F-018

二値行列分解のためのイジングモデルの定式化
Formulation of Ising model for binary matrix factorization

中村 崇人 † 大久保 潤 † 此島 真喜子 ‡ 田村 泰孝 ‡
Takato Nakamura Jun Ohkubo Makiko Konoshima Hirotaka Tamura

1. はじめに

近年，イジングモデルで定式化された問題をアニーリングで高速に解くことができる専用マシンが登場し，注目されている．その例としてカナダの量子コンピュータ開発会社である D-WAVE 社の量子アニーリングマシン (D-WAVE)[1, 2] や，富士通研究所のデジタルアニーラ [3] があげられる．

また，様々な組合せ最適化問題はイジングモデルを用いて表現できることが知られている [4]．もし，解きたい問題のイジングモデルの表現を得ることができれば，D-WAVE 等の専用マシンを利用できる．しかし，組み合わせ最適化問題に対してイジングモデルで目的関数を構成する一般的な方法は知られていない．そのため，まだイジングモデルでの表現が与えられていない問題も存在し，専用マシンの利用に向けてそれらの表現を模索することが必要とされている．

本稿ではイジングモデルでの表現が与えられていない問題の一つとして二値行列分解に注目する．行列分解は行列形式で記述されるデータに対して用いることができる解析手段であり，非常に幅広く応用可能性が存在する．二値行列分解には演算規則に応じた区別があり，通常の整数演算に従うもの [5] とブール代数に従うもの [6] の２つが主に知られている．これら２種類のうち，ブール代数に従って演算を行う二値行列分解に対するイジングモデルでの表現を本稿では提案する．

2. 関連研究

Miettinen らの論文 [6] では，グリーディ法を用いて，演算規則としてブール代数を使った際の二値行列分解を行なっている．同じ問題に対してイジングモデルを用いた目的関数を構成するには，ブール代数をイジングモデルで扱う必要がある．Whitefield らの論文 [7] によれば，AND や OR, XOR などをイジングモデルで記述できる．ブール変数 $x \in \{0, 1\}$ とスピン変数 $\sigma \in \{1, -1\}$ との変換は式 (1) で行うことができる．

$$x = \frac{(1-\sigma)}{2} \tag{1}$$

以下に AND,OR,XOR のイジングモデルでの記述を述べる．

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}_{x\wedge y}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)\\&\quad=(c_1\sigma_1+c_2\sigma_2)(1-\sigma_3)-(c_1+c_2)\sigma_3\\&\qquad+c_{12}(\sigma_1\sigma_2-\sigma_1\sigma_3-\sigma_2\sigma_3)\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}_{x\vee y}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)\\&\quad=-(c_1\sigma_1+c_2\sigma_2)(1+\sigma_3)+(c_1+c_2)\sigma_3\\&\qquad+c_{12}(\sigma_1\sigma_2-\sigma_1\sigma_3-\sigma_2\sigma_3)\end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}_{x\oplus y}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\sigma_4)\\&\quad=\mathcal{H}_{\bar{x}\wedge\bar{y}}(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_4)\\&\qquad-\sigma_3+\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_3+2\sigma_3\sigma_4\end{aligned} \tag{4}$$

ただし，式 (2), (3) においては c_1, c_2, c_{12} は正の数でなければならず，式 (4) においては c_1, c_2, c_{12} が 1/2 よりも大きい値でなければならない．σ_1, σ_2 が入力，σ_3 が出力に対応する変数である．式 (2) は入出力に対応する変数 $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ が AND の入出力と一致する状態のときに基底状態となる．式 (3), (4) においても同様に，入出力に対応する変数 $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ がそれぞれ OR，XOR の入出力の値と一致する状態のときに基底状態となる．

3. 行列分解

本稿で考える問題である二値行列分解は以下のようなものである．

二値 $\{0, 1\}$ の $N \times M$ 行列 A を，二値 $\{0, 1\}$ の $N \times k$ 行列 W，および二値 {0,1} の $k \times M$ 行列 H へと分解する．

$$\begin{aligned}A &= WH\\&= \boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_1+\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{h}_2+\cdots+\boldsymbol{w}_k\boldsymbol{h}_k\end{aligned}$$

ただし，列ベクトル $\{\boldsymbol{w}_i | i = 1, \ldots, k\}$ および行ベクトル $\{\boldsymbol{h}_i | i = 1, \ldots, k\}$ を用いて

$$W = \begin{bmatrix}\boldsymbol{w}_1 & \boldsymbol{w}_2 & \cdots & \boldsymbol{w}_k\end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_1\\\boldsymbol{h}_2\\\vdots\\\boldsymbol{h}_k\end{bmatrix} \tag{5}$$

である．

例えば，行列分解はクラスタリングに利用することができる．行列分解によって与えられた行列 A のある列 $\boldsymbol{a}_j$ について注目すると

$$\boldsymbol{a}_j = \sum_{i=1}^{k}\boldsymbol{w}_i h_{ij}$$

†埼玉大学, Saitama University
‡富士通研究所, FUJITSU LABORATORIES LTD.

のように記述される．ここで $\boldsymbol{w}_i$ を基底ベクトル，h_{ij} を重みだと考えると $\boldsymbol{a}_j$ は重み付きの和として表されることとなる．そこで，重みに注目することでデータをクラスタリングすることが可能である．

4. ブール代数で演算を行う二値行列分解

Whitefield らによる論文 [7] で導出された論理ゲートのイジングモデルでの表現を組み合わせることで，ブール代数で演算を行う場合の二値行列分解に対する目的関数を構成する．具体的には

$$\sum_{ij}[((W_{i1}\wedge H_{1j})\vee(W_{i2}\wedge H_{2j}) \vee\cdots\vee(W_{ik}\wedge H_{kj}))\oplus A_{ij}] \tag{6}$$

を論理ゲートのイジングモデルでの表現を用いて表現する．また本稿では式 (2), (3), (4) の c_1, c_2, c_{12} にあたる係数を全て 1 とした．

$(WH)_{ij}\oplus A_{ij}$ を計算する論理ゲートの組み方を図 1 に示す．図 1 の組み方をしたとき $(WH)_{ij}\oplus A_{ij}$ を計算するための目的関数は以下の式 (7) のようになる．ただし，$A_{ij}\in\{0,1\}, W_{ij}\in\{0,1\}, H_{ij}\in\{0,1\}$ であるので変数変換を行い，$\sigma_{A_{ij}}=1-2A_{ij}, \sigma_{W_{ij}}=1-2W_{ij}, \sigma_{H_{ij}}=1-2H_{ij}$ とする．また，$\sigma_{[a_{ij},k]}$ は $W_{ik}\wedge H_{kj}$ の出力に対応するスピン変数，$\sigma_{[o_{ij},k]}$ は $(WH)_{ij}$ を計算するときの途中の OR の結果に対応するスピン変数，$\sigma_{[x_{ij},1]}$ は $(WH)_{ij}\oplus A_{ij}$ の結果を表すスピン変数，$\sigma_{[x_{ij},2]}$ は $(WH)_{ij}\oplus A_{ij}$ を計算するときの補助スピンを表す．

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{ij}=&\sum_{r=1}^{k}\mathcal{H}_{x\wedge y}(\sigma_{W_{ir}},\sigma_{H_{rj}},\sigma_{[a_{ij},r]})\\&+\mathcal{H}_{x\vee y}(\sigma_{[a_{ij},1]},\sigma_{[a_{ij},2]},\sigma_{[o_{ij},1]})\\&+\sum_{r=1}^{k-2}\mathcal{H}_{x\vee y}(\sigma_{[a_{ij},r+2]},\sigma_{[o_{ij},r]},\sigma_{[o_{ij},r+1]})\\&+\mathcal{H}_{x\oplus y}(\sigma_{[o_{ij},k-1]},\sigma_{A_{ij}},\sigma_{[x_{ij},1]},\sigma_{[x_{ij},2]})\end{aligned} \tag{7}$$

入力として W, H が与えられたときに式 (7) が基底状態であるならば，$(WH)_{ij}\oplus A_{ij}$ の計算結果が $\sigma_{[x_{ij},1]}$ である．二値行列分解はそれぞれの i, j に対して $(WH)_{ij}\oplus A_{ij}=0$ となる W, H を探すことが目的であるので，

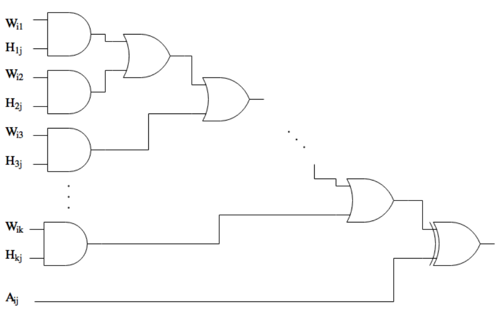

図 1: 論理ゲートの組み方

XOR の出力に対応するスピンを $\sigma_{[x_{ij},1]}=1$ で固定するとよい．よって，ブール代数で演算を行う二値行列分解に対するイジングモデルでの表現は式 (8) となる．

$$\begin{aligned}\mathcal{H}=\sum_{ij}\Big(&\sum_{r=1}^{k}\mathcal{H}_{x\wedge y}(\sigma_{W_{ir}},\sigma_{H_{rj}},\sigma_{[a_{ij},r]})\\&+\mathcal{H}_{x\vee y}(\sigma_{[a_{ij},1]},\sigma_{[a_{ij},2]},\sigma_{[o_{ij},1]})\\&+\sum_{r=1}^{k-2}\mathcal{H}_{x\vee y}(\sigma_{[a_{ij},r+2]},\sigma_{[o_{ij},r]},\sigma_{[o_{ij},r+1]})\\&+\mathcal{H}_{x\oplus y}(\sigma_{[o_{ij},k-1]},\sigma_{A_{ij}},1,\sigma_{[x_{ij},2]})\Big)\end{aligned} \tag{8}$$

また，$N\times M$ の行列を $N\times k, k\times M$ の二つの行列に分解するときに必要とするスピン数は $(2MN+M+N)k$，基底状態でのエネルギーの値は $-NM(6k+1)$ である．

5. まとめ

本稿ではブール代数に従って演算を行う場合の二値行列分解に対するイジングモデルでの表現を提案した．今回の提案では必要となるスピン数が最適化したいものに比べて多くなっているため，必要スピン数を減らすことが今後の課題としてあげられる．

参考文献

[1] M. W. Johnson, et al., “Quantum Annealing with Manufactured Spins,” Nature Vol. 473, pp. 194-198 (2011).

[2] P. Bunyk, et al., “Architectural Considerations in the Design of a Superconducting Quantum Annealing Processor,” IEEE Trans. Applied Superconductivity Vol. 24, No. 4, article number 1700110 (2014).

[3] 富士通研究所, “量子コンピュータを実用性で超える新アーキテクチャーを開発,” 2016, [アクセス日:2017 年 6 月 12 日], http://pr.fujitsu.com/jp/news/2016/10/20-1.html

[4] A. Lucas, “Ising formulations of many NP problems,” Frontiers in Phyisics Vol. 2, Article 5 (2014).

[5] Z. Zhang, et al., “Binary matrix factorization with applications,” Proceedings of the 2007 Seventh IEEE International Conference on Data Mining (ICDM 2007), pp. 391-400 (2007).

[6] P. Miettinen, et al., “The discrete basis problem,” IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering Vol. 20, pp. 1348-1362 (2008).

[7] J. D. Whitfield, et al., “Ground-state spin logic,” Europhys. Lett. Vol. 99, article number 57004 (2012).