

氏名	小見山 朋子
博士の専攻分野の名称	博士（工学）
学位記番号	医工農博甲第142号
学位授与年月日	令和6年3月22日
学位授与の要件	学位規則第4条1項該当
専攻	工学専攻 システム統合工学コース
学位論文題目	複雑な制約を持つ最適化問題における量子アニーリングの効果的な利用方法の研究
論文審査委員 主査	教授 鈴木 智博
	教授 岩沼 宏治
	教授 高橋 正和
	教授 服部 元信
	准教授 鍋島 英知
	教授 伊藤 一帆

学位論文の要旨

近年、従来のコンピュータとは異なる原理で計算を行う量子コンピュータが注目を集めている。量子コンピュータは、量子の性質を利用して計算を行い、従来のコンピュータよりも省電力かつ高速に計算できる可能性がある。現状で量子コンピュータのハードウェアは実用的な問題を扱うまでには開発は進んでいないが、これらの技術を効果的に利用するための応用研究の重要性が高まっている。量子コンピューティング技術の1つである量子アニーリング（Quantum Annealing; QA）についても、商用マシンが開発されており、実用問題へ適用する応用研究が活発に行われている。

一方、科学技術計算において、疎行列連立一次方程式の求解は頻繁に登場する。疎行列は非零要素のみを扱うことで、メモリの消費量や計算コストを削減することができる。このような行列の連立一次方程式を直接解法で解くと、零だった要素が非零になるフィルインが発生し、メモリ消費量、計算コストが増加してしまう問題がある。この問題に対して、あらかじめ行列の要素を並べ替えることでフィルインの発生を減らすことができるため、前処理手法として要素の並べ替えを行なうオーダリングが利用されてきた。発生するフィルインの数が最小となるオーダリングを求める問題はNP完全であり、従来のアルゴリズムでこれを解くことは容易ではない。

本研究は、疎行列のオーダリング手法への QA の適用を例に、複雑な制約を持つ問題に対する定式化手法と QA の効果的な利用方法の提案を目的に実施したものである。このような線形代数的な問題が QA で解ける最適化問題として定式化されたのは恐らく世界で初めてのことである。本論文は、以上の研究結果についてまとめたものであり、6つの章で構成される。

第1章では、量子コンピュータの現状と本研究の目的が説明されている。また、本研究の4つの成果がここにまとめられている。

第2章では、QA の基本的な解説と組合せ最適化問題の二次制約なし二値最適化 (Quadratic Unconstrained Binary Optimization; QUBO) への定式化が説明されている。

第3章では、疎行列のオーダリングと、従来利用されてきたヒューリスティックなオーダリング手法が解説されている。

第4章では、本研究の1つ目の成果である、組合せ最適化問題として規定された疎行列のオーダリング手法である Quantum Minimum Fill-in (QMF) アルゴリズムの QUBO 定式化と評価結果が述べられている。QMF は最小フィルインを求める疎行列のオーダリング手法として QUBO 定式化され、従来手法よりも少ないフィルイン数の解が得られる可能性がある。さらに、QMF は、従来、動的な発見的な手法で求められてきたが疎行列のオーダリングを、静的な 0-1 整数計画問題として定式化し、QA などの最適化技術により解を求めることを可能にしたものである。さらに、本研究の2つ目の成果である、複雑な制約を持つ問題を少ない変数で QUBO 定式化するための手法が、高次式の次数削減と不等式制約の利用の2つの観点から議論されている。とくに、不等式を利用した定式化は本研究で新たに提案した手法であり、変数が少ないだけでなく、従来利用されてきた高次式の次数削減よりも実行可能解が得られやすい傾向があることが示されている。さらに、本研究の3つ目の成果である、QA におけるパラメータチューニングの重要性が示されている。

第5章では、本研究の4つ目の成果である、現状の QA マシンを効果的に利用する手法の提案として、QMF の問題緩和と QA と古典アルゴリズムのハイブリッド手法が議論されている。現状の QA マシンには実用上の課題が多くあり、大規模な問題を QA マシン単体で解くことはあまり現実的ではない。そこで、QA の利点を生かしつつ、QA マシンの課題に対処する2つの手法が提案されている。第一に、QMF の問題緩和では、最初の数ステップのみ QMF を適用することで問題サイズを小さくする方法、第二に、QA と古典アルゴリズムのハイブリッド手法として、従来のオーダリング手法である Minimum Degree (MD) 法と QMF を組み合わせたアルゴリズムが提案されている。

第6章で、本論文のまとめと今後の展望が述べられている。

論文審査結果の要旨

本研究は、疎行列のオーダリング手法への量子アニーリング (QA) の適用を例に、複雑な制約を持つ問題に対する定式化手法と QA の効果的な利用方法の提案を目的に実施したものである。複雑な制約の定式化において、本研究で新たに不等式を利用した手法が提案され、使用される変数が少ないだけでなく、従来利用されてきた高次式の次数削減よりも実行可能解が得られやすい傾向があることが示されている。また、大規模問題への適用例として、問題緩和、古典アルゴリズムとのハイブリッド手法を提案している。

ごく近い将来に発生することが予想されているムーアの法則の終焉により、今後、古典コンピュータの性能向上は見込めない。そのため、新しい動作原理を持つ量子コンピューティング技術に注目が集まっている。汎用量子コンピュータの確立を目指す量子ゲート方式の量子コンピュータは、現状では基礎研究の緒にたばかりであるが、QA 方式は、量子力学的効果に基づかないものを含め、実用問題を扱えるような実装が複数登場している。QA は組合せ最適化問題を解くための新しい計算技術であり、様々な最適化問題を解く試みが行われている。従来の解法よりも質のよい解が得られるとの報告もあるが、その有効性の評価は十分でない。

疎行列線形方程式の直接解法では、その過程でゼロ要素が非ゼロ要素となり、行列の疎性が損なわれてしまう。これを避けるため、行列要素の並べ替えを行なう前処理 (オーダリング) を行なう。非ゼロ要素の発生が最小となるような並べかえを発見する問題は NP 完全問題となることが知られており、多大な計算時間を要するため、ヒューリスティック解法が用いられてきた。本研究はこの問題を QA で求解可能な最適化問題に定式化した。QA の有効性を調査する試みの一つとして位置付けることができる。従来のヒューリスティック解法が動的な発見的手法であるのに対して、本研究ではこれを静的な 0-1 整数計画問題として定式化し、QA などの最適化技術により解を求めることを可能にした。

本研究の疎行列のオーダリングの定式化において、複雑な制約式から高次の項が生成された。通常、高次項に対しては次数削減により QA で扱える 2 次項を導出する。本研究において、次数削減のための複数の方法の比較が行われ、どの手法が最も効果が大きいか明らかになっている。また、不等式の形で成約を与えることで、次数削減よりも変数削減効果が大きく、得られる解の質も高いことを示した。

さらに、より大きなサイズの問題に対して、質の良い解を得る問題緩和の手法を提案した。また、従来法の欠点を補うハイブリッド手法を提案し、その評価が行われている。

いくつかの変数削減の手法と問題緩和を導入したが、現状のアニーリングマシンで扱える

問題サイズが非常に小さいため、実用性の観点からは不十分なサイズの問題しか扱えていない。今後、ハードウェアの進歩によりさらに大きな問題サイズを扱えるようになることは明らかであるが、拡大した問題サイズに対してよい解を導出するためには、更なる工夫を要する可能性がある。これは今後の課題の一つである。

著者は課程博士を期間短縮で修了するため、関連する他分野の調査が十分でない面が見受けられる。今後、より広範な分野の知識を積極的に獲得することを期待したい。

しかし、博士論文としての基準は十分に満たしていると判断可能であり、関連論文の提出数も基準を満たしている。

以上から、学位論文審査、最終試験ともに合格とした。