

ゲート式量子コンピュータと 機械学習による高速モンテカルロ計算 —量子コンピュータの乱数生成への応用—

1. 背景

モンテカルロシミュレーション（MCシミュレーション）は、統計力学的な系を数値的シミュレーションによって調べる、汎用的かつ強力で、統計的に不偏な手法である。MCシミュレーションは、統計力学的に与えられた分布から多数のサンプリングを行うことによって、統計的に正しい物理量を得る事ができる。MCシミュレーションとして、様々な手法が提案されているが、代表的な手法がメトロポリス・ヘイスティングス法（MH法）である。

一般に、MCシミュレーションによってサンプリングしたい目標分布を $p(r)$ としたとき、分布 $p(r)$ に従うサンプリングを行うのは容易ではない。MH法は、目標分布 $p(r)$ とは異なる分布 $q(r)$ より高速にサンプリングが可能な提案分布 $q(r)$ を作成し、提案分布 $q(r)$ からのサンプリングを適切に棄却することによって目標分布 $p(r)$ に一致させる手法である。MH法では、提案分布 $q(r)$ が目標分布 $p(r)$ に近いほど棄却率が少なく効率のよいサンプリングを行うことができる。

しかしながら、目標分布 $p(r)$ は対象とする系によって大きく異なる。したがって、効率の良いサンプリングを行うためには、各系に合わせて提案分布 $q(r)$ をサンプリングが容易で、目標分布 $p(r)$ と近くなるように選択する必要がある。自己学習モンテカルロ法の研究では、提案分布 $q(r)$ に調整可能なパラメータ θ をもたせ $q(r; \theta)$ とし、MH法によるサンプリングを行っている間に、同時に機械学習によってより効率的なサンプリングが行えるパラメータを探索するという提案を行った。過去に行われた自己学習モンテカルロ法の研究では、サンプリングが容易でないイジング模型に対して、サンプリングが容易なイジング模型をパラメータ付きで構成し提案分布とした。よって、ある範囲のイジング模型などが効率的となったが、適用範囲は部分的なものにとどまる。様々な系に対してパラメータ付きでかつサンプリング容易となる汎用的な提案分布を構成できれば、自己学習モンテカルロ法の適用範囲はより拡大されると考えられる。

一方で、量子コンピュータ上で量子状態を観測することはすなわち、量子状態の表す確率分布から乱数をサンプリングすることに等しい。また、この観測は高速に行えるため、量子状態の表す確率分布を提案分布 $q(r)$ として扱うことによって自己学習モンテカルロ法応用することができる。本プロジェクトでは、量子コンピュータを使い自己学習モンテカルロ法の高速化を狙って研究、開発を行った。特に、本プロジェクトでは量子フーリエ変換を使って所望の確率分布を表す量子状態を作る。そのため、古典コンピュータ上で行う適応的観測を利用した高速なシミュレ

ションを用いることができ、量子コンピュータの実機に起こるノイズなどの回避することが難しい問題を回避した。

2. 目的

本プロジェクトの目的は量子コンピュータの応用としてMCシミュレーションを高速化する量子フーリエサンプラを開発すること。また、量子フーリエサンプラを広く周知するために論文の作成およびライブラリの公開を行うこと。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトで開発した量子フーリエサンプラはモンテカルロシミュレーションを任意の確率分布の乱数生成を効率化することで高速化することを目的としている。量子フーリエサンプラは実機の量子コンピュータを利用して乱数を生成することもできるが、本プロジェクト内では適応的観測を用いた量子フーリエ変換の高速なシミュレーションを実装し使った。量子フーリエ変換を用いた乱数生成は単体では1次元の乱数しか生成できないが、量子フーリエ変換と機械学習器を使って多段化させることで、多次元の乱数生成を可能にする量子フーリエサンプラを実現した(図2)。本プロジェクトでは、量子フーリエサンプラの性能を確かめるための実験及びその論文の執筆も行った。図2は実験の結果の一部である。この図で Identity, LBLR, NBLR, NN は機械学習器を示し、Target は目標分布の形を示す。この実験で、量子フーリエサンプラを使った乱数生成は一様分布を使った乱数生成に比べて2倍以上効率が良くなることがわかった。

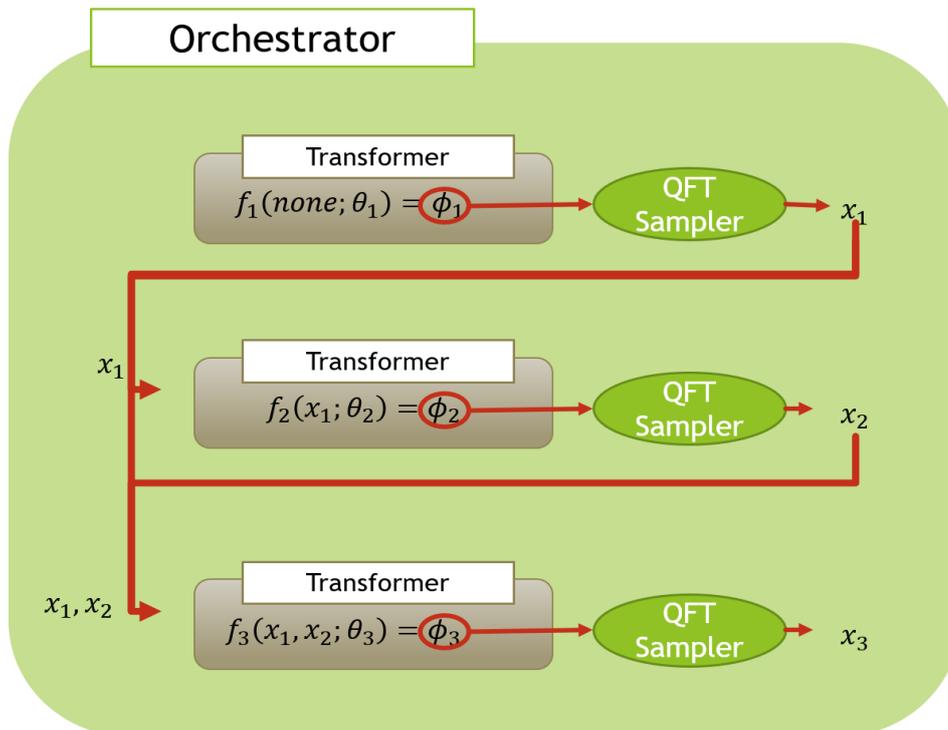


図1 本プロジェクトのサンプラの構造図

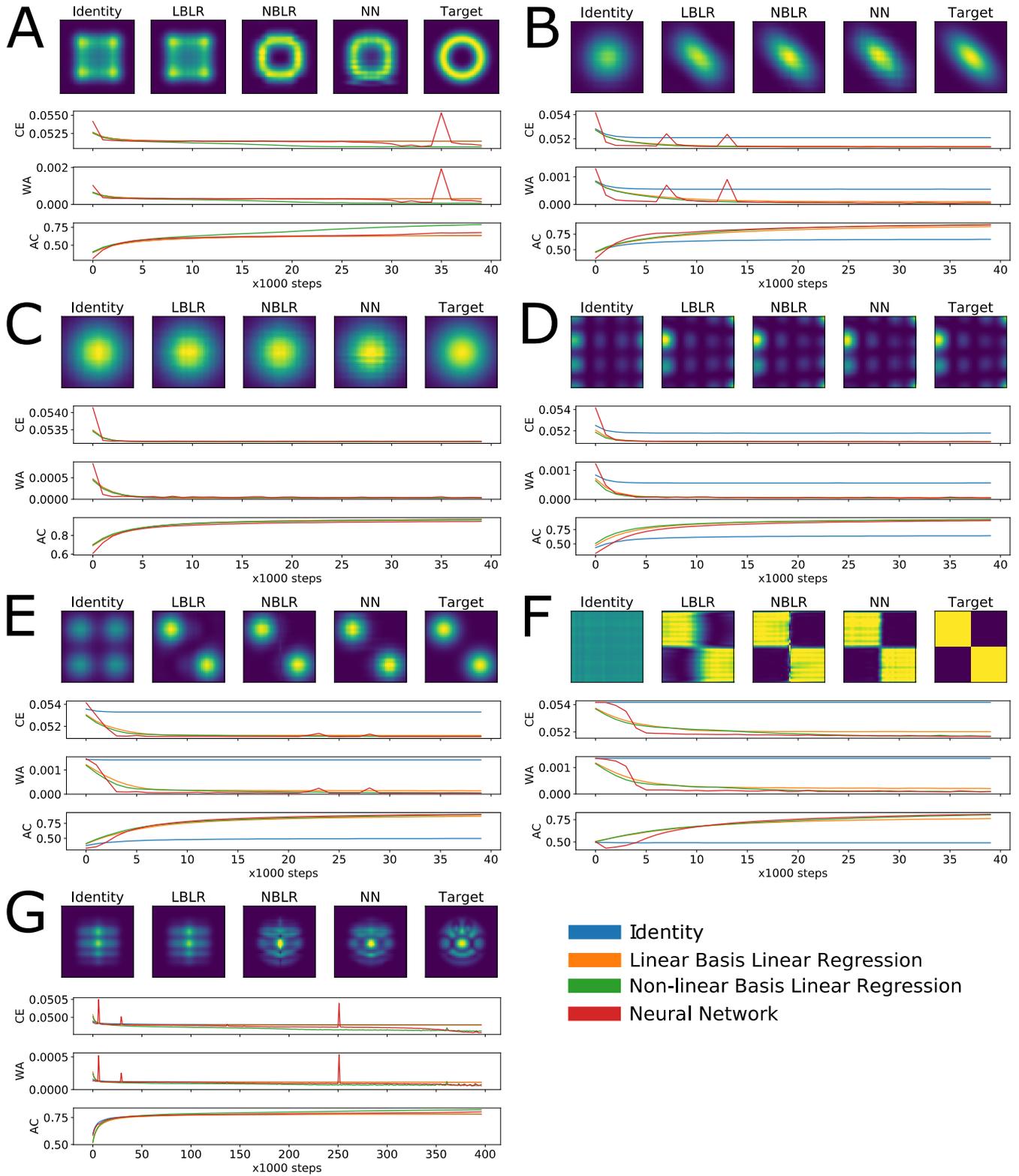


図 2 テスト用の 2次元目標分布に対する結果

4. 新規性・優位性

まず量子コンピュータをMCシミュレーションの乱数生成に応用するという新規性がある。量子コンピュータは通常その重なり合わせを使った計算に注目されがちで

あるが、本プロジェクトは量子の観測がサンプリングと等価であることに着目し、サンプリング効率の面で、従来の古典コンピュータを用いた乱数生成に比べて2倍ほど良いことを実験によって示した。また、量子コンピュータをサンブラとして使うためにはサンプリングを1次元ずつ行うことが望ましいが、それを使い多次元のサンプリングを行うために図 1のような1次元のサンブラを数珠つなぎの構造をもたせた。このような構造を持つことで1次元のサンブラを使って多次元の確率分布からサンプリングを行うことが可能になった。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

まず本プロジェクトは十分な応用例のない量子コンピュータに対して今までと異なるMH法の提案分布としての応用例を示した先行研究である。これによって量子コンピュータへの関心を高めるだけでなく、量子コンピュータの研究が活発になる。また、このプロジェクトで得た研究そのものもMH法を古典コンピュータに比べて2倍効率化させた。そのため、MH法利用する研究機関や企業の研究開発が加速し、創薬や材料開発といった社会へのインパクトも期待できる。

6. 氏名（所属）

- 遠藤克浩（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）
- 中村太一（慶應義塾大学大学院 理工学研究科）

（参考）関連 URL

- <https://github.com/IntenF/QFTSampler>