コストを最小**にする条件

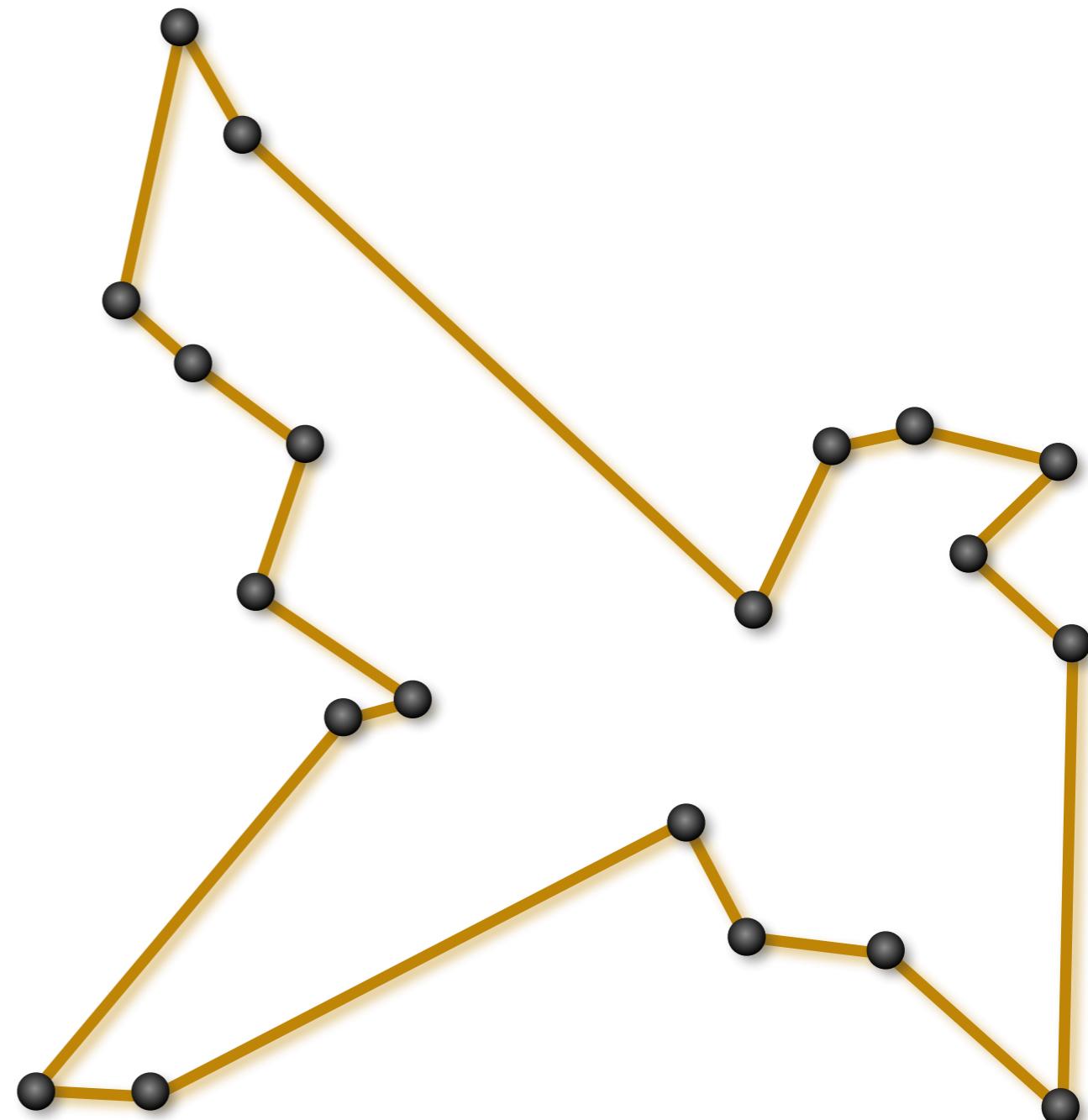
### 全ての選択肢を試した場合

点が少ない：簡単

点が多い：困難

選択肢の数： $N!$

(10点:  $10^6$ 通り、 20点:  $10^{18}$ 通り)



## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

多変数実関数の**最小値(最大値)**を取る条件を求める問題

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$$

解の候補

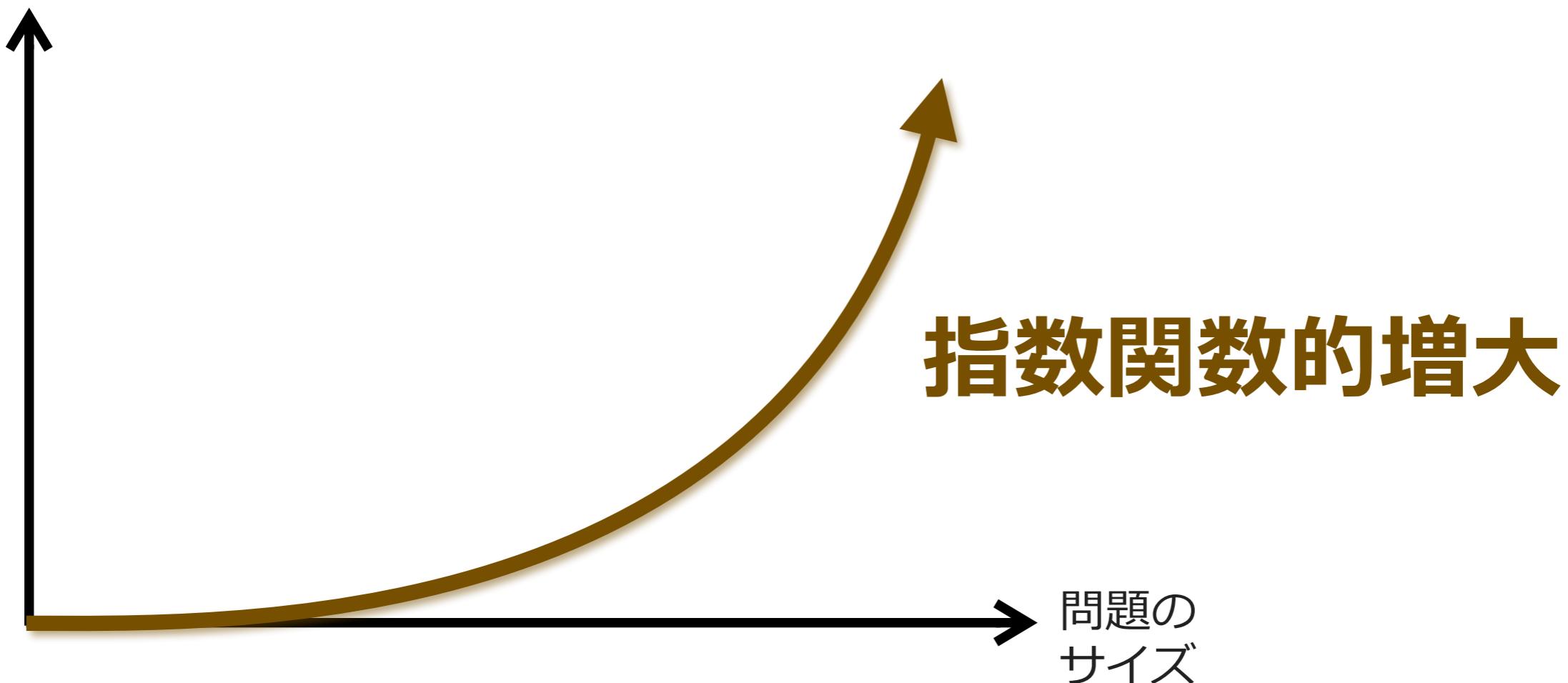


## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

多変数実関数の**最小値(最大値)**を取る条件を求める問題

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$$

解の候補



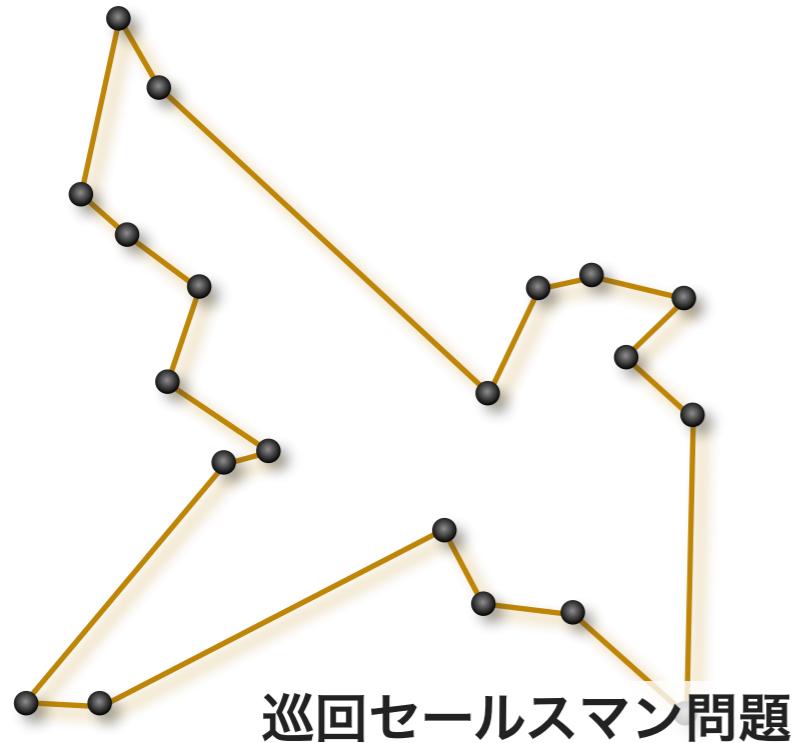
## 多数の選択肢から、ベストな解を選ぶ問題

多変数実関数の**最小値(最大値)**を取る条件を求める問題

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$$

都市数	巡回経路数	計算時間(京を利用として)
5	12	$10^{-15}$ 秒
10	$2 \times 10^5$	$2 \times 10^{-11}$ 秒
15	$4 \times 10^8$	$4 \times 10^{-8}$ 秒
20	$6 \times 10^{16}$	6秒
25	$3 \times 10^{23}$	359日
30	$4 \times 10^{30}$	1401万年

組合せ最適化問題の最適解 = イジングモデルの基底状態



巡回セールスマン問題

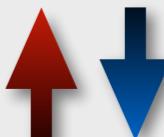
- 📌 高分子安定構造決定
- 📌 グラフ二分割問題
- 📌 集積回路設計

## イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間  
相互作用 磁場(強制力)

$$\sigma_i^z = \pm 1$$



- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

## 様々な分野に、応用展開可能

## 自然現象から着想を得た計算技術

### 温める

物質を構成する原子が、自在に動き回る。  
熱による「ゆらぎ」現象

### 冷やす(アニーリング)

物質を構成する原子が、最適な位置に  
自然に落ち着く。  
安定状態が自然に作られる(自己組織化)。

### シミュレーテッド アニーリング

通常のコンピュータを用いて実装可能な  
汎用アルゴリズム

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

絶対ゼロ度(基底状態)



温度  
(熱ゆらぎ効果)

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

絶対ゼロ度(基底状態)



シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

温度  
(熱ゆらぎ効果)

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

絶対ゼロ度(基底状態)



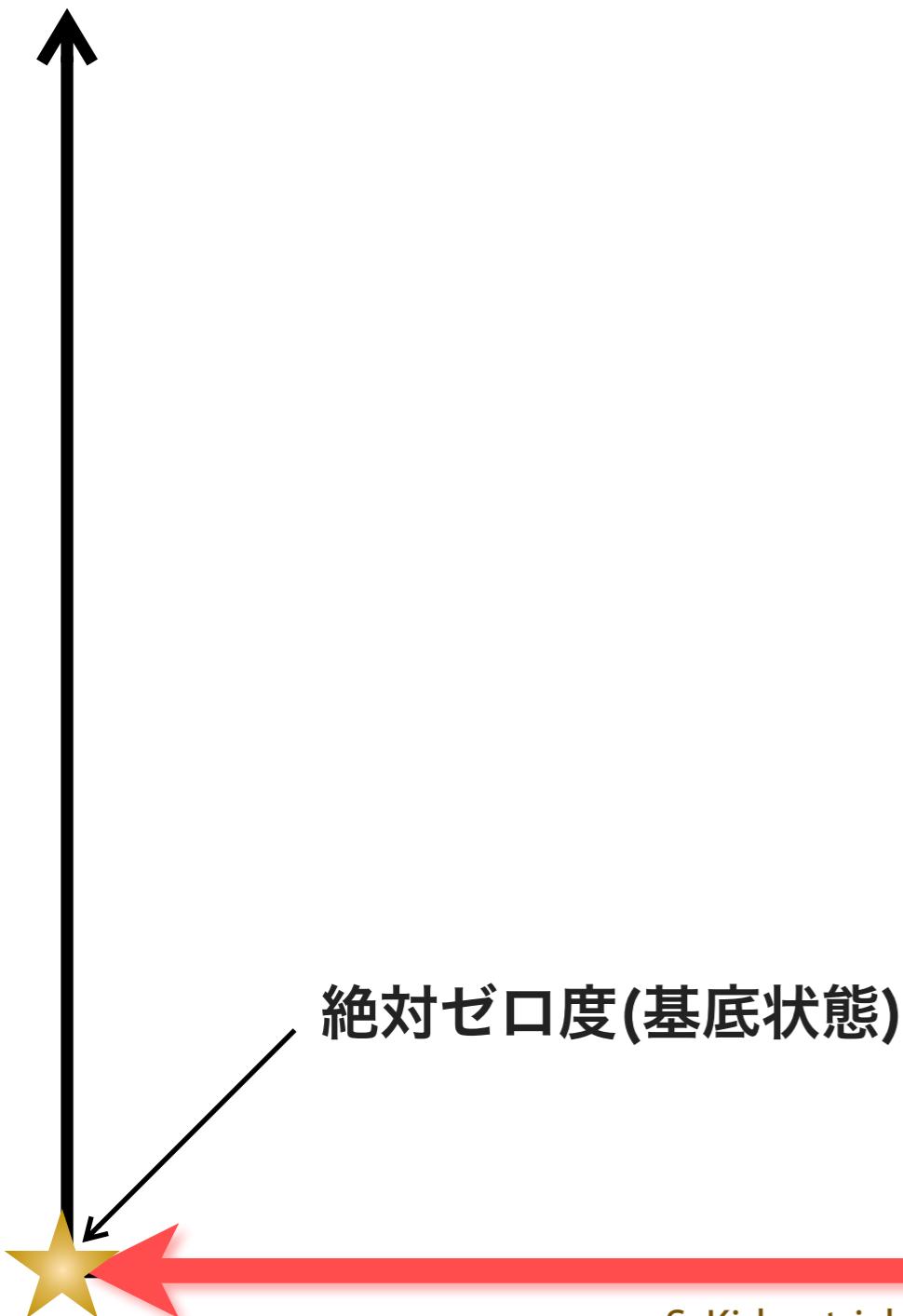
シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

温度  
(熱ゆらぎ効果)

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

量子ゆらぎ効果



### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間  
相互作用 磁場(強制力)

$$\sigma_i^z = \pm 1$$


- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

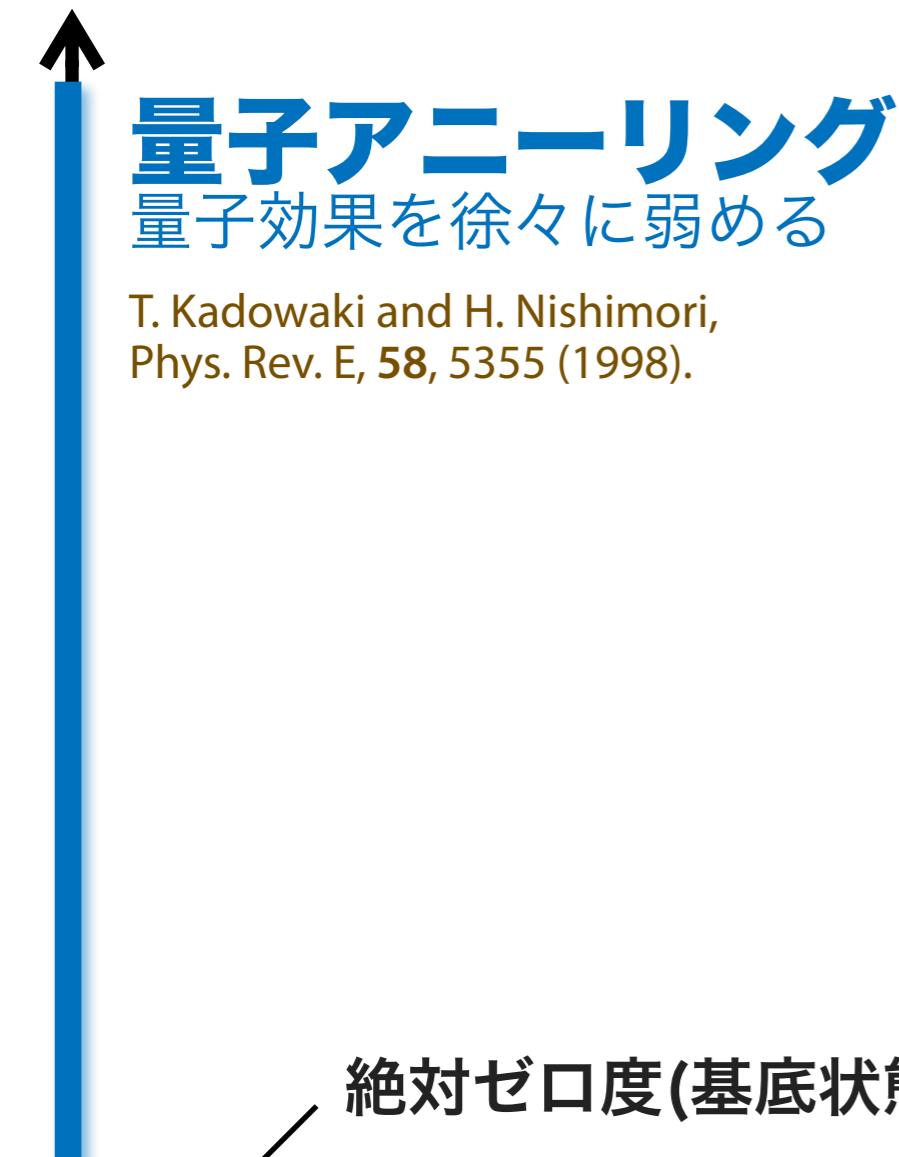
シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

温度  
(熱ゆらぎ効果)

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

量子ゆらぎ効果



### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1$$


- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

温度  
(熱ゆらぎ効果)

## ハミルトニアンを行列を使って表現する

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad \sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

## ハミルトニアンを行列を使って表現する

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad \sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

↓ パウリ行列による表現

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z \quad \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

## ハミルトニアンを行列を使って表現する

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad \sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

↓ パウリ行列による表現

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z \quad \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

↑  
2<sup>N</sup>×2<sup>N</sup>の対角行列

## ハミルトニアンを行列を使って表現する

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad \sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

↓ パウリ行列による表現

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z \quad \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

↑

$$2^N \times 2^N \text{の対角行列}$$

$$\hat{\sigma}_i^z |\uparrow\rangle = + |\uparrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^z |\downarrow\rangle = - |\downarrow\rangle$$

## ハミルトニアンを行列を使って表現する

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad \sigma_i^z = \pm 1 \quad \uparrow \downarrow$$

↓ パウリ行列による表現

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z \quad \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\hat{\sigma}_i^z |\uparrow\rangle = +|\uparrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$

↑  
2<sup>N</sup>×2<sup>N</sup>の対角行列

$$\hat{\sigma}_i^z |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +|\uparrow\rangle$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピノ反転(ビット反転)  
量子力学的遷移

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピン反転(ビット反転)  
量子力学的遷移

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

$\hat{\sigma}_i^x$  の固有状態

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

## 重ねあわせ状態の実現

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピノ反転(ビット反転)  
量子力学的遷移

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピノ反転(ビット反転)  
量子力学的遷移

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

$\mathcal{H}_q$ の基底状態 :  $|\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

**スピノ反転(ビット反転)  
量子力学的遷移**

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

$\mathcal{H}_q$ の基底状態 :  $|\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle$

2スピノの場合 :  $|\rightarrow\rightarrow\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$

## 量子揺らぎ効果(非対角項)の導入

$$\mathcal{H}_q = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピン反転(ビット反転)  
量子力学的遷移

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad \hat{\sigma}_i^x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

$$\hat{\sigma}_i^x |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$$

$\mathcal{H}_q$ の基底状態 :  $|\rightarrow\rightarrow\dots\rightarrow\rangle$

2スピノの場合 :  $|\rightarrow\rightarrow\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$

## 重ねあわせ状態の実現

## 量子アニーリングを実行するためのハミルトニアン

組合せ最適化問題のハミルトニアン ( $2^N \times 2^N$  の対角行列)

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - \sum_i h_i \hat{\sigma}_i^z \quad \hat{\sigma}_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

量子揺らぎのハミルトニアン ( $2^N \times 2^N$  の非対角行列)

$$\mathcal{H}_{\text{q}} = - \sum_i \hat{\sigma}_i^x \quad \hat{\sigma}_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

スピントラップ(ビット反転)  
量子力学的遷移

## 量子アニーリングを表現する時間依存ハミルトニアン

$$\mathcal{H}(t) = A(t)\mathcal{H}_{\text{opt.}} + B(t)\mathcal{H}_q$$

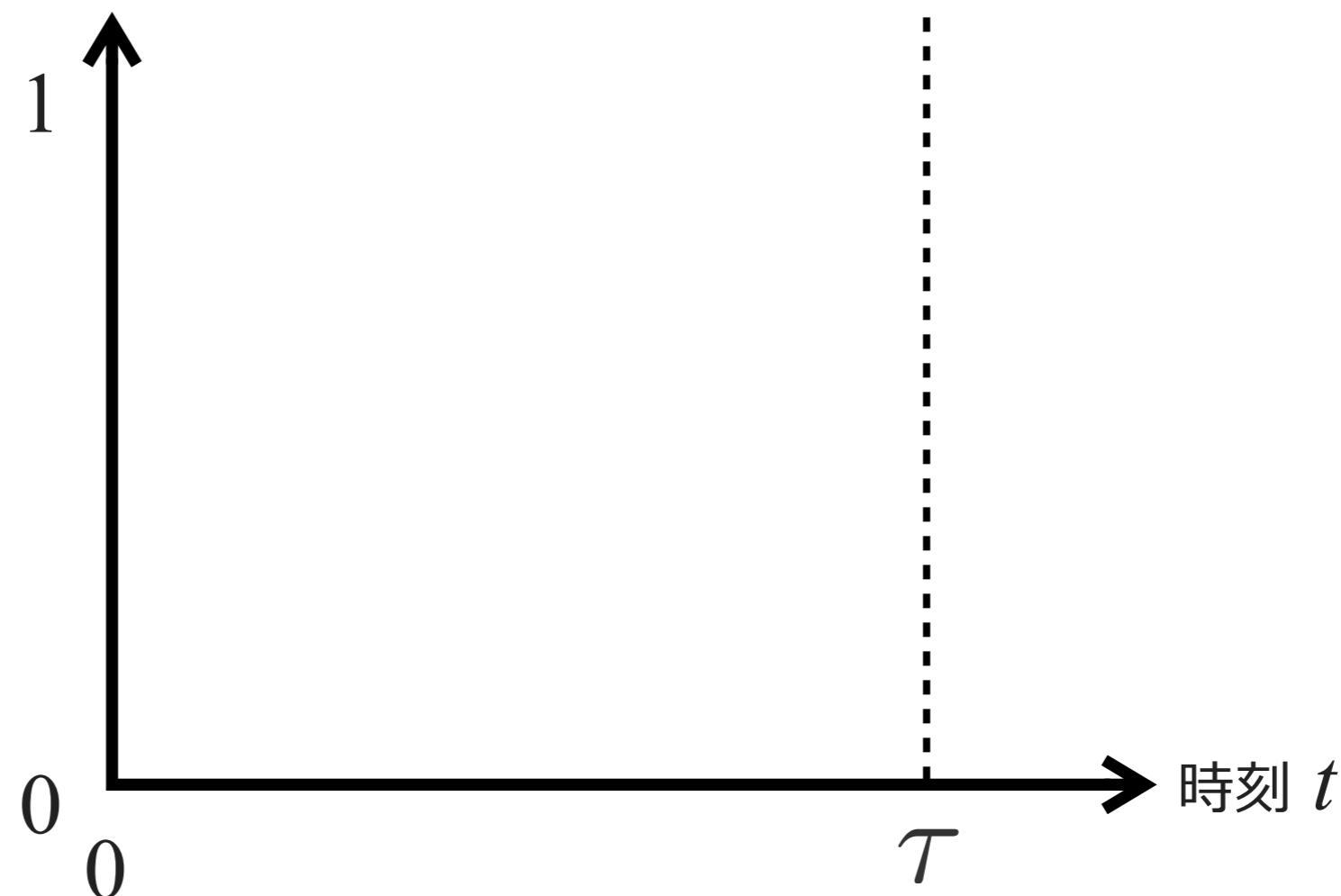
↑                              ↑  
組合せ最適化問題          量子揺らぎ

## 量子アニーリングを表現する時間依存ハミルトニアン

$$\mathcal{H}(t) = A(t)\mathcal{H}_{\text{opt.}} + B(t)\mathcal{H}_q$$

↑  
組合せ最適化問題

↑  
量子揺らぎ

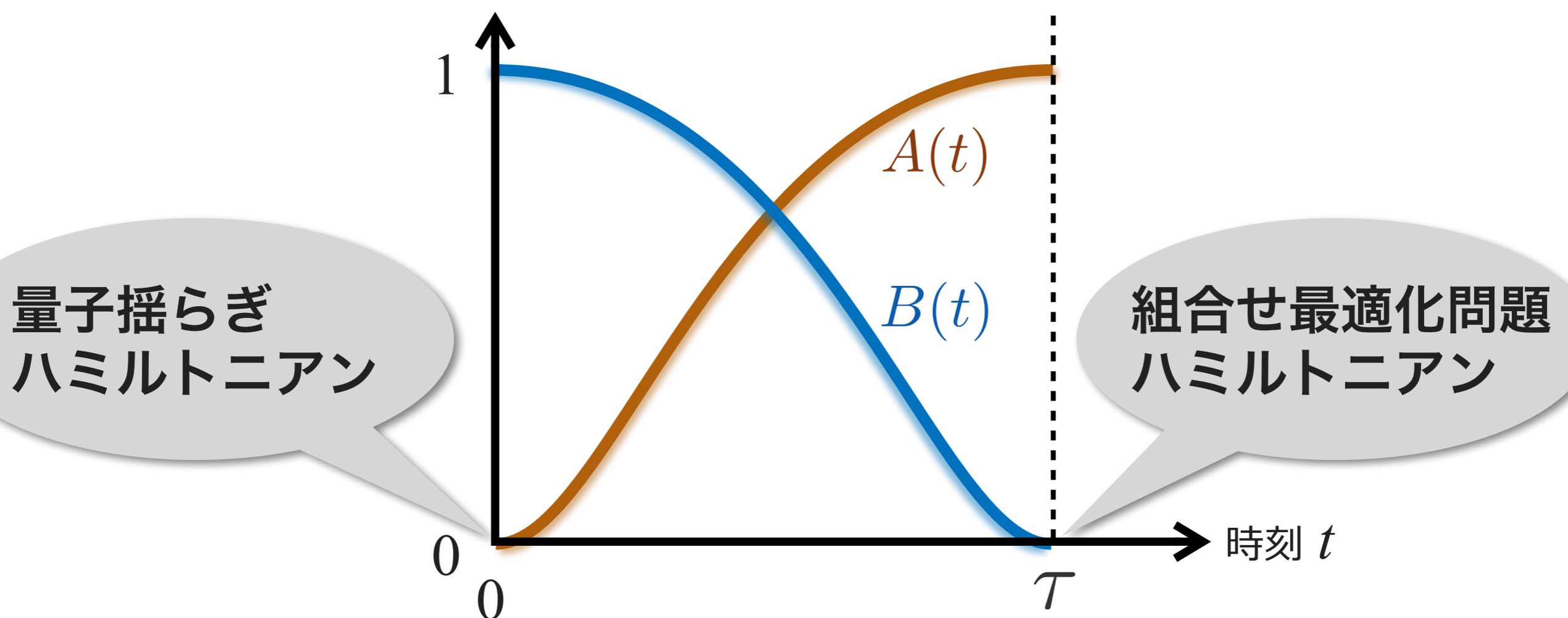


## 量子アニーリングを表現する時間依存ハミルトニアン

$$\mathcal{H}(t) = A(t)\mathcal{H}_{\text{opt.}} + B(t)\mathcal{H}_q$$

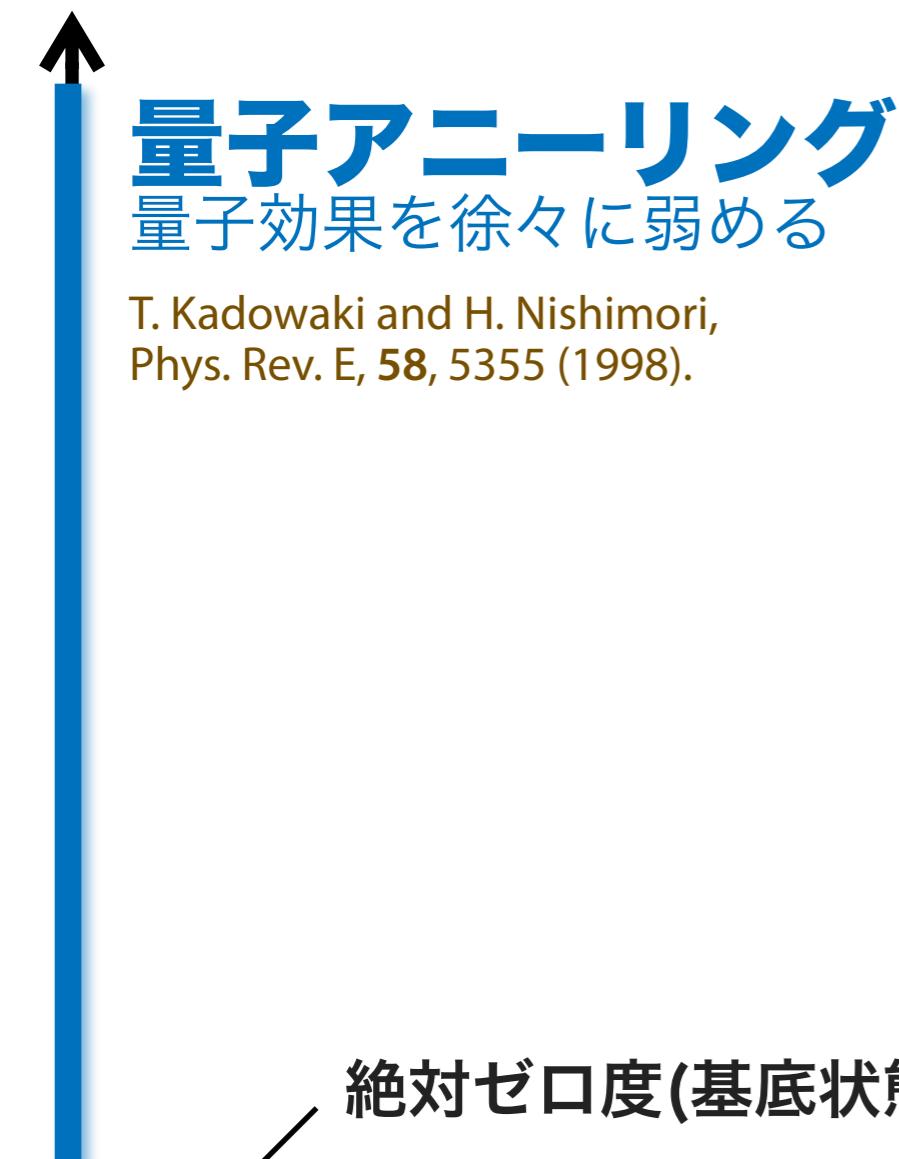
組合せ最適化問題

量子搖らぎ



## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

量子ゆらぎ効果



### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1$$


- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

温度  
(熱ゆらぎ効果)

# 量子アニーリングの性能 収束定理

---

非常にゆっくりパラメータを変えれば、  
**確実**に基底状態に到達する

S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. Vol. 6, 721 (1984)  
S. Morita and H. Nishimori, J. Math. Phys. Vol. 49, 125210 (2008)

# 量子アニーリングの性能 収束定理

非常にゆっくりパラメータを変えれば、  
**確実**に基底状態に到達する

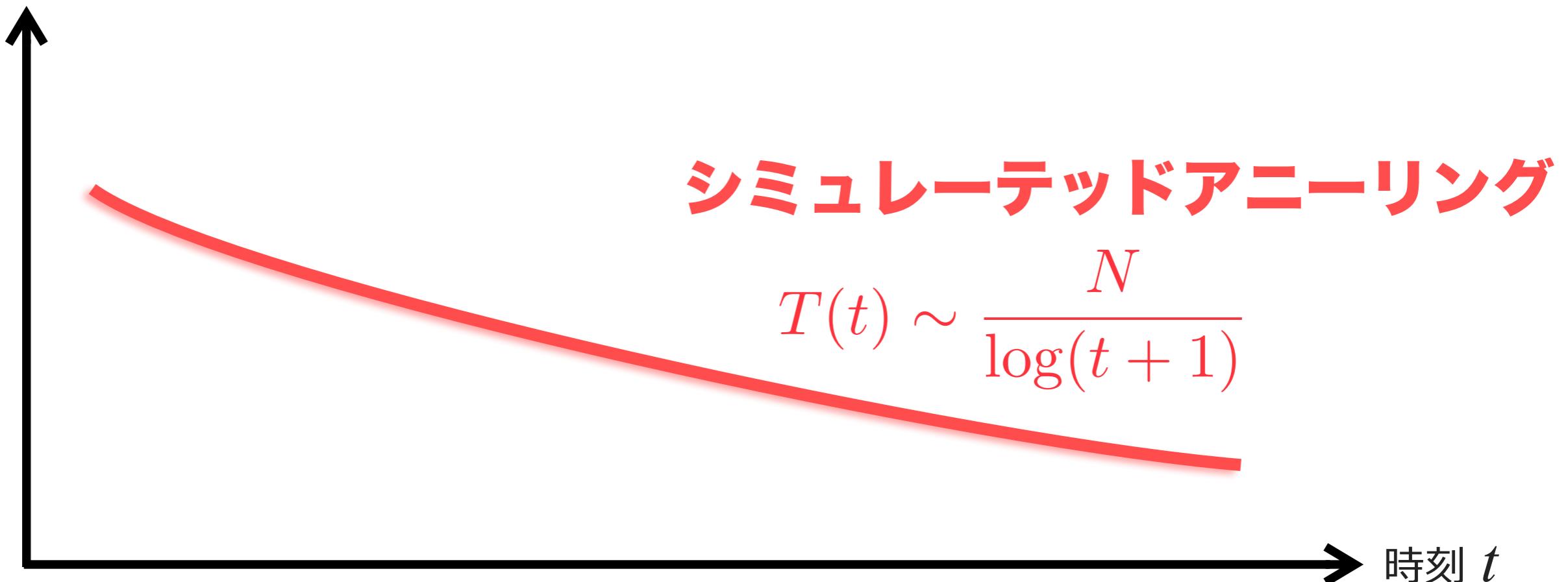
温度、量子揺らぎ



S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. Vol. 6, 721 (1984)  
S. Morita and H. Nishimori, J. Math. Phys. Vol. 49, 125210 (2008)

非常にゆっくりパラメータを変えれば、  
**確実**に基底状態に到達する

温度、量子揺らぎ

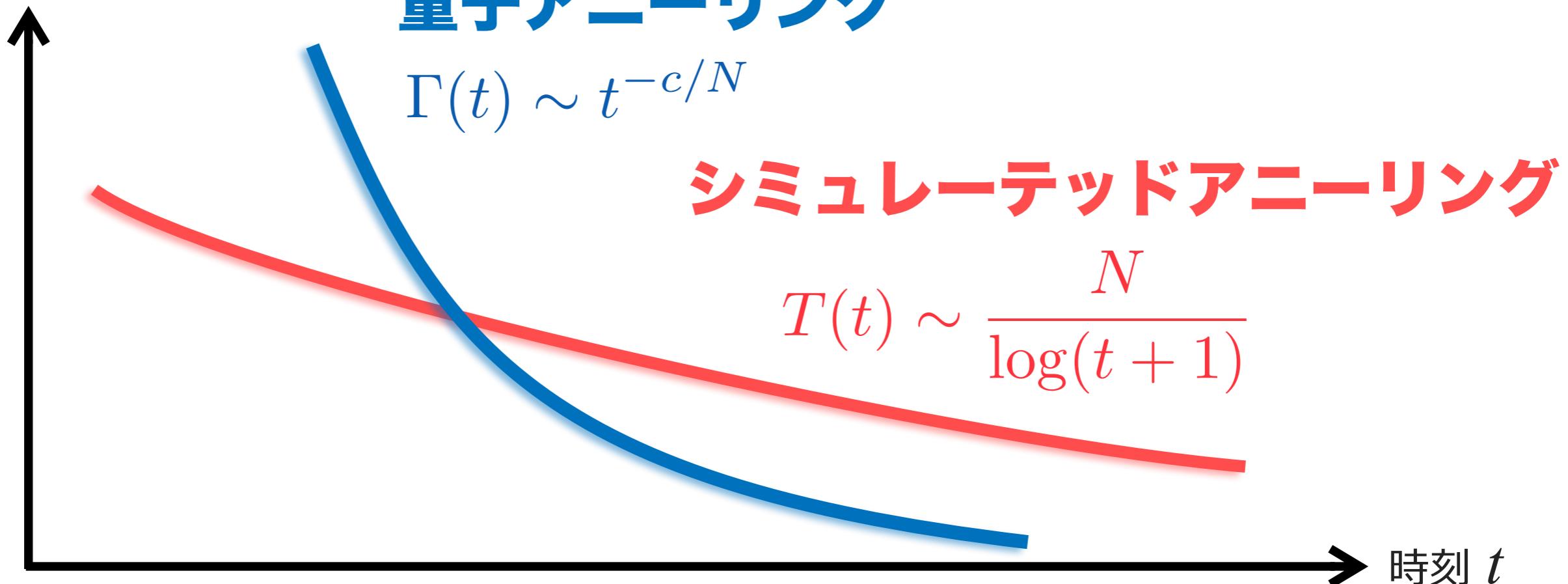


S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. Vol. 6, 721 (1984)  
S. Morita and H. Nishimori, J. Math. Phys. Vol. 49, 125210 (2008)

# 量子アニーリングの性能 収束定理

非常にゆっくりパラメータを変えれば、  
確実に基底状態に到達する

温度、量子揺らぎ



## 数学的に確実性が保証された計算技術

S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. Vol. 6, 721 (1984)  
S. Morita and H. Nishimori, J. Math. Phys. Vol. 49, 125210 (2008)

**先行研究の項目に関して、著作権の観点から  
発表時に用いたスライドを削除しました。**

ご興味のある方は、個別にご連絡ください。

# 講演の流れ

## 量子アニーリングの基礎

- 物理学と情報科学
- 量子アニーリングの性能に関する先行研究
- 量子アニーリングマシン D-Wave の性質

## 量子アニーリングを用いたクラスタ分析

- クラスタ分析のモデリング
- 量子アニーリングの導入方法
- 量子アニーリングの優位性

# 2つのキーワード

量子アニーリング

量子性を用いた  
新計算技術

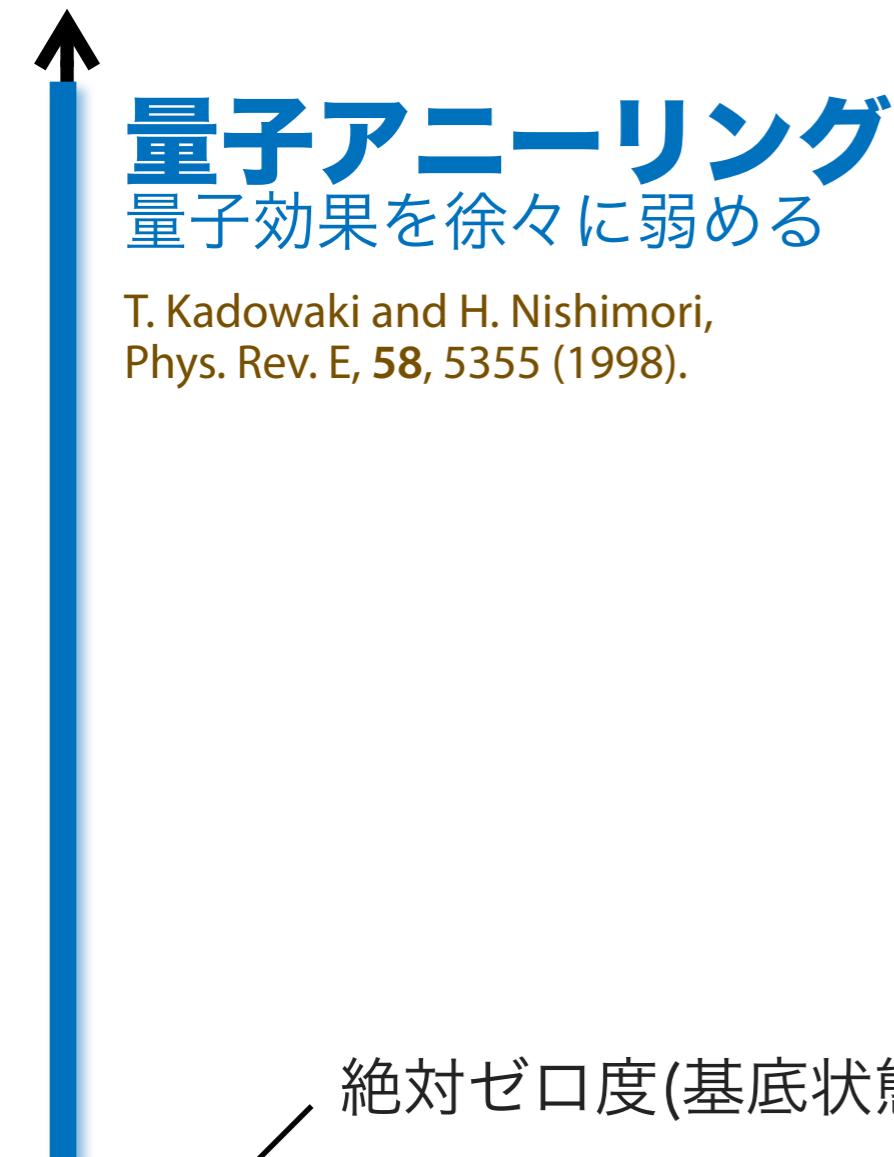
クラスタ分析

分かることは  
分けること

# 2つのキーワード 量子アニーリング

## イジングモデルの基底状態を効率よく求める方法

量子ゆらぎ効果



### イジングモデル

$$\mathcal{H}_{\text{opt.}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z$$

スピン(ビット)間 磁場(強制力)  
相互作用

$$\sigma_i^z = \pm 1$$


- ✓ 組合せ最適化問題のハミルトニアン
- ✓ 基底状態を求めるることは困難(組合せ爆発)

### シミュレーテッドアニーリング

温度を徐々に下げる

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

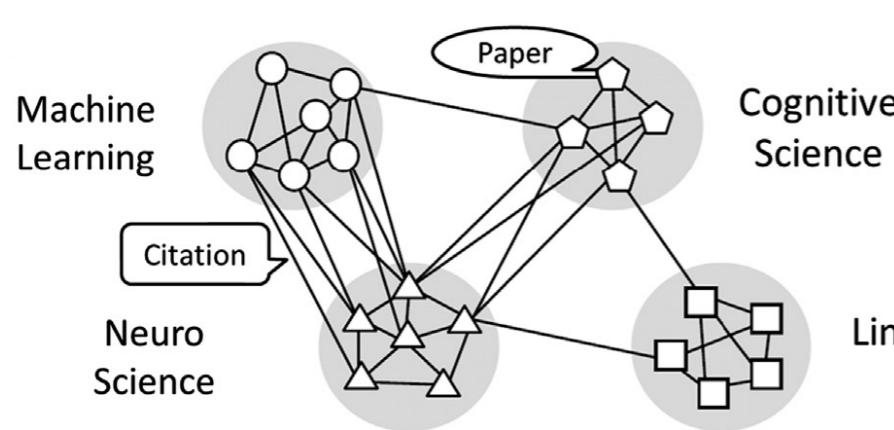
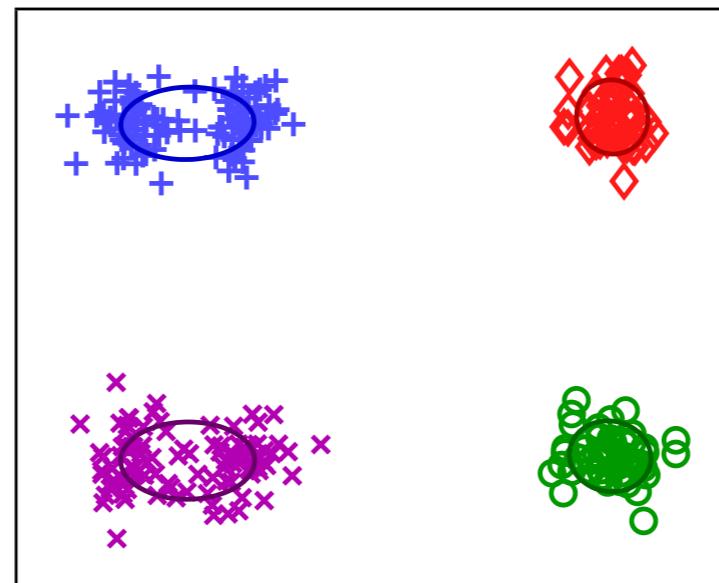
温度  
(熱ゆらぎ効果)

D-Wave Systems Inc. webサイトより図を抜粋

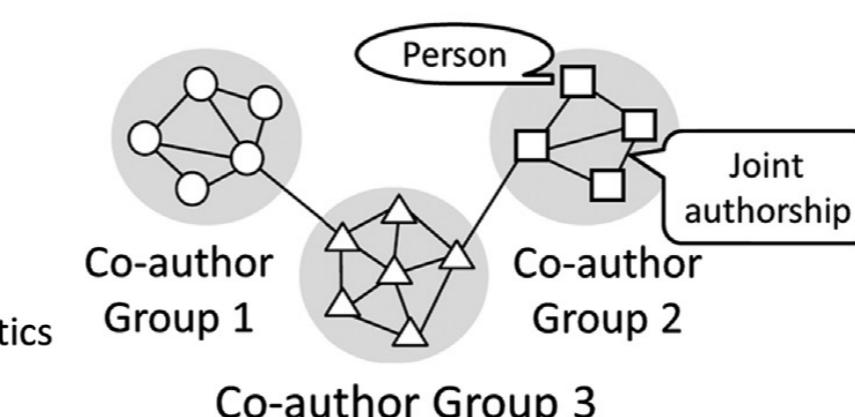
田中 宗 (早稲田大学 高等研究所) 22

# 2つのキーワード クラスタ分析

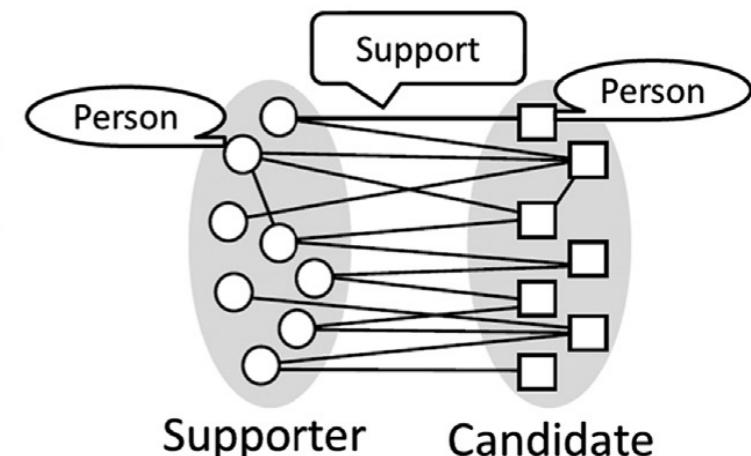
膨大なデータを、潜在的意味によって分類



研究論文分類



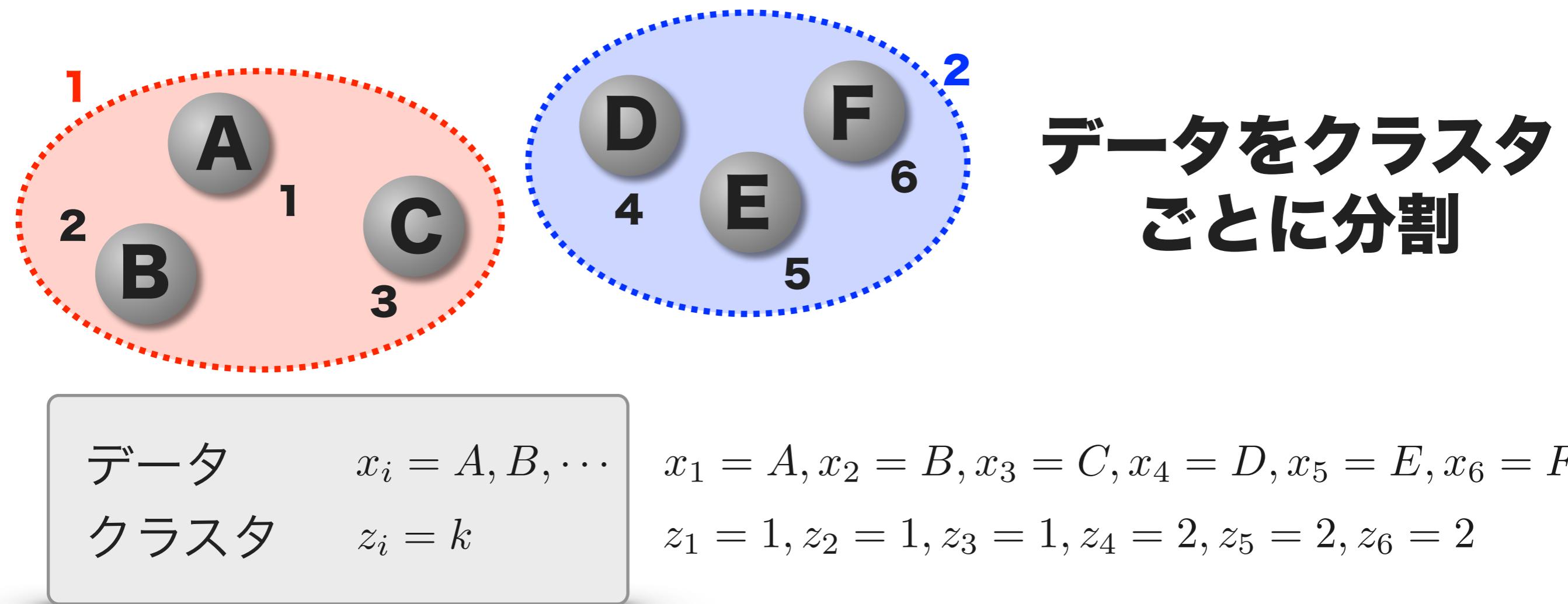
共著者ネットワーク分類



投票者・非投票者分類

## 分かることは分けること

# クラスタ分析のモデリング

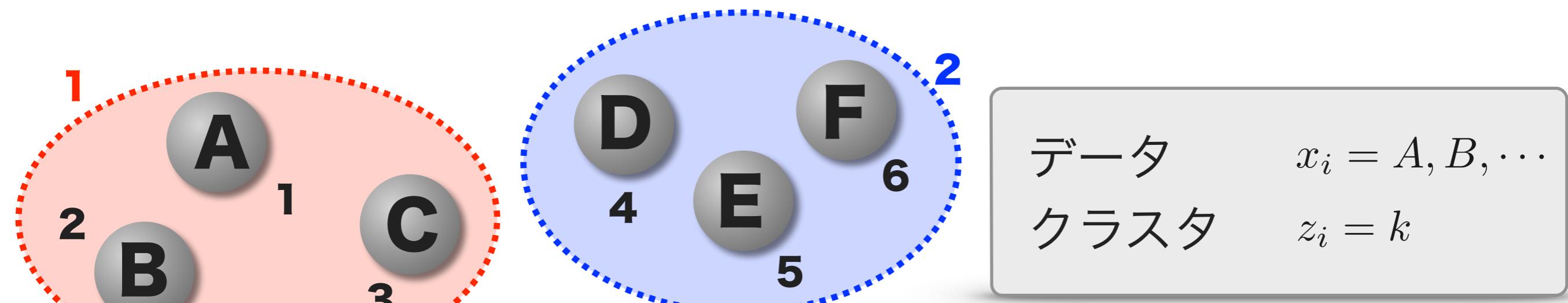


## クラスタ分析

$P(\{z_i\}|\{x_i\}, \alpha)$  を最大にする  $\{z_i\}$  を求める。

ハイパーパラメータ

# クラスタ分析のモデリング



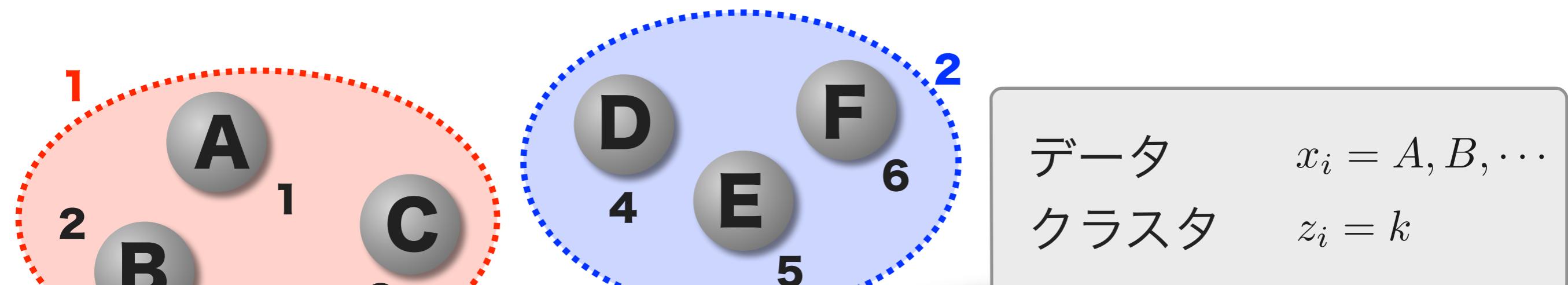
$$P(\{z_i\}|\{x_i\}, \alpha) = \frac{P(\{z_i\}, \{x_i\}|\alpha)}{P(\{x_i\}|\alpha)}$$

ベイスの公式 分母は  $\{z_i\}$  に依存しない。



$$\operatorname{argmax}_{\{z_i\}} P(\{z_i\}|\{x_i\}, \alpha) = \operatorname{argmax}_{\{z_i\}} P(\{z_i\}, \{x_i\}|\alpha)$$

# クラスタ分析のモデリング



$$\operatorname{argmax}_{\{z_i\}} P(\{z_i\} | \{x_i\}, \alpha) = \operatorname{argmax}_{\{z_i\}} P(\{z_i\}, \{x_i\} | \alpha)$$

$$P(\{z_i\}, \{x_i\} | \alpha) = P(\{x_i\} | \{z_i\}) P(\{z_i\} | \alpha)$$

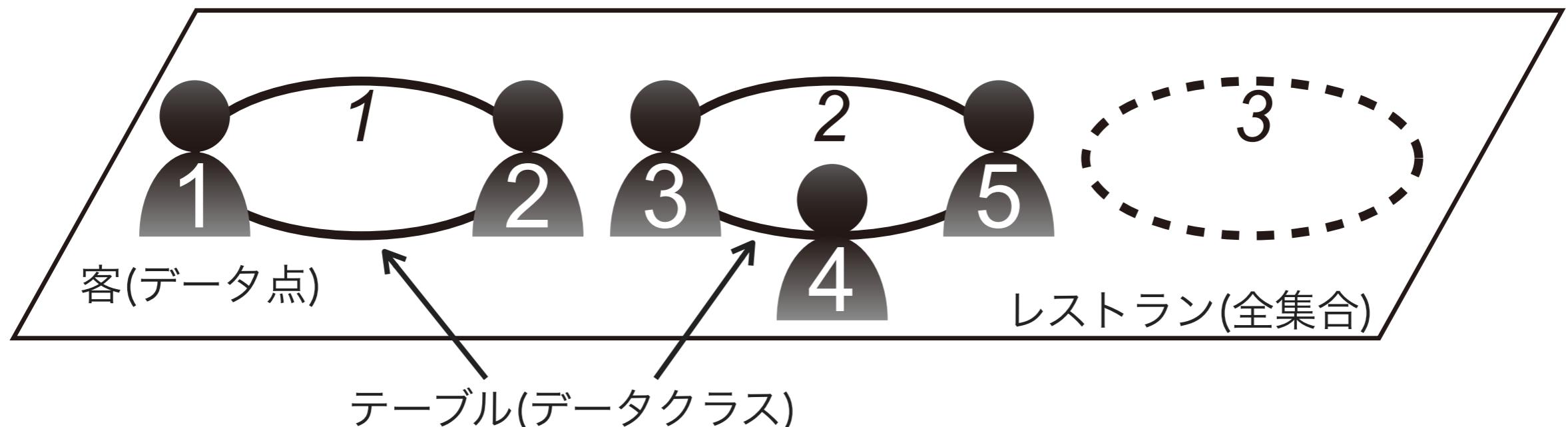
**分散傾向**

取り扱うデータに応じた  
モデルを用いる  
例) Dirichlet 多項分布

**凝縮傾向**

中華料理店過程  
次ページにて説明

## データのクラスタ形成プロセスをモデリング



新たに入ってきた客は、どのテーブルに座るか？

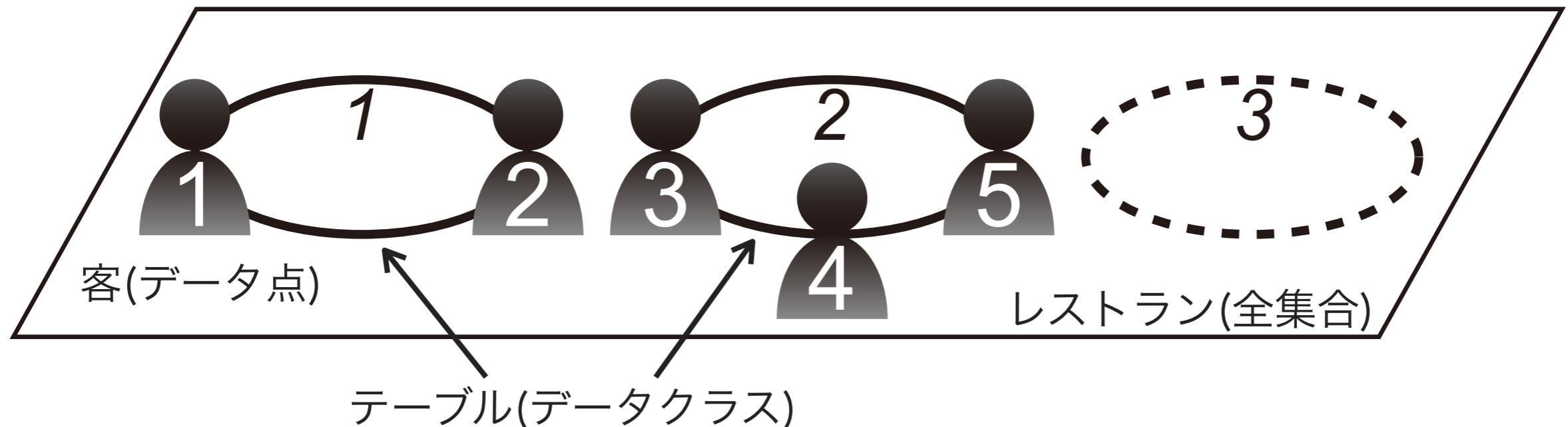
確率  $\frac{N_k}{N + \alpha}$  で、k番目のテーブルに座る。

確率  $\frac{\alpha}{N + \alpha}$  で、誰も座っていないテーブルに座る。

$N_k$  : k番目のテーブル  
に座っている客数  
 $N$  : レストラン内  
客総数  
 $\alpha$  : ハイパーパラメタ

## 平衡状態の確率分布

## データのクラスタ形成プロセスをモデリング



### 状態更新確率

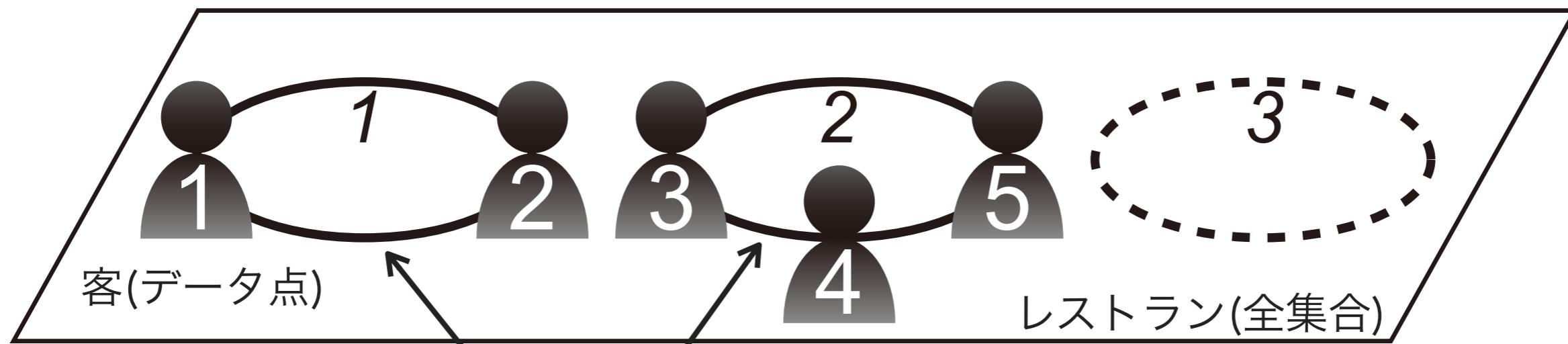
$$p(\tilde{\sigma}_i | \sigma \setminus \tilde{\sigma}_i; \alpha) \propto \begin{cases} \frac{N_k}{\alpha + N - 1} & k\text{番目のテーブルに座る。} \\ \frac{\alpha}{\alpha + N - 1} & 誰も座っていないテーブルに座る。 \end{cases}$$

↑  
客 i が居る  
テーブル

↑  
レストラン内の状態

## 平衡状態を定常状態とする確率過程

## データのクラスタ形成プロセスをモデリング



尤度

$$p(Z) = \frac{\alpha^{K(Z)}}{\prod_{\ell=1}^N (N - \ell + \alpha)} \prod_{k=1}^{K(Z)} (N_k - 1)!$$

レストラン内の状態Zにおいて、  
1人以上の客が居るテーブルの個数

$N_k$ : k番目のテーブル  
に座っている客数

$N$ : レストラン内  
客総数

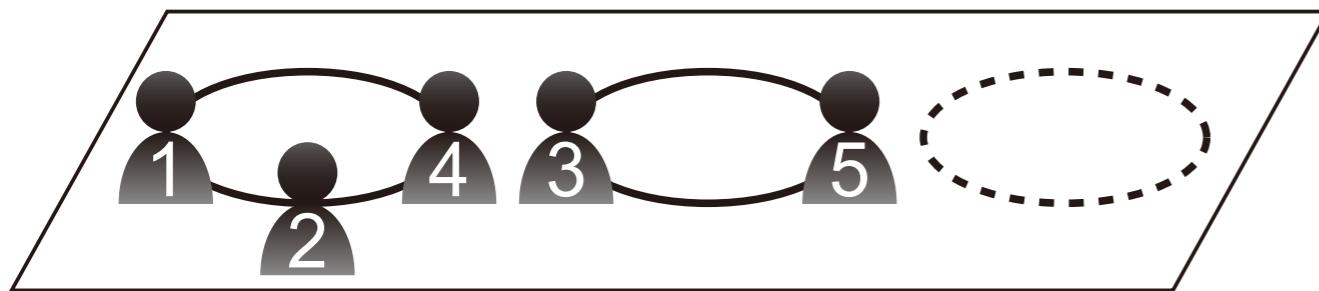
$\alpha$  : ハイパーパラメタ

## ハミルトニアンの定義

# クラスタ分析のモデリング イジングモデルによる記述

## ビット行列(隣接行列)による状態の記述

レストラン内の客配置



*Seating conditions*  $\tilde{\Sigma}$

$$B_{i,n} = B_{n,i} \text{ 対称行列}$$

$$B_{i,i} = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \text{ 自分自身}$$

$$\forall i, \ell, \quad B_i / |B_i| \cdot B_\ell / |B_\ell| = 1 \text{ or } 0$$

隣接行列

$B$	1	2	3	4	5
1	1	1	0	1	0
2	1	1	0	1	0
3	0	0	1	0	1
4	1	1	0	1	0
5	0	0	1	0	1

誰とテーブルを  
共有しているか

$$\mathbf{B} \Leftrightarrow \sigma = \bigotimes_{i=1}^N \bigotimes_{n=1}^N \tilde{\sigma}_{i,n}$$

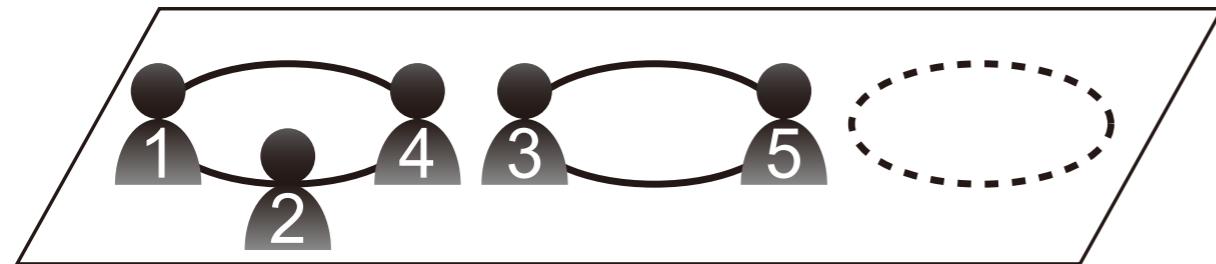
$N$ 人の客= $N^2$ 個のイジング спин  
巡回セールスマン問題と同じ規模



拘束条件付きイジングモデル

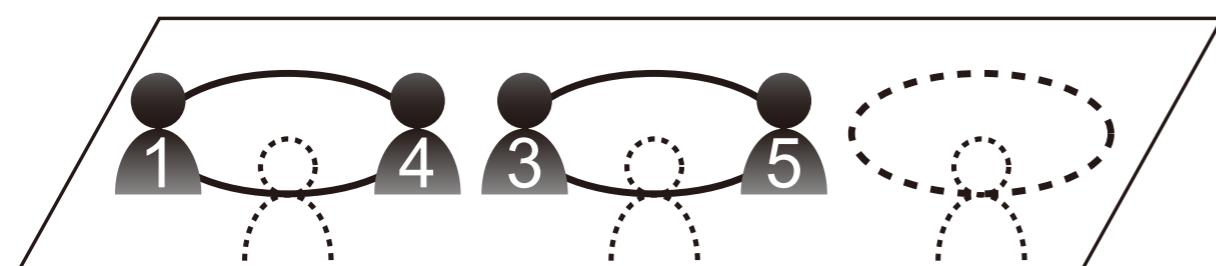
# クラスタ分析のモデリング イジングモデルによる記述

## Seating conditions を満たす状態空間内で更新



$$\tilde{\sigma}_2 \Leftrightarrow 2 \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}$$

客2のテーブル共有情報



$$\tilde{\Sigma}_2 = \left\{ \begin{array}{|c|c|c|} \hline & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline & 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline \end{array} \right\}$$

客2が seating conditions を満たしながら取れる状態の集合

	B	1	2	3	4	5
1	1	1	0	1	0	
2	1	1	0	1	0	
3	0	0	1	0	1	
4	1	1	0	1	0	
5	0	0	1	0	1	

モンテカルロ  
法による更新

	B	1	2	3	4	5
1	1		0	1	0	
2						
3	0		1	0	1	
4	1		0	1	0	
5	0		1	0	1	

## 横磁場を用いて量子アニーリングを実装

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_q$$

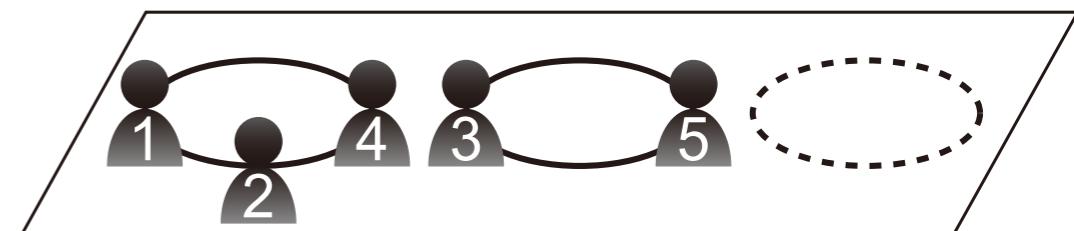
**イジングモデル(組合せ最適化問題)**

$$\mathcal{H}_c = \text{diag} \left[ E(\sigma^{(1)}), \dots, E(\sigma^{(2^N)}) \right]$$

**横磁場(量子揺らぎ)**

$$\mathcal{H}_q = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^N \sigma_{i,n}^x \quad \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

レストラン内の客配置



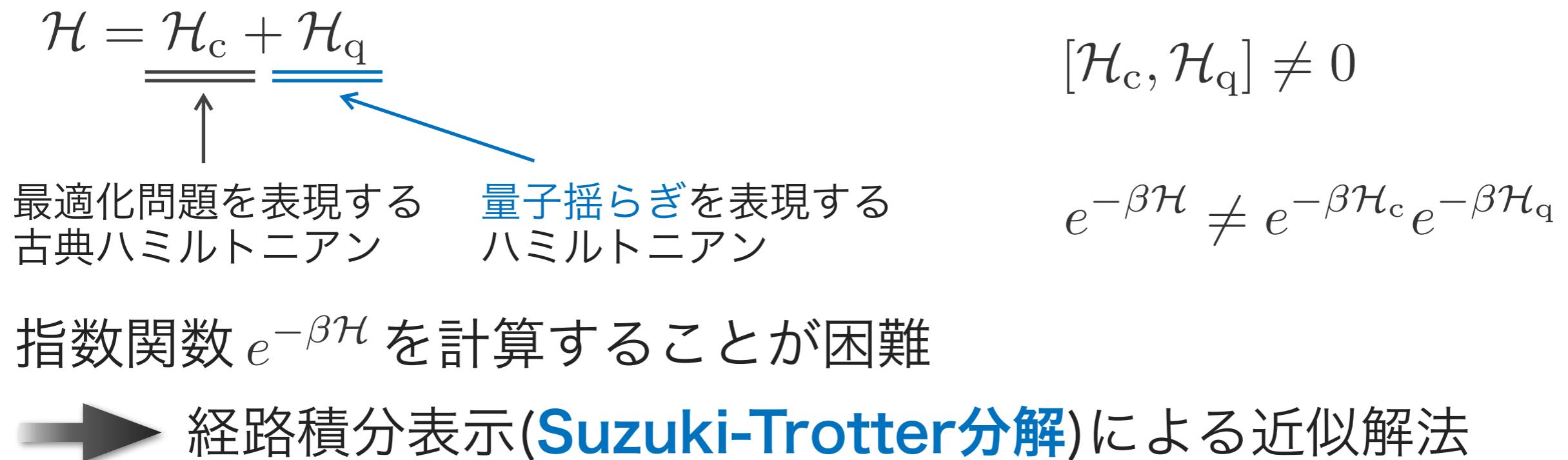
隣接行列

B	1	2	3	4	5
1	1	1	0	1	0
2	1	1	0	1	0
3	0	0	1	0	1
4	1	1	0	1	0
5	0	0	1	0	1

誰とテーブルを  
共有しているか

$$\mathbf{B} \Leftrightarrow \sigma = \bigotimes_{i=1}^N \bigotimes_{n=1}^N \tilde{\sigma}_{i,n}$$

# 量子アニーリングの導入方法 Suzuki-Trotter分解

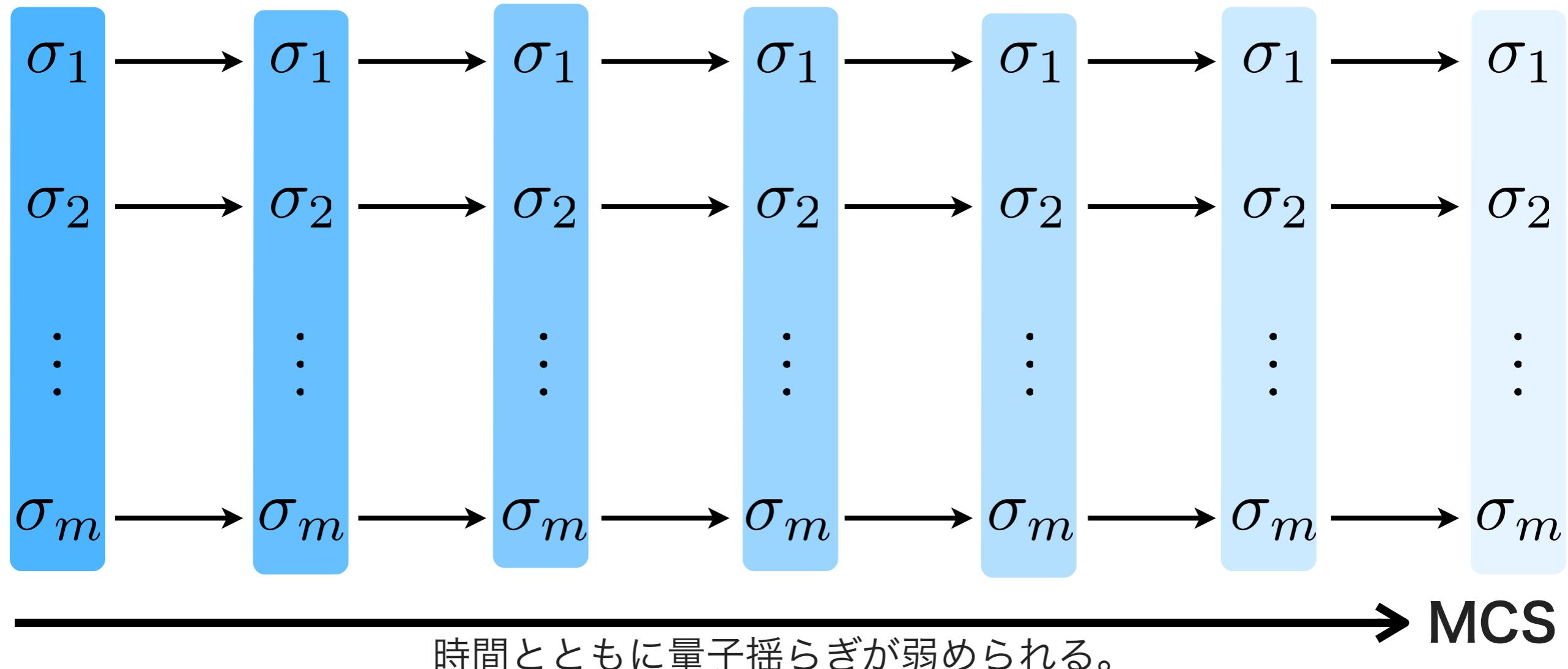


$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{\beta}{m}\mathcal{H}\right) &= \exp\left[-\frac{\beta}{m}(\mathcal{H}_c + \mathcal{H}_q)\right] \\ &= \exp\left(-\frac{\beta}{m}\mathcal{H}_c\right) \exp\left(-\frac{\beta}{m}\mathcal{H}_q\right) + \mathcal{O}\left[\left(\frac{\beta}{m}\right)^2\right]\end{aligned}$$

Trotter数(擬並列度)

## d次元量子系をd+1次元にマップ

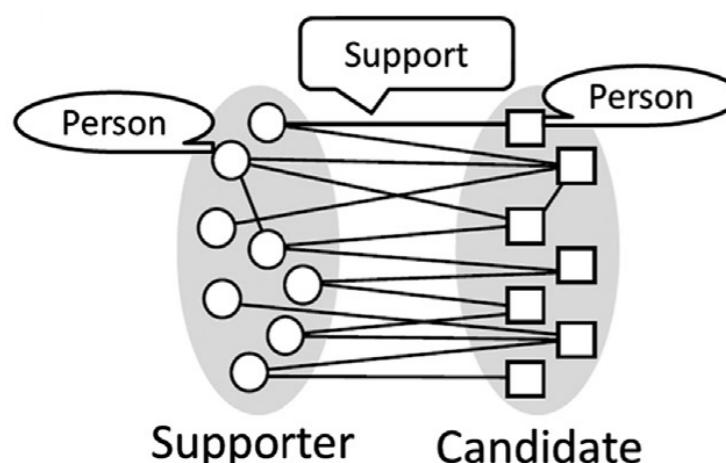
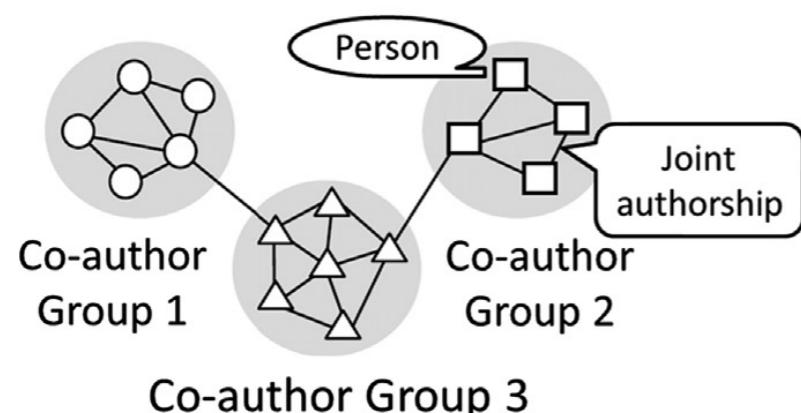
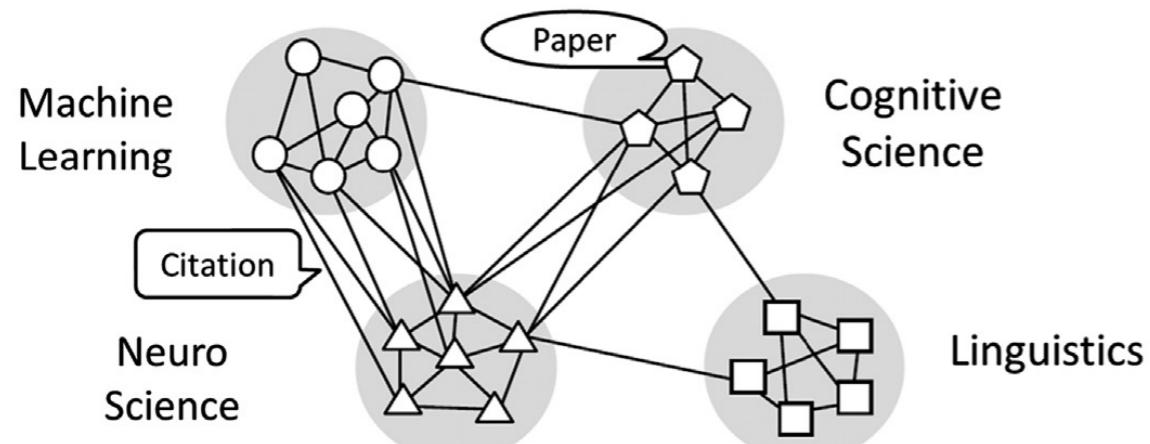
## m個のレプリカ間に相互作用が入った擬並列化計算



K. Kurihara, S. Tanaka, and S. Miyashita, UAI2009 (2009年出版)  
 K. K. Pudenz et al. Phys. Rev. A, 91, 042302 (2015) Quantum Annealing Correction (QAC)も類似概念とみなせる。

# 量子アニーリングの優位性 実データセット

## 様々なネットワーク構造を取る膨大なデータ



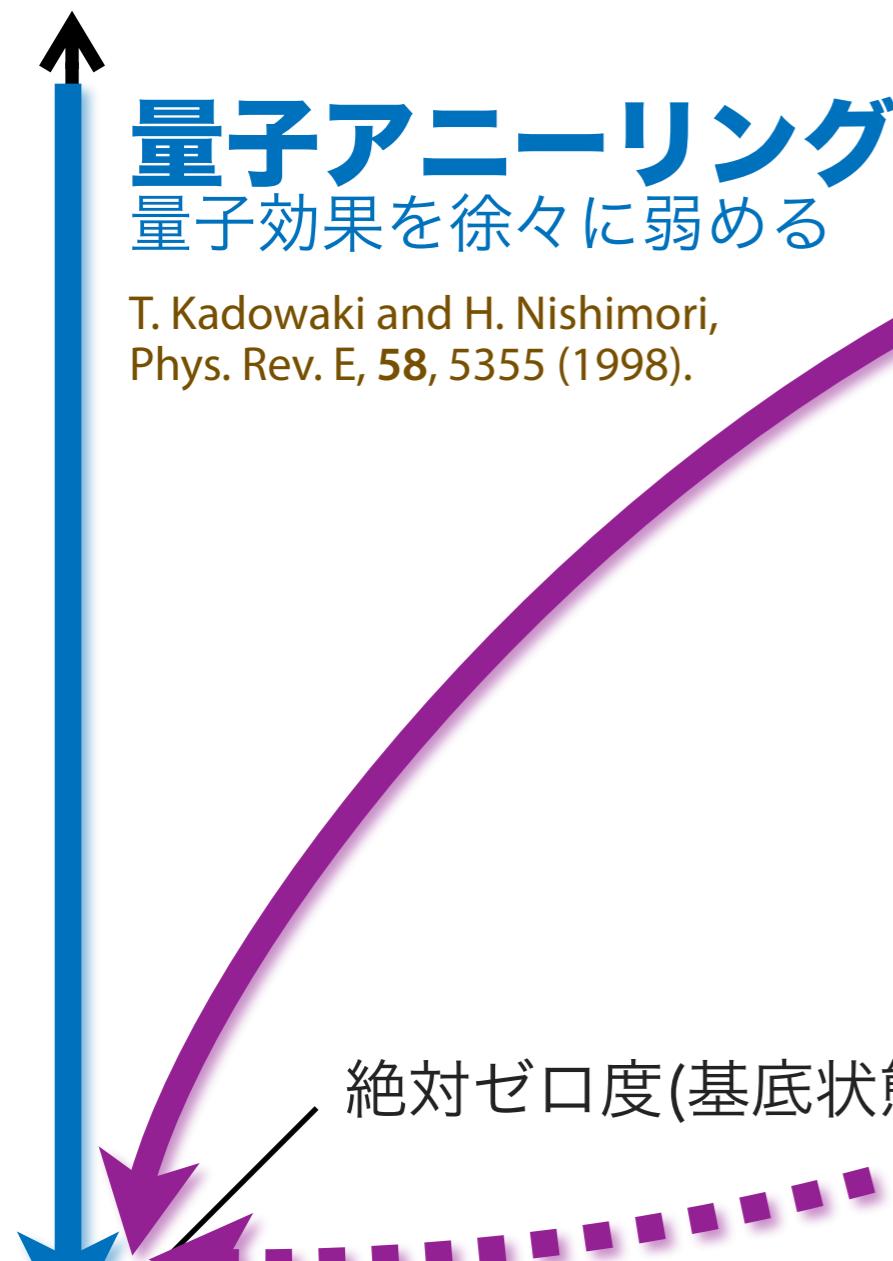
**Citeseer**  
論文引用ネットワーク  
**2110**論文

**Netscience**  
共著者ネットワーク  
研究者 **1589**人

**Wikivote**  
投票ネットワーク  
**7115**人

# 熱・量子同時制御型アニーリング

量子ゆらぎ効果



## 最適解を得る経路

第一段階で温度を下げ、  
第二段階で量子効果を下げる

K. Kurihara, S. Tanaka, and S. Miyashita, UAI2009.

## 効率の悪い経路

第一段階で量子効果を下げる、  
第二段階で温度を下げる

シミュレーテッドアニーリング  
温度を徐々に下げる

温度  
(熱ゆらぎ効果)

S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).

## 熱揺らぎと量子揺らぎを同時に制御

逆温度 :  $\beta(t) = \beta_0 \log(1 + t), \beta_0\sqrt{t}, \beta_0 t$  ( $\beta_0 = 0.2m, 0.4m, 0.6m$ )

量子揺らぎ項 :  $\frac{\beta(t)\Gamma(t)}{m} = \Gamma_0 \frac{\tau}{t}$

$\Gamma_0$  を変えて数値実験を行った。

Trotter数(擬並列数)  $m = 16$  は固定。

比較実験条件  
(シミュレーテッドアニーリング)

$$\beta(t) = 0.4m\sqrt{t}$$

最もSAがうまくいく条件

### 状態更新確率(量子)

$$p(\tilde{\sigma}_i | \sigma \setminus \tilde{\sigma}_i; \alpha) \propto \begin{cases} \left( \frac{N_k}{\alpha + N - 1} \right)^{\beta/m} e^{(c_{j,k}^-(i) + c_{j,k}^+(i))f(\beta, \Gamma)} \\ \left( \frac{\alpha}{\alpha + N - 1} \right)^{\beta/m} \end{cases}$$

$$f(\beta, \Gamma) = 2 \log \coth \left( \frac{\beta \Gamma}{m} \right)$$

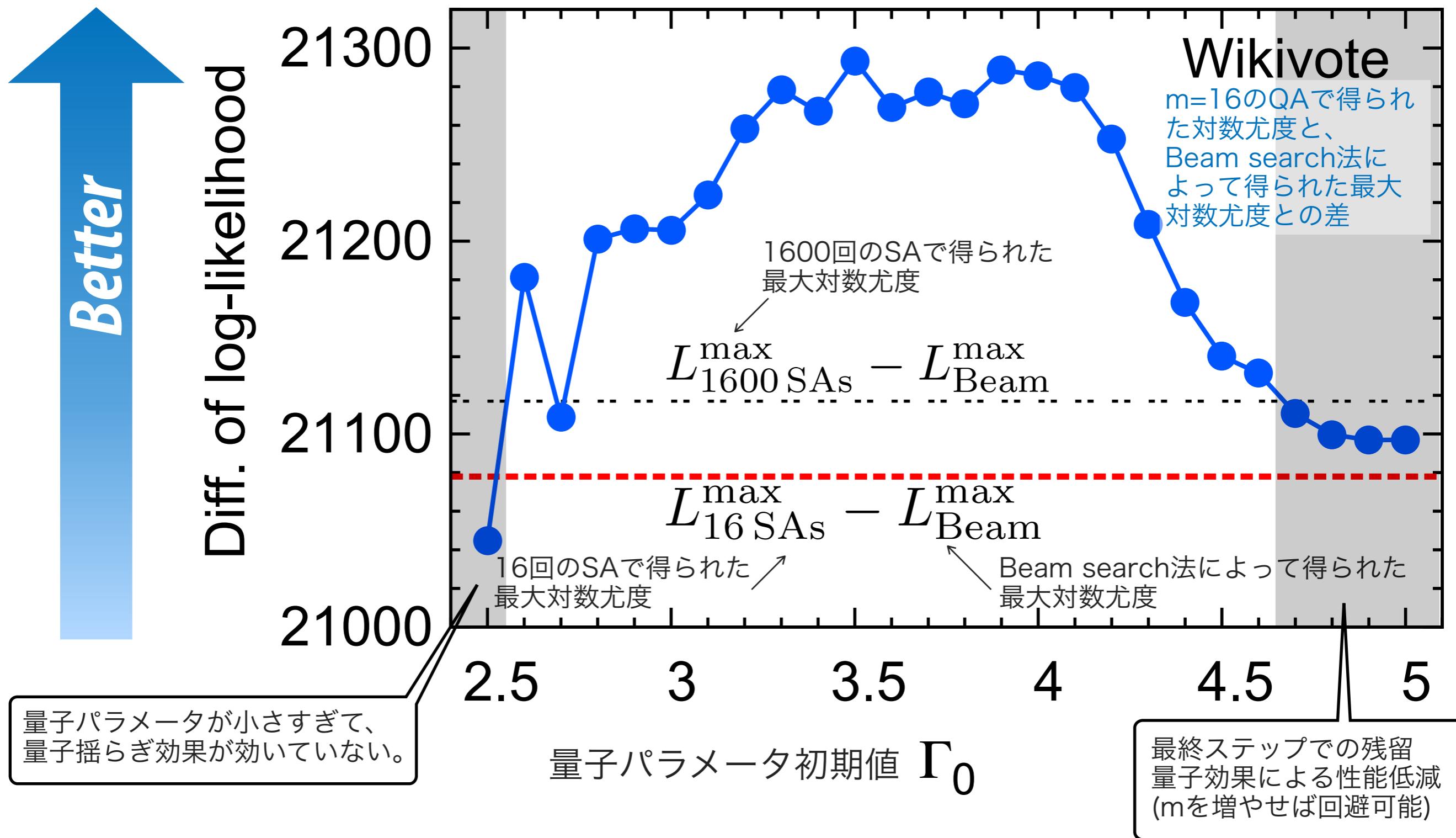
k番目のテーブルに座る。

誰も座っていないテーブルに座る。

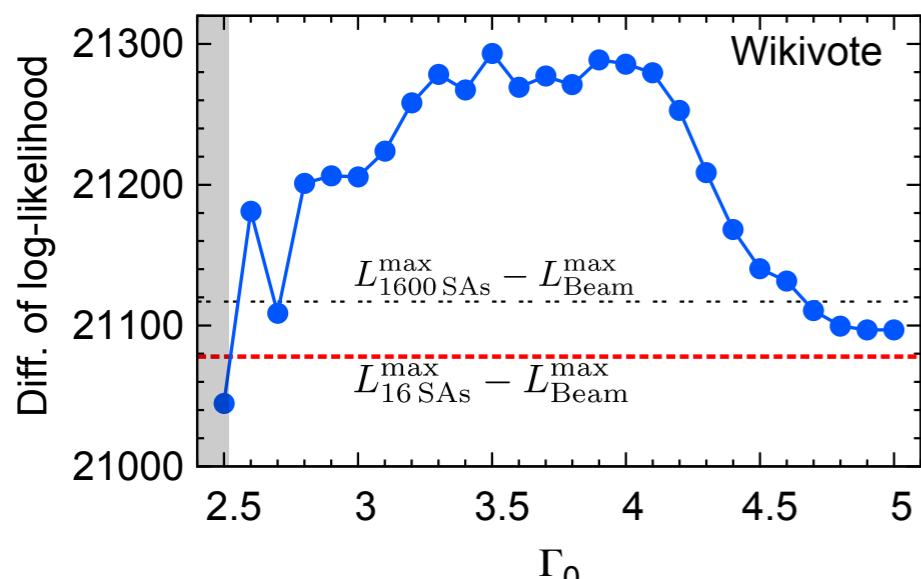
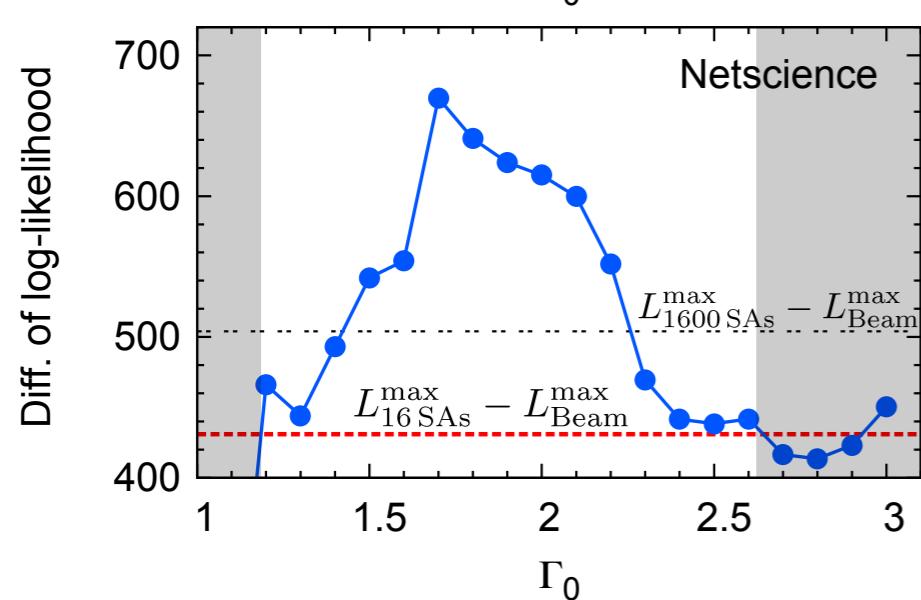
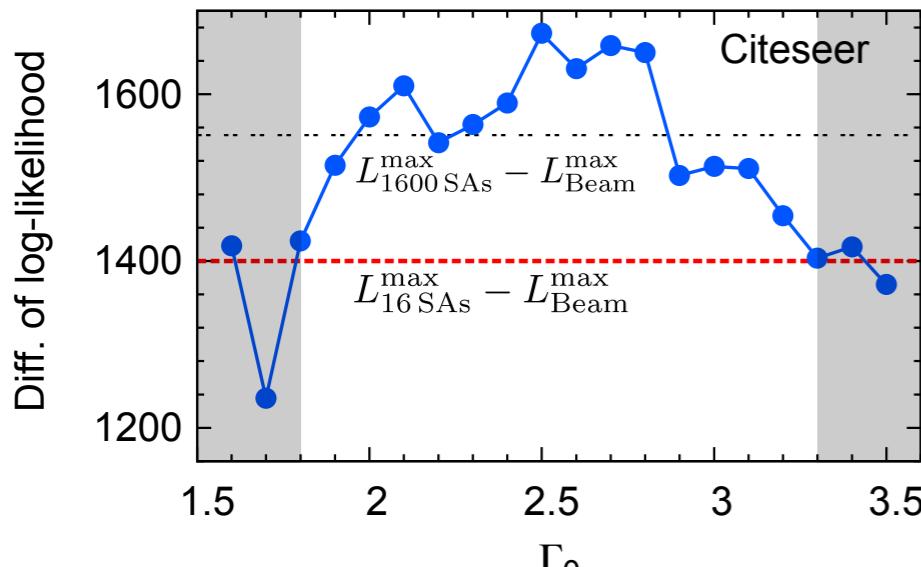
## 量子モンテカルロ法を適用

# 量子アニーリングの優位性 計算結果

## 対数尤度(高いほうが良い解)の量子パラメータ初期値依存性



# 量子アニーリングの優位性 計算結果



	16 SAs	1600 SAs	beam search	QA(m=16)
# classes	35	30	57	<b>37</b>

	16 SAs	1600 SAs	beam search	QA(m=16)
# classes	22	65	61	<b>26</b>

	16 SAs	1600 SAs	beam search	QA(m=16)
# classes	8	8	27	<b>8</b>

# 2つのキーワード

量子アニーリング

量子性を用いた  
新計算技術

クラスタ分析

分かることは  
分けること

# まとめ・今後の展望

機械学習における重要な技術であるクラスタ分析に対する、量子アニーリングの性能評価を行った。

量子モンテカルロ法を用いた擬似シミュレーションの結果、シミュレーテッドアニーリングに比べ、**量子アニーリングの方が、性能面で優位**であることを示唆する結果を得た。

## これまでの我々の研究で行ったこと

### 量子モンテカルロ法を用いた研究 *K. Kurihara, S. Tanaka, and S. Miyashita, UAI2009*

- ✓ MNISTデータ(手書き文字5000データ)を30個のクラスタに分類
- ✓ NIPSコーパス(論文1684報,1000語)を20個のクラスタに分類
- ✓ Reutersコーパス(記事1000報,2000語)を20個のクラスタに分類

### 変分ベイズ法を用いた研究 *I. Sato, K. Kurihara, S. Tanaka, H. Nakagawa, and S. Miyashita, UAI2009*

- ✓ Reutersコーパス(記事1000報, 12788語)を20個のクラスタに分類
- ✓ Medlineコーパス(論文1000報, 14252語)を20個のクラスタに分類

### 量子モンテカルロ法を用いた研究 *I. Sato, S. Tanaka, K. Kurihara, S. Miyashita, and H. Nakagawa, Neurocomputing, 121, 523 (2013)*

- ✓ Citeseer(論文2110報)をクラスタ分析
- ✓ NetScience(研究者1589人)をクラスタ分析
- ✓ Wikivote(7115人)をクラスタ分析