

量子自己符号化器の開発

Development of quantum autoencoder

黄川田優太¹, 坂本克好¹, 山口浩一¹, 横川慎二², 曾我部東馬^{*1,2}

¹ 電気通信大学 先進理工学科

² 電気通信大学 i-パワーエネルギーシステム研究センター

Classical autoencoder is used for compression dimension of the image data and take characteristics, called prior learning. Here we propose quantum autoencoder using quantum annealing. Quantum annealing is optimization technique by adding a wide magnetic field to spin system expressed in isingmodel. But, to solve the optimization problem using quantum annealing, it is necessary to convert the problem into a combination problem of two values(± 1) as direction of the spin(up spin:+1, down spin:-1). In this paper, we explain learning method of the image using quantum autoencoder, then we show the result that took characteristics from original image data. Finally, we tried noise reduction from original image data using characteristics.

1. はじめに

近年, 組み合わせ最適化問題を解く量子力学的な手法として量子アニーリングが注目を浴びている. 特に, 量子アニーリングを用いて D-wave systems 社が世界で初めての商用量子コンピュータとして世に送り出した D-wave One が世間を賑わせた事は記憶に新しい. 量子アニーリングを用いた組み合わせ最適化問題では解きたい問題をイジングモデルで表されるスピン系に置き換え, 系のエネルギーを最小化する事によって解を得る. それ故, 問題自体を ± 1 の二値(+1: スピン上向き, -1: スピン下向き)で表現される組み合わせ問題に変換する必要がある. 2次元のスピン系で置き換えられた問題のハミルトニアンは(1)式のようになる. ただし, 簡易化のため外部磁場は0としている.

$$H = -J_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma(t) \sum_i \sigma_i^x \quad (1)$$

ここで, 右辺第一項の和は最隣接4つのスピン和を表し, J_{ij} はスピン間の相互作用定数, σ^z, σ^x は pauli の z スピンと x スピン, $\Gamma(t)$ は横磁場の強さを表すパラメータを表している. (1)式の右辺第二項のように, 量子アニーリングでは系のハミルトニアンに横磁場項を導入する事で量子揺らぎによる状態ベクトルの重ね合わせを実現し, 横磁場を徐々に弱めていく事によって最適解を得る事を可能としている. しかし, 系のサイズ(スピン数)が大きくなると一般的な計算機上での計算は困難になる. そこで用いられるのが経路積分量子モンテカルロ法である. これは(1)式のハミルトニアンから鈴木トロッタ分解を用いて量子系を次元を1つ増やした古典系にマッピングする事により近似的に系の自由エネルギーを求め, モンテカルロ法を用いてそれを最小化する事によって解を得る方法である. 2次元のスピン系から近似的に得られるエネルギーは(2)式のようになる.

$$E = 1/m \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_k J_{ijk} \sigma_{i,k}^z \sigma_{j,k}^z - 1/2 \log \coth(\beta \Gamma(t)/m) \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^m \sigma_{i,k}^z \sigma_{i,k+1}^z \quad (2)$$

ここで, m は追加したトロッタ次元, β は系の逆温度である. 本研究では量子アニーリングを用いて二値画像の特徴量を学習し, 元画像からノイズを除去する事を目的とした[鈴木 2018].

2. 量子自己符号化器学習モデル

画像データに対して, 従来の自己符号化器は出力画像が入力画像を再現するようにニューラルネットワークのウェイトを更新し, 画像データの特徴量を学習する[岡谷 2017年]. 本研究ではこの従来の自己符号化器のプロセスを量子アニーリングを用いて行う. 量子アニーリングを用いた最適化では(2)式で表される系のエネルギーを最小化する事によって解を得た. 量子アニーリングを用いて画像データの特徴量を取るためには画像データを ± 1 の二値に変換し, +1を上向きスピン, -1を下向きスピンの対応させ, 初期状態を作る必要がある. その後, なるべく元画像を再現するように系のエネルギーを最小化していく. 本研究ではこのエネルギーを最小化する過程の中に, (3)式のようなスピン間相互作用定数 J の更新を組み込む事によって画像データの特徴量を取るモデルを考案した. ただし, J の初期値は(0,1)の乱数である.

$$J_{ijk} = J_{ijk} - \varepsilon E' \quad (3)$$

$$E' = 1/m \sigma_{i,k}^z \sigma_{j,k}^z \quad (4)$$

ここで, ε は学習率であり, E' は(2)式を J_{ijk} で微分したもので, (4)式のようになる.

2.1 相互作用定数 J の設計

本研究では(3)式を用いて相互作用定数 J を更新するために J の行列表現を用いた. その際, 隣り合うスピン間で J の値に相違がないようにしなければならない. 以下の図 2-1 に J の行列表現の例を示す.

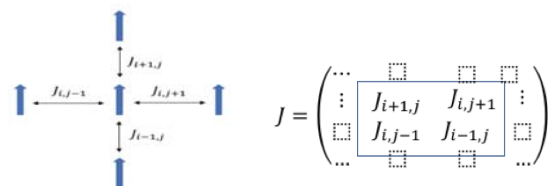


図 2-1 J の行列表現の例

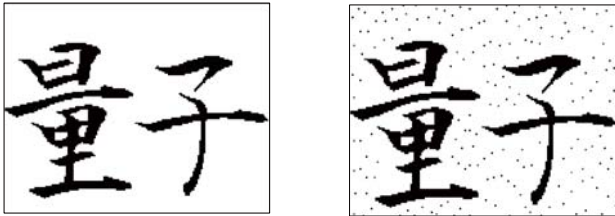
図 2-1 では中央のスピンに対する最隣接4つの相互作用を表しており, 行列 J は各要素を 2×2 のブロックとしたブロック行列と

連絡先: 曾我部 東馬, 電気通信大学 i-パワーエネルギー・システム研究センター, sogabe@uec.ac.jp

し、系のサイズ(縦方向のスピン数 N_y , 横方向のスピン数 N_x)に対して周期境界条件を課した場合の行列 J のサイズは $2N_y \times 2N_x$ となるように設計した。

2.2 画像データ

本研究では[3]を参考に作成した図 2-2 の画像を用いた。



(a) (b)

図 2-2 画像サイズ 130×170

図 2-2 (a) は元画像, (b) は元画像にノイズを入れた画像である。

3. 結果

以下の図 3-1 に横磁場の減少グラフを示す。

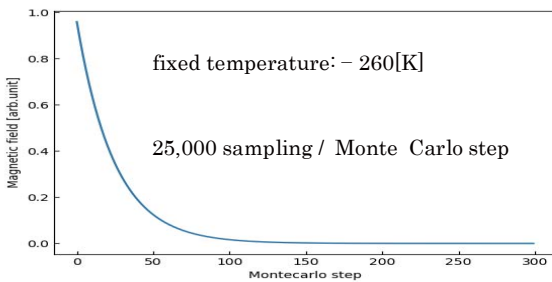


図 3-1 横磁場の減少スケール

図 3-1 は横磁場の減少を 1 モンテカルロステップあたりで表記している。具体的なスケールの式は(5) 式のようになり、 N は系のサイズ(スピン数), C は N におおよそ比例する定数である。本研究では簡易化の為に $N=C$ とし、 t はモンテカルロステップで 300 ステップとした。

$$\Gamma(t) \propto t^{-C/N} \quad (8)$$

次に、図 3-2 (a), (b) に元画像の特徴を取った後、つまり相互作用定数 J を学習した後の画像と、学習した J を使ってノイズの入った元画像(図 2-2 (b))からノイズを除去した画像を示した。



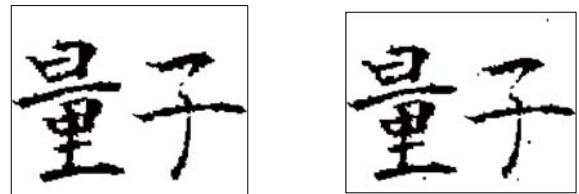
(a) 学習後 (b) ノイズ除去

図 3-2 トロッタ次元数 $m = 10$, 学習率 $\epsilon = 0.07$

図 3-3 (a) を見ると画素値の境界付近に欠落している部分が多く見られた事からこの付近の特徴が取りきれていない事が分かる。一方、図 3-3 (b) を見るとノイズ除去に関しては元画像を概ね維持しつつ、ほとんどのノイズを除去できている事が分かる。

4. 議論

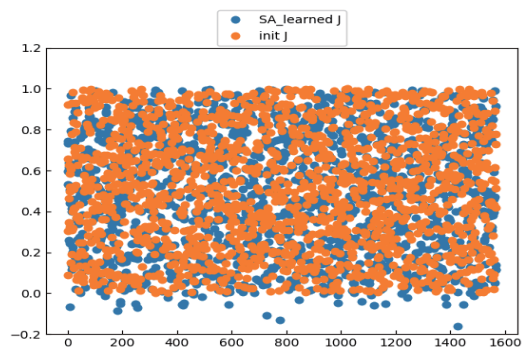
量子アニーリング(QA)は量子力学的な手法を用いて組み合わせ最適化問題を解く手法であったが、従来の手法としてはシミュレーテッドアニーリング(SA)がある。本研究において量子アニーリングを用いたことによる利点を評価するために、以下の図 4-1 に SA を用いた場合の結果を示す。



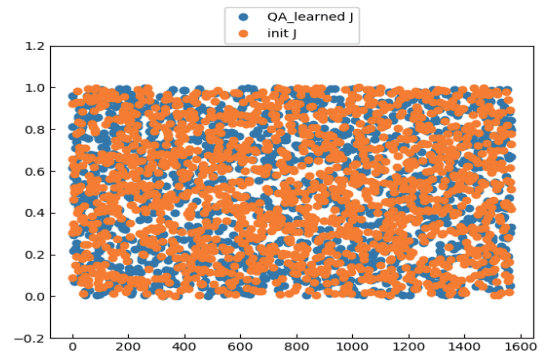
(a) 学習後 (b) ノイズ除去

図 4-1 SA を用いた結果. 学習率 $\epsilon = 0.06$

図 4-1 (a) を見ると、学習後の画像は量子アニーリングを用いた場合とほとんど違いが見られなかった。しかし、(b) を見ると、量子アニーリングを用いた方に比べてノイズを除去できていないのが分かる。この事から SA に比べて量子アニーリングを用いた方がより画像の特徴を取れているからであると考えられた。そこで、量子アニーリングと SA 双方において学習後の相互作用定数 J がどのようになっているかを画像データセットである MNIST の数字 0 (サイズ: 28×28) を用いた場合を以下の図 4-2 に示した。

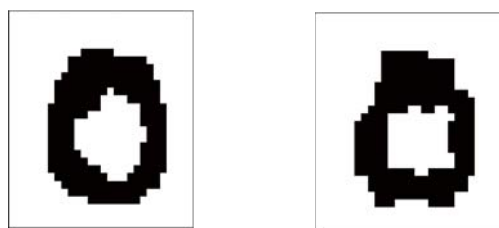


(a) SA を用いた時の J 値



(b) QA を用いた時の J 値

図 4-2 SA と QA による J 値の比較



(a) MNIST の元画像

(b) QA での学習後

図 4-3 量子自己符号化器での学習結果

また, 図 4-3 に MNIST の元画像(2 値に変換済み)と SA, QA 双方での学習後の画像を示した. 図 4-2 は縦軸に J の値, 横軸に J (行列)の要素数を取ったものである. MNIST 画像のサイズは 28×28 であるから J の要素数は $56 \times 56 = 3136$ となるが, 隣り合うスピン間で J の値は同じになる為, 重複を避けた結果 1568 となっている. 本研究では J の初期値を $[0,1)$ の乱数として行なっている. それを踏まえて図 4-2 の(a)を見ると SA を用いた場合は学習後の J 値に負の値が出てきているのが分かる. 一方, (b)を見ると QA を用いた場合は負の値が出てきていない. この結果から, SA を用いて学習した方が QA を用いて学習した場合に比べて画像の境界付近の特徴を取れていると言えた. 図 4-3 から QA は境界付近の特徴をうまく取れていないと言える. また, 図 3-2 (b) と図 4-1(b) のノイズ除去後の画像を見比べると QA を用いて学習した方が良い結果が得られているのが分かる. この結果から, SA を用いた場合は局所的な画像の特徴を, QA を用いた場合はより大域的な画像の特徴を取っているのではないかと考えられた.

参考文献

- [鈴木 2008 年] 鈴木 正: 組み合わせ最適化問題と量子アニーリング: 量子断熱発展の理論と性能評価.
- [田中 2009 年] 田中宗, 栗原賢一, 宮下精二 : 量子アニーリング法を用いたクラスタ分析.
- [西森 2014 年] 西森 秀稔: 量子アニーリングの数理, 物性研究・電子版, vol.3, No.3,033203, 2014 年
- [岡谷 2017 年] 岡谷 貴之: 深層学習, 講談社
- [1] 物理の知らない量子アニーリング入門:
<http://blog.brainpad.co.jp/entry/2017/04/20/160000>