

動的回路を用いた効率的な量子機械学習アルゴリズムの開発 —動的回路による量子機械学習のリソース効率化—

1. 背景

量子計算は現在、従来の計算方法を凌駕する性能を期待され世界的で研究が進められている。この枠組みで機械学習を実行し優れた結果を得ようとする試みが量子機械学習である。しかし現状、量子機械学習を含め多くの画期的な量子アルゴリズムは量子コンピュータ実機のノイズや量子ビット数の制限などから実用化されていない。

これらの現状を踏まえ我々が注目したのが動的回路 (Dynamic Circuits) である。これは近年 IBM の量子コンピュータ上で使用可能になった新機能であり、測定操作を量子回路の中間に持つてくることで、測定後の計算を動的に変化させることができる。例えば「測定後の量子ビットをリセットし再利用する機能」を使用することで、アルゴリズムの実行に必要な量子ビット数を削減し、計算過程のノイズを緩和することができる。しかし動的回路の性能については十分に議論が尽くされておらず、特に量子機械学習に動的回路を適用する先行研究は極めて少ない状況であった。

2. 目的

本プロジェクトの目的は、動的回路を量子機械学習手法に積極的に導入することで、量子機械学習アルゴリズムの改善および新規開発を行うことである。動的回路の利点を最大限生かすことで、効率的に実行可能なアルゴリズムの開発を目指す。具体的には、まず動的回路に関する先行研究の調査と動作の解析を行い、動的回路を用いたモデルの提案を行う。その後提案手法を実装し、性能評価とさらなる改善を行う。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトの成果は大きく分けて 2 つである。それぞれ分割して記述する。

3.1 既存の量子機械学習手法の改良

動的回路の機能を用いることで、量子ビット (以下 qubit) を早期に測定し、リセットして再利用することができる。この機能を「qubit リセット」と呼ぶことにする。またこの qubit リセットを用いて回路を等価に変換し、アルゴリズムの実行に必要な qubit 数を削減することができる。これを「qubit 数削減手法」と呼ぶことにする。この qubit 削減手法の例を図 1 に示す。あるタイミングより後は使用されない 1 番上の qubit を早期に測定しリセットすることで、一番下の qubit として再利用できる。つまり qubit 数削減により、実行時に必要な qubit 数が 3 個から 2 個に削減できる。本プロジェクトでは、既存の量子機械学習手法である量子畳み込みニューラルネットワーク (Quantum Convolutional Neural Network、以下 QCNN) に着目し、理論面と実装面から、qubit 数削減がこのアルゴリズムに与える影響についての解析を行った。

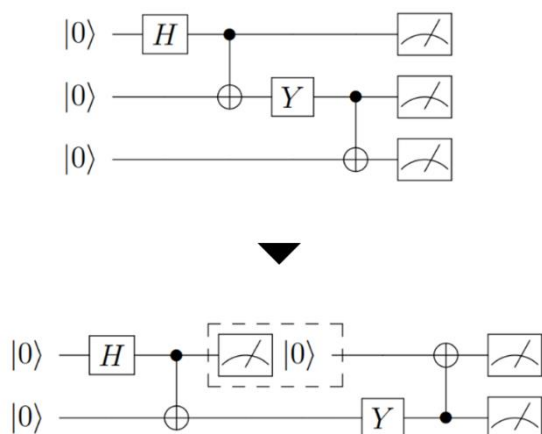


図 1: qubit 数削減の例

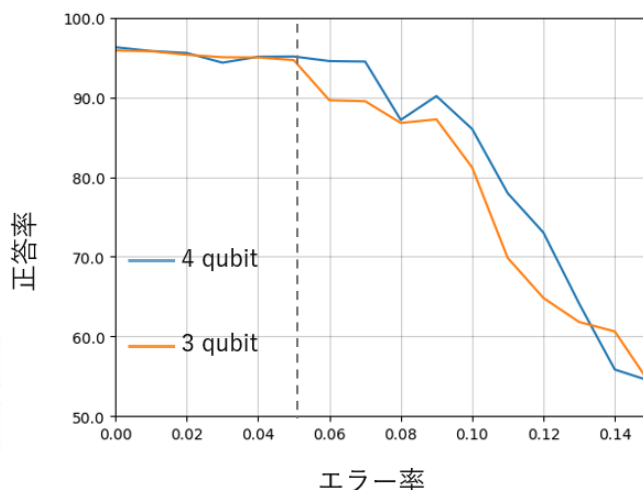


図 2: それぞれの回路における正答率

理論面では、qubit 数削減手法を用いることで、QCNN がある仮定のもと指数関数的に効率良く実装できることを示した。例えば実装に約 10 億 qubit が必要な QCNN を考えた場合、提案手法ではわずか 58 qubit で実装可能である。その分実行時間が長くなる等のデメリットは存在するが、実機における量子機械学習アルゴリズムの実行可能性の観点から考えるとこの結果は非常に有益なものである。

実装面では、qubit 数削減手法が QCNN の性能に与える影響を解析した。量子コンピュータ実機の計算時に乗るノイズの影響は量子回路の実行時間が長いほど大きく、qubit 削減手法によって実行時間が伸びることで結果がノイズに曝されやすくなる。つまり、ノイズのある環境では、qubit 数削減手法によって QCNN の性能は悪化する。この影響について詳細に解析するため、我々はノイズの影響を含めた性能評価のフレームワークを開発した。これにより、qubit 削減手法によって増加したノイズが QCNN の性能に与える影響を定量的に評価することが可能になった。実際に 4 qubit の QCNN を 3 qubit に削減したところ、図 2 に示すように分類問題の正答率は悪化傾向を示した。この傾向はノイズの強さ（横軸のエラー率）の増加に伴い顕著になる。一方、この性能の悪化は学習時の量子回路の実行回数やパラメータの更新回数を増やすことで実際に回復可能であった。より一般的な解析は今後の課題となるが、今回の結果は qubit 数削減による性能悪化の緩和可能性を示唆するものだと考えられる。

3.2 新しい量子機械学習手法の開発

また動的回路の利点を生かした新しい量子アルゴリズムとして、我々は**拡散モデル (Diffusion Models)**をベースとした新しい量子状態生成モデルを開発した。

生成モデルとはデータを生成できるモデルであり、拡散モデルはその一種である。拡散モデルでは、まず拡散過程（ノイズを加えて徐々にデータを壊していく過程）と対応する逆拡散過程（ノイズから徐々にデータを復元していく過程）を考える。この逆拡散過程をニューラルネットワーク(以下 NN)によって近似的に再現することで、ノイズからデータをサンプリングする手法が拡散モデルである。

同様のことを量子状態の空間で考えると図3のようになる。球表面の1点が量子状態データ1つを表しており、各点が独立に摂動することでデータ点が従う確率分布（データ分布）は徐々に一様なノイズ分布へと変化していく。これが左から右への拡散過程である。これに対応する逆拡散過程を、NNの代わりに量子機械学習の枠組みで実現するのが我々の提案手法である。具体的には、図4のような回路を使用する。

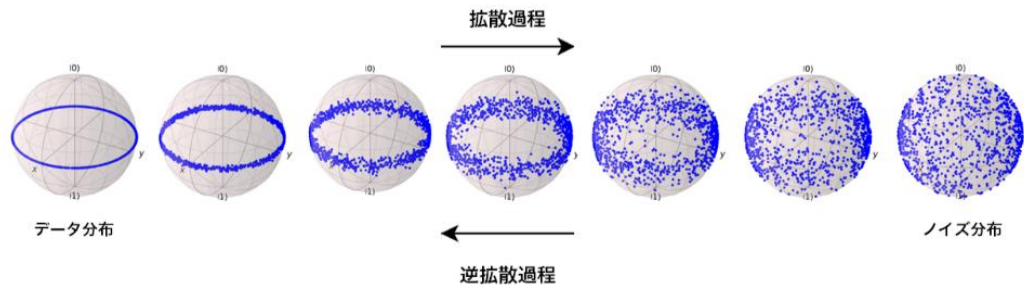


図3： 量子状態空間における拡散過程と逆拡散過程

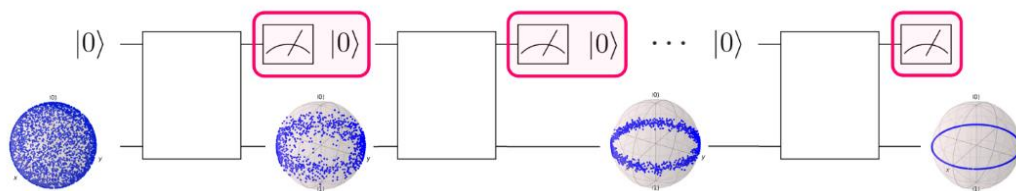


図4： 逆拡散過程の量子回路の概略図

図4の上の行は補助系であり、下の行が注目系である。補助系と相互作用させて測定する操作を用いて注目系の分布を変換する。本来この回路は多数の補助系を必要とするが、qubitリセットの機能（赤枠部分）を用いることで効率的に実装が可能である。このモデルを用いて実際に学習および生成を行った結果を図5に示す。左側のデータ集合に似た位置にサンプルを生成できているが、それ以外の位置にも多く状態が生成されている。モデルの学習性能の向上については今後の重要な課題である。

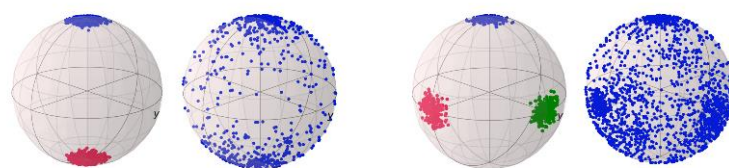


図5： 提案したモデルにおける生成結果

4. 新規性・優位性

動的回路の機能は従来、量子誤り訂正や量子テレポーテーションなどのごく限られた用途で用いられてきた。本プロジェクトにおける開発および解析は動的回路を量子機械学習手法に積極的に適用しようとするものであり、まだ有用性が十分に議論されていないような使用法について探索したことの価値は大きいと考えられる。

また、「拡散モデルをベースとした新しい量子状態生成モデル」についてはそれ自体が新規性のあるアルゴリズムである。この手法はプロジェクト期間中に発表された先行研究（ <https://arxiv.org/abs/2310.05866> ）の類似手法であるが、この手法との最も大きな差異は学習方法にある。

逆拡散過程の学習は図 4 における白い部分の演算のパラメータを調整することで行うが、先行研究の手法は左から順に 1 つずつ学習していくため非常に学習効率が悪い。一方我々の提案手法では白い部分の演算を各ステップ毎に独立に学習するため学習の並列化が可能である。また各ステップにおける学習は図 6 のようになっており、学習対象である「1 つ前の時刻に戻す写像」を「始めの時刻に戻す写像(緑実線)」と「拡散過程(緑点線, 学習不要)」に分割することにより学習可能性を向上させた。

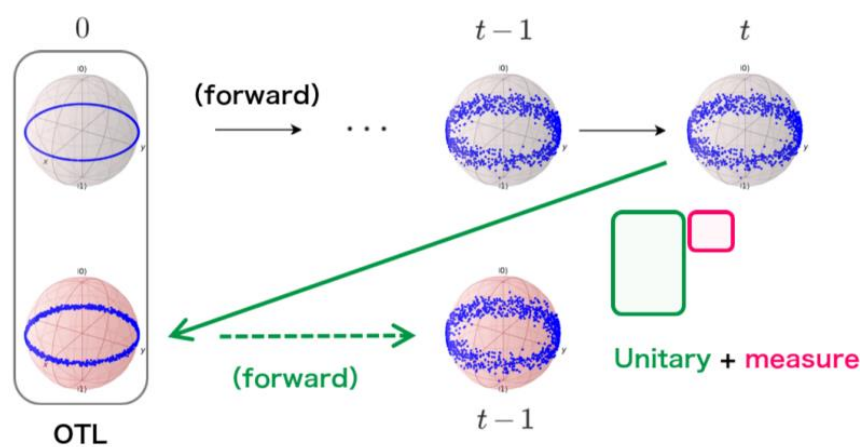


図 5 : 提案手法における学習過程

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクトでは量子機械学習アルゴリズムについて、動的回路の機能を用いた既存手法の解析および新しい手法の開発を行った。現状の量子コンピュータ実機はノイズの影響や計算資源の少なさから実用性に乏しいが、近い将来有用な性能を発揮することはほぼ確実である。本プロジェクトのような実機実行可能な機能を見つめた開発によって、量子機械学習の活用の幅をより広げていくことが可能だと考えられる。我々が解析および開発した量子機械学習の使用を加速するノウハウは量子機械学習アルゴリズムの研究を行うあらゆるユーザーが使用できる有益なものである。今回は動的回路を用いた提案手法の有効性を限られた規模においてのみ示したが、実際にはもっと巨大な系についても成立することが予想される。我々の開発した手法が量子機械学習そのものの狭い学問領域にとどまらず、様々な領域において関わり社会問題の解決につながることを期待される。

6. 氏名 (所属)

風間 晴陽 (慶應義塾大学 大学院理工学研究科)

鎌田 航平 (慶應義塾大学 大学院理工学研究科)