

社工英語レポート課題一回目

経営工学専攻 金澤輝代士担当

202410178 今村隼人

課題 1

論文情報（著者、タイトル、雑誌名、巻、最初のページ、年）

Marwin H. S. Segler, Mike Preuss & Mark P. Waller

Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI

Nature,555,604,(2018)

1,この論文で扱う分野はどういう分野？ 代表的な既存研究はなんですか？

小分子有機化合物の合成計画を行う際、化学者は再帰的に単純な前駆体に変換していく逆合成という手段を用いる

2,もうすこし詳細な説明（動機・成果）があれば書いてください。

逆合成において抽出法と手設計されたヒューリスティックによるコンピューターの補助は価値のあるツールであった。

3,この論文で解決される未解決問題（Research question）は何ですか？

コンピュータによる逆合成は計算が遅いということと結果の質が低いという問題があった。

4,本論文の結果を1行でまとめて説明してください。

モンテカルロ木探索と AI を用いることで上記の問題を解決した

5,具体的に結果を箇条書きで説明してください

モンテカルロ木探索と探索を導く拡張ネットワークとフィルターネットワークを組み合わせることで有望な逆合成ステップを事前選択できるようにした。

6,本論文の解釈/インパクトを述べてください。

この手法を用いることで既存のコンピューターによる手法に比べて2倍の分子数を扱えるようになり、30倍の速度で問題を解けるようになった。

7,一般向けに風呂敷を広げて、広い視野から示唆・解釈を述べてください。

化学者は平均的に今回の手法で発見された経路を既存の報告された文献の経路と同等とみなした

課題 2

論文情報（著者，タイトル，雑誌名，巻，最初のページ，年）

David Layden, Guglielmo Mazzola, Ryan V. Mishmash, Mario Motta, Pawel Wocjan, Jin-Sung Kim, Sarah Sheldon

Quantum-enhanced Markov chain Monte Carlo

Nature,619,282,(2023)

1,この論文で扱う分野はどういう分野？ 代表的な既存研究はなんですか？

量子コンピューターは古典的コンピューターと比較してより早く計算問題を解くことができると言われている。しかし現在の量子コンピューターはかなりのエラー率とその小さなサイズによって制限されている。

2,もうすこし詳細な説明（動機・成果）があれば書いてください。

量子コンピュータのスピードアップの実証に向けた取り組みは古典的に困難で現在の量子コンピュータのハードウェアに自然に適合する、例えば複雑だが有用でないような確率分布からのサンプリングの問題に焦点を当てている

3,この論文で解決される未解決問題（Research question）は何ですか？

MCMC 法を用いたサンプリングが量子ハードウェアでも正しい分布に収束できるか、また古典的手法より高速に収束できるか。

4,本論文の結果を 1 行でまとめて説明してください。

現在のハードウェアに適している量子アルゴリズム導入し古典的手法よりも高速に収束することを実験的に確認した、

5,具体的に結果を箇条書きで説明してください

実験では我々の量子アルゴリズムは一般的で古典的なほかの MCMC 法より早く収束した。特異なノイズに対しての頑健性を示した。シミュレーションでは我々は 3 乗から 4 乗の間の多項式的な速度の向上をほかの MCMC 法と比べて観測した。

6,本論文の解釈/インパクトを述べてください。

この経験的な速度向上がより大規模なスケールでも持続すれば機械学習、統計物理学、数値最適化問題におけるサンプリング問題が引き起こす計算上のボトルネックを緩和できる可能性がある。

7,一般向けに風呂敷を広げて、広い視野から示唆・解釈を述べてください。

このアルゴリズムは量子コンピューターが単に困難だけでなく、有用なサンプリング問題を解決するための新たな道を開く

課題 3

論文情報（著者，タイトル，雑誌名，巻，最初のページ，年）

Daniel J. Mankowitz, Andrea Michi, Anton Zhernov, Marco Gelmi, Marco Selvi, ...
David Silver

Faster sorting algorithms discovered using deep reinforcement learning

Nature,618,257,(2023)

1,この論文で扱う分野はどういう分野？ 代表的な既存研究はなんですか？

ソートやハッシュ化のような基本的なアルゴリズムは一日当たり何兆回も使われている。計算需要の成長につれてそれらのアルゴリズムの性能をできる限り高めることが非常に重要になっている。

2,もうすこし詳細な説明（動機・成果）があれば書いてください。

過去においては目覚ましい進歩が達成されてきたが、これらのルーチンをさらに向上させることは人間の化学者にとっても計算機的手法にとっても困難なことが判明している。

3,この論文で解決される未解決問題（Research question）は何ですか？

AI が今まで知られていないルーティンを発見することで現在の最先端技術を超える可能性があるか。

4,本論文の結果を1行でまとめて説明してください。

深層強化学習で作られた AlphaDev が既存の人間によるベンチマークをより優れた小さなソートアルゴリズムをゼロから見つけた

5,具体的に結果を箇条書きで説明してください

より優れたソートアルゴリズムを発見することを一人用のゲームという課題として設定した。人間によるベンチマークをより優れた小さなソートアルゴリズムをゼロから見つけた。このアルゴリズムは LLVM 標準 C++ sort library に統合された。

6,本論文の解釈/インパクトを述べてください。

ソートライブラリの変更は強化学習を用いて自動的に発見されたアルゴリズムによるコンポーネントの置換を表しています。

7,一般向けに風呂敷を広げて、広い視野から示唆・解釈を述べてください。

この手法の汎用性は追加の領域における結果も期待できる。