

実世界の問題に適用可能な量子特徴マッピング手法の開発 —実験の再現性担保と AI による量子回路自動生成に向けて—

1. 背景

近年、量子コンピュータの進展とともに、その応用領域として機械学習が注目を集めている。量子の特性を活用することで、従来の古典機械学習モデルでは困難であった複雑な特徴の学習や、大規模な計算を高速化できる可能性が期待されている。しかし、量子機械学習が古典機械学習に対して優位性を発揮する具体的な領域は未だ明確ではなく、その実用性を評価するためには、ベンチマークデータセットと実世界のデータセットの双方に対する検証が不可欠である。

量子機械学習の研究・開発には、再現性を担保した効率的な実験管理が求められている。現在、古典機械学習で用いられている実験管理ツールが利用されているが、量子デバイスの切り替えや量子回路の実装など、量子機械学習特有の課題には十分に対応できていない。そのため、他の開発者や研究者が再現性を確保しながら新たな量子機械学習モデルを開発するには、多大な手間やコストが発生している。

さらに、量子機械学習にはソフトウェアだけでなく、ハードウェア面での課題も存在する。現在の量子コンピュータは NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスが主流であり、ノイズを含む小～中規模の計算しか実行できない。そのため、古典機械学習で用いられているような大規模なモデルを量子コンピュータ上で構築することは現時点では困難であり、古典コンピュータとのハイブリッドな手法が模索されている。その一例として、量子特徴マップを用いることでデータを高次元空間に写像し、カーネルベースの機械学習モデルと組み合わせる手法が注目されている。しかし、量子特徴マップの設計には高い専門性が求められるうえ、シミュレータを用いた試行錯誤が必要なため、開発には多大な時間を要する。そのため、量子機械学習のさらなる発展には、ハードウェアの制約を考慮しながら、効率的かつ再現性の高い実験環境を構築し、量子特徴マップの設計や最適化を支援する仕組みが不可欠である。特に、試行錯誤のプロセスを体系的に管理し、蓄積された知見を活用することで、量子機械学習モデルの開発を効率化する手法が求められている。こうした課題に対処することは、量子機械学習の実用化に向けて重要ステップの一つだと考える。

2. 目的

このような背景から、量子機械学習の実世界への応用においては、ハードウェアの進展だけでなく、ソフトウェアの観点からも大きな貢献ができる可能性がある。その一つとして、実験管理ツールの開発を通じて量子機械学習分野の発展を目指す。具体的には、各実験に一意の ID を付与して管理し、再現性を担保することで、他の開発者や研究者が容易に過去の試行を再現・検証できる仕組みを構築する。この実験管理ツールは、量子機械学習研究におけるノウハウの蓄積基盤となり、分野全体の生産性向上に寄与することが期待される。さらに、開発した実験管理ツールに蓄積された試

行錯誤のログを近年目覚ましい速度で進歩している LLM (Large Language Model) に入力することで、問題設定に適した量子特徴マップを自動生成し、繰り返し改善を行う自律的なシステムを構築する。このシステムにより、量子特徴マップ設計における探索プロセスを大幅に効率化し、より高性能なモデルの創出につなげることを目指す。

3. ソフトウェア開発内容

量子機械学習のための実験管理ツール

量子機械学習の実験を再現可能な形で管理するツール QXMT (Quantum Experiment Management Tool) を開発した。QXMT は「データセット」「デバイス」「量子特徴マップ」「評価」の 4 つのコンポーネントで構成され、初心者から専門家まで幅広い利用者が容易に自身のプロジェクトに導入することができる。実験毎にフォルダが作成され、各試行は一意の ID と共に自動で記録される。ID にはコードのバージョン情報などが紐づけられ、過去の実験を容易に再現できる。実験の設定は YAML 形式の config ファイルで管理され、データセットの取得や前処理、デバイスの切り替えを統一的に設定可能である。PennyLane を通じて複数の量子シミュレータを利用できるほか、IBM Quantum・Amazon Braket などの実機提供プラットフォームにも対応し、量子特徴マップの設計を支援する機能を備える。また、分類・回帰タスクの評価指標の自動計算や可視化機能を提供し、実験結果を詳細に記録・分析できる。開発したツールは、2024 年度の量子ソフトウェア勉強会で約半年間利用していただき、様々な習熟度の参加者が最終的にオリジナルの量子特徴マップを設計し、機械学習モデルを構築や評価ができるまでとなった。

LLM を用いた量子回路の自動生成

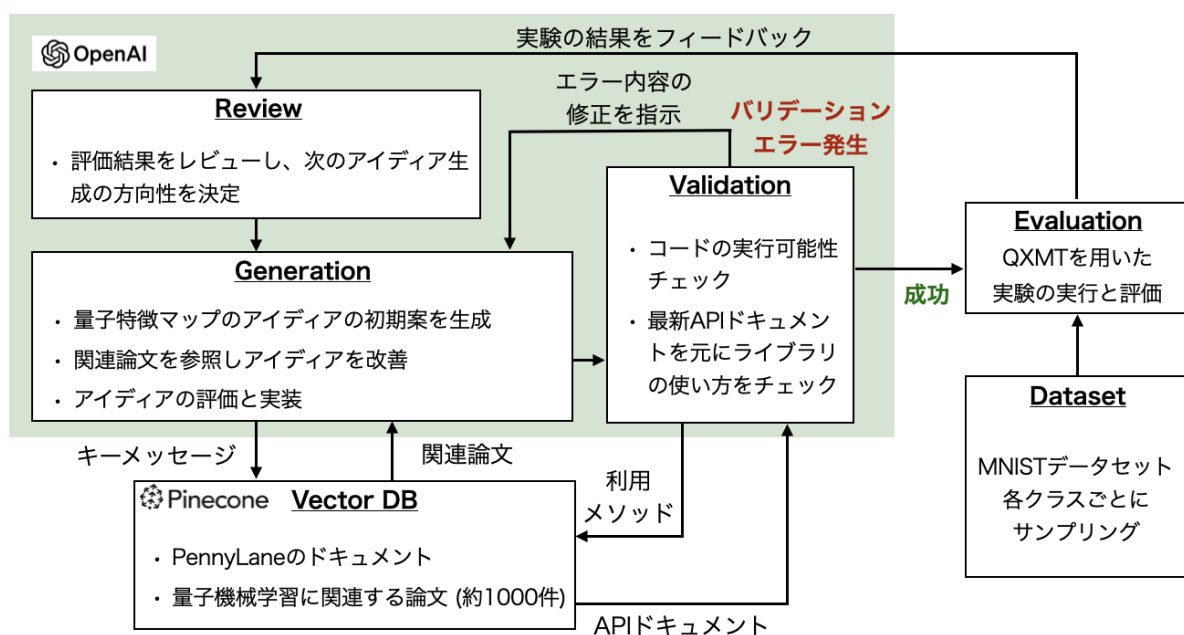


図 1：量子回路自動生成システムのアーキテクチャ

量子回路の自動生成システムを開発し、MNIST データセットを用いて検証を行った。システムは Generation、Vector DB、Validation、Evaluation、Review の 5 つのコンポーネントで構成され、LLM は OpenAI 社が提供するモデルを活用している（図 1）。Generation では、LLM を用いて量子特徴マップのアイデアを生成し、論文データベース（Vector DB）を参照して改善を行う。生成されたアイデアは、Validation にて Python の構文チェックや PennyLane の API との整合性を確認し、修正を行いながら、実行可能なコードへ変換する。Evaluation では、本プロジェクトで開発した実験管理ツールである QXMT を活用して QSVM の分類精度を評価する。Review では、フィードバックされた実験ログを分析して次のアイデア生成に反映する。このプロセスを 15 トライアル繰り返す、量子特徴マップの段階的な改善が行えることを確認した。

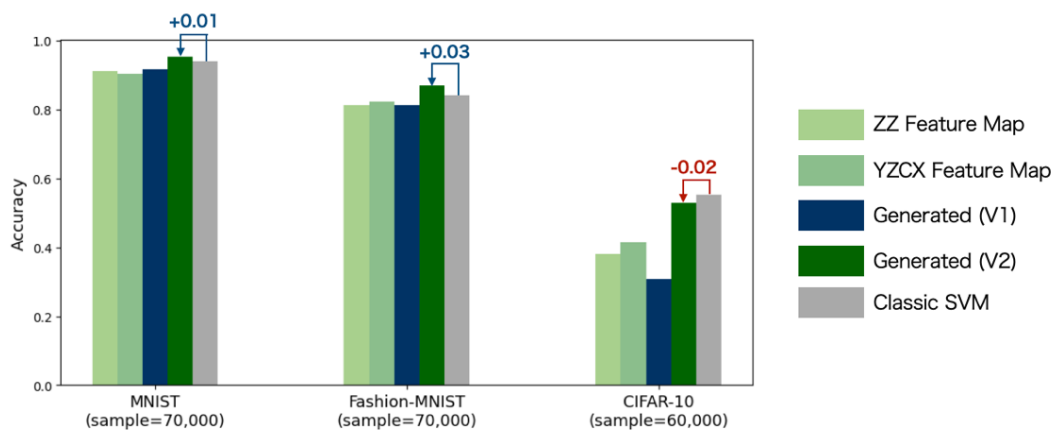


図 2：量子特徴マップの精度評価結果

生成された量子特徴マップの汎用性を評価するために、代表的な量子特徴マップと古典 SVM に対して、別のベンチマークデータセットを用いて検証を実施した（図 2）。その結果、生成された量子特徴マップは他の代表的な手法と比較しても高精度であり、古典 SVM に匹敵する性能を示した。また、LLM による回路生成プロセスにおいて、MNIST データセットに対して過剰適合することなく、他のデータセットに対しても適用可能な汎用性を備えていることが確認できた。

4. 新規性・優位性

従来、量子機械学習の実験は、開発者が自身の方法で管理したり、古典機械学習向けのツールを流用したりするなど自由度が高かった。しかし、その反面、他の開発者が同じ実験を再現することが困難であった。特に、量子機械学習にはランダム性の高さなど特有の課題があり、これに特化した実験管理ツールの開発は、今後の研究・技術の発展を加速させる重要な要素となると考える。

また、LLM を用いた量子回路の自動生成に関しては、古典機械学習では目的関数の探索などに LLM を活用する先行研究が存在するものの、量子回路の生成に関する事例は十分に確立されていない。さらに、LLM は量子分野に関する内部知識が不十分であり、細かなチューニングや外部知識の活用が不可欠だった。これらの知見やノウハウは、今後、新たに量子機械学習に取り組む開発者にとって有益な支援となると考える。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

開発した実験管理システムは、煩雑な設定を伴う実験に対して一意の ID を付与することで、開発者の追加コストを最小限に抑えながら再現性を確保することを目的としている。さらに、データセットの準備、機械学習モデルの選択、評価方法を設定ファイルで管理することで、ライブラリの差分やデバイスの切り替えを統一されたインターフェースで行えるようにし、開発者が実験そのものに集中できる環境を整えた。

このようなツールを提供することで、新たに量子機械学習の分野に参入する研究者や、プログラミングに不慣れなユーザーでも、容易に再現性を担保した実験サイクルを回せるようになる。その結果、量子機械学習の研究開発が加速し、より多くの実験データが蓄積されることで、分野全体の発展に貢献したい。

さらに、蓄積された実験データを活用することで、量子機械学習モデルの最適化や、より効果的な量子特徴マップの設計が可能になる。特に、LLM を活用した自動設計・改善のプロセスでは最適化のための方針を数式で表現する必要はなく、自然言語を用いて指示することができるため、理論を専門としない人でもアイデアをもとに新たな量子回路の設計が可能となる。これにより、量子機械学習の適用範囲が広がり、産業や学術分野における実用化が促進され则认为。

最終的には、再現性を担保した実験管理ツールと量子回路の自動生成システムが人と AI をつなぎ、多様なバックグラウンドを持つ人々が新たな知見を生み出す機会を支援できるプラットフォームとなることを期待する。

6. 氏名（所属）

作花 健也（フリーランス）

（参考）関連 URL

QXMT の GitHub : <https://github.com/Qyusu/qxmt>