

審査の結果の要旨

氏名 北井 孝紀

本論文は、測定・シミュレーションの代わりに用いる代理モデルとして **Factorization Machine (FM)** を用い、その最適化に量子アニーリング (**QA**) を組み合わせて、ブラックボックス最適化を行う手法とその応用について論じたものである。

近年盛んになった、計算機を活用した開発 (**CAE; Computer Aided Engineering**) においては、目的変数が説明変数の解析的な関数としては得られず、コストの高い実験やシミュレーションで計算せざるを得ない問題が数多く存在する。そのような問題の最適化はブラックボックス最適化と呼ばれており、様々な手法が提案されている。本研究で用いる代理モデル法 (**surrogate-based method**) は、実験・シミュレーションの代わりに代理モデルによって目的変数を回帰し、その最適化によって決定された測定点のデータを加えた学習によって代理モデルを更新するプロセスを繰り返す手法である。本研究で代理モデルとして用いる **FM** は、説明変数の2次以下の項の線形和で目的変数を回帰するモデルであるが、その最適化は **NP 困難** であり、説明変数の次元が高い場合の最適化は通常の計算では難しい。本論文で提案された手法 (**FMQA**) は、**QA** によって実用的な時間での **FM** の最適化を可能とすることを目指すものである。

本論文では、**FMQA** を **QA** 専用機である **D-Wave** を用いて実装し、**SiO₂** および **SiC** を **polymethyl methacrylate (PMMA)** に配置したメタマテリアルの最適設計問題に適用した。異なった材料を人工的に組み合わせたメタマテリアルは、天然の素材では得られない特徴を持つ場合があることが知られている。設計の評価は、計算コストは高いが精度の高いシミュレーションによって作成されたデータを用いて行われ、既存の手法と同等以上の性能を得ることに成功した。また、網羅的な探索では説明変数の数に対して計算時間が指数的に増加するのに対し、**FMQA** では線形を下回る計算時間を実現した。これらの結果は、ブラックボックス最適化において、問題に依存する困難が生じる可能性はあるものの、**FMQA** の有用性を示すものである。

本論文では、限られたデータから高次元のモデルを推定するための、局所 **FM** モデルについても論じている。説明変数がとりうる値の全域に対して代理モデルを最適化し、次の測定データ点を決定していく方法では、そのデータ点の近傍での代理モデルの精度に限界がある。本論文では、最適化する代理モデルを説明変数について局所的に構築し、それらを組み合わせる手法を提案した。局所モデルを用いた **FMQA** は、3次の2値組み合わせ最適化問題に適用され、局所モデルがより精度の高い最適化を行えることが示された。本論文ではさらに、インシリコ創薬で重要な、定量的構造活性相関 (**QSAR**) の予測問題における特徴選択に **FMQA** を適用し、局所モデルを用いた **FMQA** によって、他の手法よりも高速に良い解を得ることが示された。

以上のように、本論文は、実世界で必要となるブラックボックス最適化問題を、**QA** を用いることによって、実用的な時間と精度で解くことが期待できる手法を提案して実装し、その有用性を示すことに成功した。

よって本論文は博士（科学）の学位請求論文として合格と認められる。

以上1383字