

確率過程を対象とする予測のための量子計算機を用いた リザーブシステムの構築と実装 —量子リザーブでノイズを含む時系列データを予測しよう—

1. 背景

近年、エッジデバイスでの機械学習モデルの開発が盛んに行われており、将来的に訪れるであろう IoT 社会に向けた研究や開発が進んでいる。その中でも「リザーブ計算」はエッジデバイスでも精度を保ちながら高速に学習が可能な機械学習モデルとして、時系列データ予測の分野で関心が高まっている技術である。一方、量子計算機(量子コンピュータ)も近年利用が可能になりはじめた技術の 1 つであり、次世代のコンピューティング技術として注目されている。

また、近年はビックデータの到来によってデータの利活用が様々な分野で行われるようになってきており、たとえば株価データや気象データなど私たちの生活に身近なデータに対する解析や予測の手法が活発に研究されている。しかしそのようなデータの多くはノイズを多く含む時系列データであり、一般的に解析をするのが難しい(リザーブ計算の分野でベンチマークとして広く用いられているデータはノイズを含まない時系列(決定論的時系列)である。図 1 参照。)。そこで本プロジェクトでは上述した 2 つの技術を組み合わせて、このノイズを含むデータ(以下では「確率過程」と表記)をうまく予測することができないかと考えた。

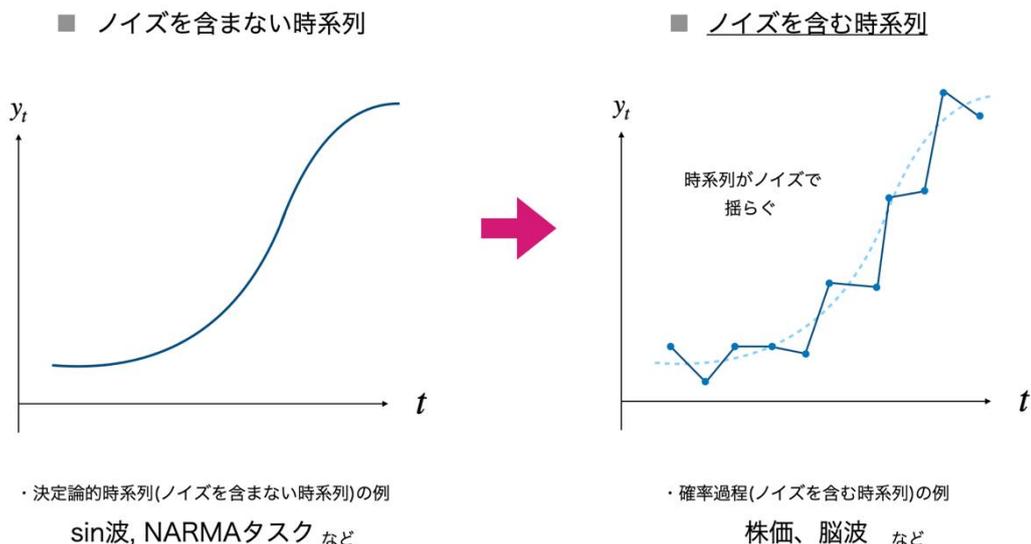


図 1 ノイズを含まない時系列とノイズを含む時系列

2. 目的

本プロジェクトは、リザーバ計算と量子コンピュータを組み合わせて確率過程で記述される時系列データを予測する手法を開発し、誰でも利用可能な Web アプリケーションの開発を目指した。リザーバ計算の中に量子コンピュータを組み込むために本プロジェクトではリザーバ計算の一分野である「物理リザーバ計算」に注目した。物理リザーバ計算はリザーバ計算ではしばしば問題になるモデルの表現力の低さを、リザーバ(機械学習モデルの中間層)を実際の物理系で置き換えることによって解決する手法である。この際リザーバとして複雑で表現力の高い物理系を選択することができればモデルの精度は高くなるが、本プロジェクトではこの物理系に量子コンピュータを選択した。量子コンピュータは物理系としては十分複雑であると期待ができるだけでなく、今回取り扱う確率過程とも相性がいいと考えた。量子コンピュータは古典コンピュータと異なり、出力がビット列ではなく、確率分布の形で得られる(量子計算機は図2で表されるような量子回路というものをを用いて実装され、回路の実行時に測定という操作を行うことで0と1の値が確率的に得られる。量子計算はアルゴリズムを実行するためにこの回路を複数回実行して結果を集計するので確率分布の形で出力結果を得る。)。多くの量子計算機の上で実行されるアルゴリズムは出力を確率分布の平均値を用いて演算を行うが、確率分布を出力することができるということは分散といったさらに高次の統計量も扱うことが可能ということである。そこで量子計算機をリザーバとして使用しその出力から得られる分散といった値を使うことで確率過程を効果的に回帰することができるのではないかと考えた。本プロジェクトは、この「量子リザーバと確率過程の相性の良さ」を利用して従来の古典コンピュータよりも効率的に学習することができるリザーバシステムの構築を目指した。

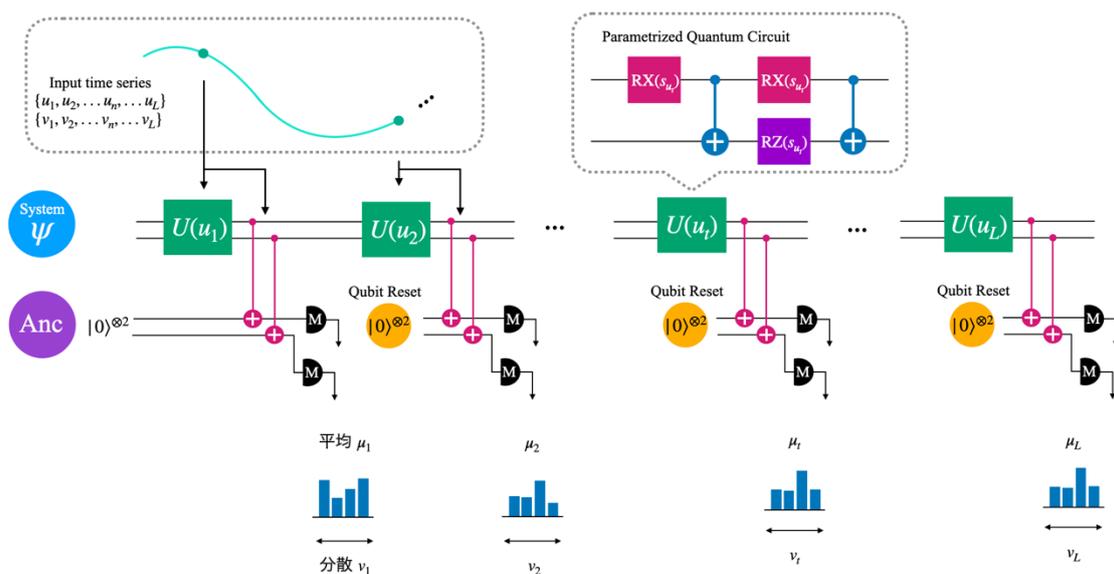


図2 本プロジェクトで提案する量子リザーバシステム

3. ソフトウェア開発内容

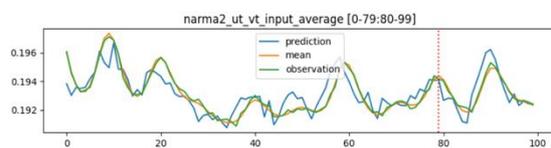
本プロジェクトでは大きく 2 つの研究開発を行なった。

① 確率過程を予測する量子リザーバーの考案とベンチマーク実験

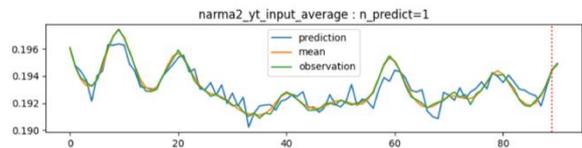
まずは、確率過程を予測する量子リザーバーの開発に着手した。本プロジェクトでは本物の量子コンピュータを契約の関係上作成することができなかつたので、量子回路シミュレータを使用し、GPU 計算機上でのモデルの学習を行なった。シミュレータ環境の構築した後、図 2 にある量子リザーバーシステムを Python でプログラムし、そのシステムを検証するために 2 つの実験(実験 A, 実験 B)を行なった。いずれもリザーバーでよく用いられる非線形入出力データである NARMA(Nonlinear Auto Regressive Moving Average)時系列を用いた簡易的なベンチマーク実験であり、実験 A はロボットに取り付けられたセンサから得られるノイズの含まれたデータを用いてアクチュエータの出力を誤差付きで推定する問題、実験 B は現在までの株価や気象データといったノイズを含む時系列データから未来の値を予測する問題を想定した。

実験結果を図 3 に示す。実験 A については、時系列の平均と分散の値をある程度正しく推定することができることが確認できる。実験 B については、 $n = 1$ step 先の値を正しく予測することができることが確認できる。 $n = 2$ についても同様の結果を得ることを確認しており、本プロジェクトでは 2step 先の予測を精度よく行うことができることを確認した。($n = 3$ 以降は学習の精度は悪くなる。)

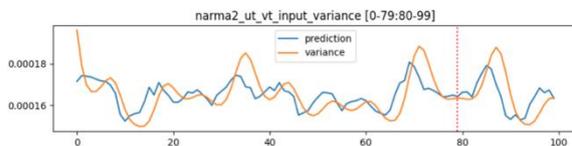
(a) 実験A 平均予測



(c) 実験B 1step先予測



(b) 実験A 分散予測



(d) 実験B 3step先予測

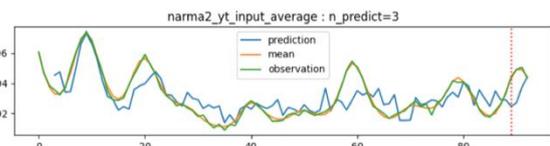


図 3 実験 A、実験 B の結果(いずれも赤の波線より右側が予測)

② 考案した量子リザーバーシステムの Web アプリケーション化

①で作成した量子リザーバーシステムを Web アプリケーションの形として実装し誰でも利用可能な形で公開した。システム全体は図 4 のようなアーキテクチャで設計した。まず、ユーザーが触るフロントエンドの実装として、React と Typescript を使用し、ユーザーが時系列データを入力できるような UI を作成した。次に、ユーザーからのリクエストを受け、実験データをデータベースに一時保存し量子リザーバーのシミュ

レータに実験を依頼する中間サーバを Rust と MySQL を用いて実装した。そして、中間サーバから送られてくる実験リクエストを受け取り、実際にシミュレータを実行するシミュレータサーバの実装を行なった。このシミュレータサーバは Python で記述しており、シミュレータが実行し終わると結果を中間サーバ、フロントエンドの順に送ることでユーザーがクラウドに存在する量子リザーバーにアクセスし、自身のノイズを含む時系列データを予測することができる。

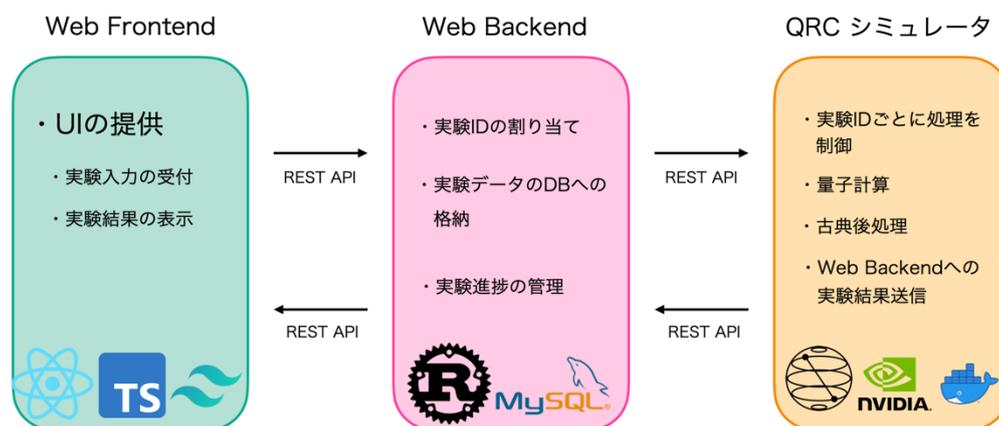


図 4. 設計した Web アプリケーションのアーキテクチャ

4. 新規性・優位性

まず、リザーバー計算の分野において、確率過程を問題として扱っているものは現状少ない。これは確率過程を回帰するのが本質的に難しい問題であり、一般にベンチマークとして多く用いられているのは決定論的時系列と呼ばれる時系列データであるからである。その点で本プロジェクトが提案する確率過程に対するリザーバースキームは新規性がある。さらに、学習を行う際、量子コンピュータから得られる分散という統計量を学習に組み込み、ノイズの情報も学習することを試みているため、古典リザーバー計算よりも効率的にノイズ情報を学習することができ、その点において従来のリザーバースキームよりも優位性があると考えられる。

さらに、量子リザーバー計算はその多くが実験室レベルの実装であり、Web アプリケーションとして公開され、広く一般人が利用するものはほとんどないため、その点でも新規性が高い。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

リザーバー計算のソフトウェアを開発することは、将来訪れることが期待されているIoT 社会において非常に重要である。特に実社会において重要であるノイズを含むデータ(確率過程)である、株価や気象といったデータは一般人にとって興味関心が高いデータであり、それらのデータを少ない計算リソースで正確に学習することができ

れば社会的なインパクトが大きいと考えられる。今回プロジェクトで作成した Web サイトは、今後量子コンピュータを個人で利用する可能性があるすべての人を想定しており、量子計算機(量子リザーバー)が社会に広く普及し受け入れられる近い未来において非常に重要なアプリケーションである。このアプリケーションによってユーザーは従来の古典コンピュータでは計算することが非常に困難である時系列データ予測の問題を量子コンピュータの力を借りて短時間で計算することが可能であると期待される。リザーバー計算の文脈では、量子系の広大な計算スペースと表現力の高さによって今まで計算コスト削減のためにある程度犠牲にしていた精度を HPC(high-performance computing)に代表されるようなハイエンドな古典コンピュータのクラスタよりも高精度に学習することが可能になるかもしれない。また量子計算の文脈では、現在利用可能なノイズが非常に多い量子コンピュータ(NISQ)において、実際に社会応用をすることができるキラーアプリケーションの代表格になる可能性があり、こちらの文脈でも非常にインパクトがある。

6. 氏名 (所属)

安田 俊輝 (慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻物理情報専修修士 2 年)

菱田 快成 (慶應義塾大学理工学部情報工学科 2 年)

亀井 聖斗 (慶應義塾大学理工学部情報工学科 2 年)

(参考) 関連 URL

・ 本プロジェクトで作成し公開した Web サイトの URL

<https://stochastic-process-reservoir.pages.dev/>