

機械学習を用いた NISQ アルゴリズム向けの誤り補償手法の開発 —量子コンピュータで生じるノイズの低減—

1. 背景

量子コンピュータは、古典コンピュータが実行不可能な計算を可能にすると期待されている。最近では、NISQ(Noisy Intermediate Scale Quantum)デバイスと呼ばれる数年以内の実用が期待される量子コンピュータを用いて、古典コンピュータでは効率よく実行できないタスクを実行できると報告した研究が大きな注目を浴びた。また、NISQ デバイスで実行可能なアルゴリズム(NISQ アルゴリズム)が近年多く提案されており、古典アルゴリズムに対する NISQ アルゴリズムの優位性が示されることに期待が高まっている。しかし、NISQ デバイスにはノイズが多く存在するため、正確に量子計算を行うのは非常に困難である。そのため、NISQ デバイス上のノイズの低減が現在重要な課題の1つとなっている。

現在では、このようなノイズを統計的な処理で低減する量子誤り補償という技術が盛んに開発されている。プロジェクト実施以前の最新の研究では、確率的誤りキャンセルと呼ばれる誤り補償手法が提案されていた。しかし、この手法はノイズモデルを仮定して実行されることから、実行コストの大きいノイズ同定が必要となる。そこで我々は、機械学習を用いることで、ノイズモデルを仮定しない誤り補償手法を開発することに取り組んだ。

2. 目的

本プロジェクトは、特定のパラメータ付き量子回路・特定の NISQ デバイスのノイズを対象とし、機械学習を用いた誤り補償手法の開発を目的とする。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは、特定のパラメータ付き量子回路を対象とし、機械学習を用いて、量子コンピュータの出力結果である確率分布に対して誤り補償を行う手法を開発した(図 3.1)。この手法は量子デバイスのノイズを低減することを目的としているが、プロジェクト期間内では数値計算のみで実験を行った。また今回は、IBM 社が提供する量子計算開発用ソフトウェアの Qiskit と、Google Brain Team が開発した深層学習ライブラリの TensorFlow を主に使用した。本提案手法は、小規模のパラメータ付き量子回路に対して、Depolarizing Channel と呼ばれる主要なノイズモデルのエラーを低減可能であることを確認した。

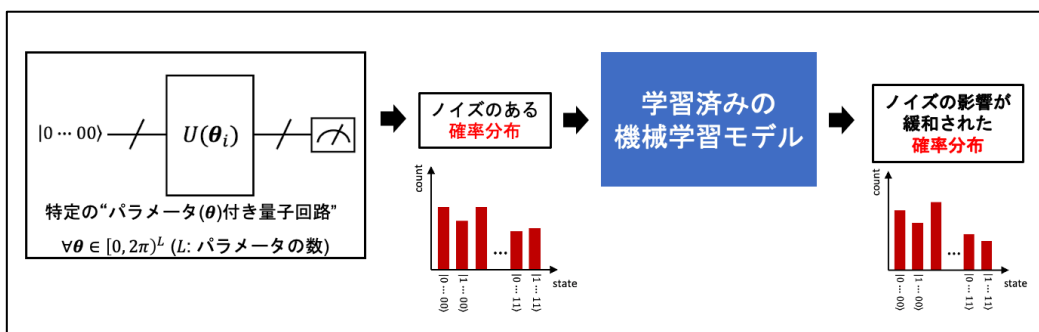


図 3.1: 本プロジェクト成果物の概略図。

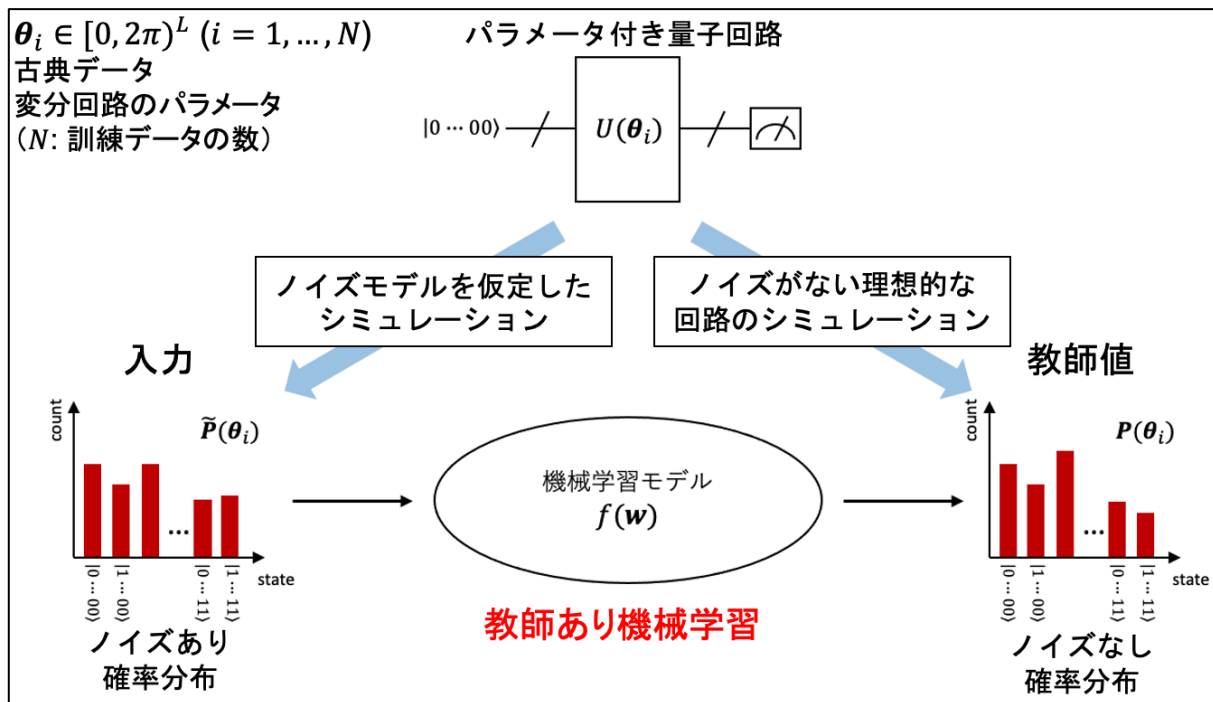


図 3.2: 本提案手法の枠組み。

提案手法概要

本提案手法では図 3.2 に示されるように教師あり学習を行う。量子カーネル推定法 (Quantum Kernel Estimator, QKE) などの NISQ アルゴリズムは、古典データや変分パラメータを入力する量子回路を使用する。そのため、入力するパラメータの値をランダムに決定した量子回路をそれぞれノイズがある場合とない場合の両方でシミュレーションを実行し、その計算結果をそれぞれ機械学習モデルへの入力・教師値とする。このように、量子回路のパラメータの値をランダムサーチで決定して訓練データを多数獲得することで、ノイズがある場合とない場合の計算結果の対応付けができるように教師あり学習でモデルを学習する。

提案手法の内容とその成果

本提案手法では、量子状態が取りうる 2^n の長さの状態に関する確率分布をそのまま入力し、ノイズを抑制した確率分布を出力する機械学習モデルを用いる(図 3.3)。本プロジェクトでは、線形機械学習モデルと非線形機械学習モデルの 2 つのモデルを構築した。線形モデルは 2 層からなるニューラルネットワークで、活性化関数も線形関数を利用しており完全に線形変換となっている。一方非線形モデルは Attention 機構と呼ばれる仕組みを導入したニューラルネットワークである(Attention ML モデル)。この Attention 機構は、導入することで計算コストが増加してしまうものの、入力ベクトルの要素ごとの関係性からデータ内の注意個所を学習できるため、性能を向上させると期待される。これらのモデルを評価するために、Depolarizing Channel と呼ばれる、実際に量子コンピュータでの計算過程に起こりうるノイズモデルに対して誤り補償の数値実験を行った。実験設定を表 3.1 に示

す。図 3.4 に Depolarizing Channel における誤り補償実験を示す。縦軸はノイズなし確率分布との平均二乗誤差の大きさを表しており、値が小さいほど誤り補償の性能が良いことを示す。横軸は Attention ML モデルのハイパーパラメータの1つを表す。Depolarizing Channel は線形モデルで誤り補償可能なノイズであることが知られており、本実験では Attention ML モデルでも同程度の精度で誤り補償可能であることが確認できた。さらに本プロジェクトでは、Amplitude-damping Channel と呼ばれる線形モデルで誤り補償可能かが非自明なノイズに対しても実験を行った。結果として、線形モデルではノイズを低減できないが Attention ML モデルでは誤り補償可能であるケースを発見し、Attention ML モデルが実用上有用である可能性を示唆する結果を得た。

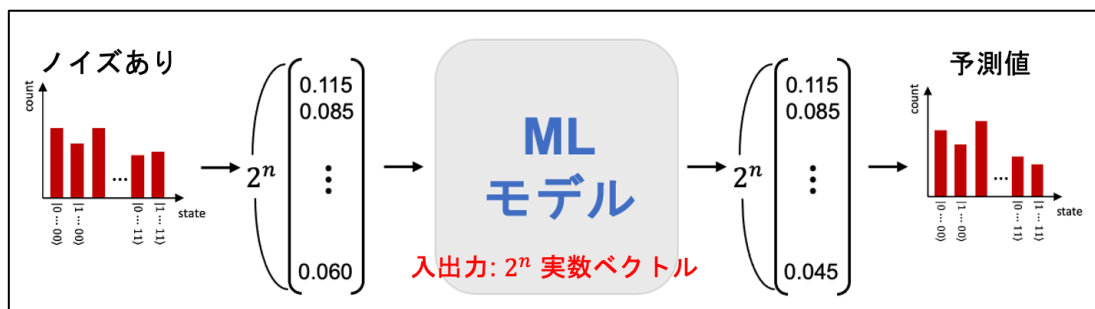


図 3.3: 提案手法の具体的な流れ。 n 量子ビット量子状態を観測したときに得られる 2^n の長さの確率分布を実数ベクトルとみなし機械学習モデルに入力する。出力も全ての要素の和が 1 となるような 2^n の長さの実数ベクトル、つまり確率分布を出力する。

表 3.1: 実験設定

対象とする量子回路	3量子ビット、20パラメータ
量子回路のパラメータのサンプリング手法	ランダムサーチ
評価指標	ノイズなし確率分布との平均二乗誤差 (MSE)
訓練量子回路数	10,000
検証量子回路数	10,000
Depolarizing Channel $E(\rho) = (1 - \lambda)\rho + \lambda \text{Tr}[\rho] \frac{I}{2^n}$	$\lambda_1 = \lambda_2 = 0.01$ λ_1, λ_2 : single- and two-qubit depolarizing noise rate

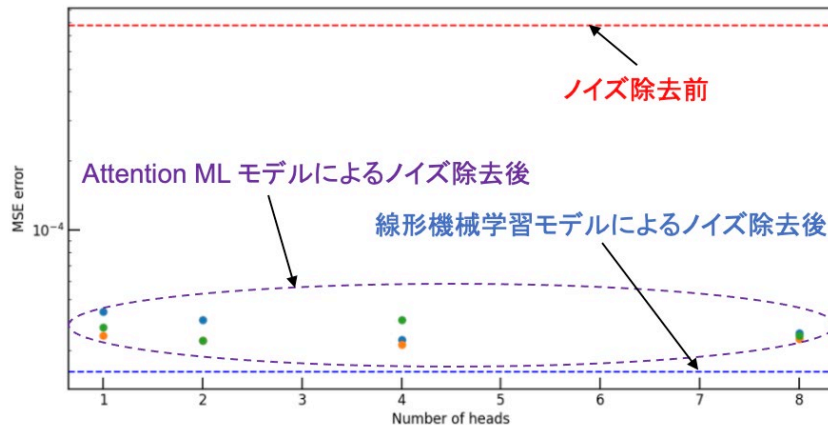


図 3.4: 提案手法による Depolarizing Channel の誤り補償実験の結果。

4. 新規性・優位性

本手法は、従来手法である確率的誤りキャンセルと比較して、ノイズに関する情報を必要とせず簡単に導入することが可能である。また本提案手法は、量子コンピュータから得られる確率分布を誤り補償するため、量子機械学習における生成モデルのように確率分布を出力するアルゴリズムにも適用可能という利点がある。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクトはゲート式量子コンピュータ向けソフトウェアの開発を目的としている。現状のゲート式量子コンピュータは量子アニーリングマシンに比べ実用性に乏しいが、近い将来には量子化学計算・最適化・機械学習など様々な分野での実用的なアプリケーションが期待されている。そのため本プロジェクトが開発した誤り補償手法は、その実現を加速させることができると期待される。

本プロジェクトで開発した手法は、ゲート式量子コンピュータ、特に NISQ デバイスにおけるアルゴリズムの研究を行うあらゆるユーザーが利用できる。つまり量子化学計算・最適化・機械学習などの分野にかかわらず、広範囲なユーザーが使用できると想定される。この手法が多くのゲート式量子コンピュータの研究者に使われることによって、誤り補償手法のスタンダードとなり、NISQ アルゴリズムの計算精度向上に貢献することができる。また、機械学習を用いた本手法は、ノイズに関する情報を前もって必要とせずノイズの影響を抑えるために簡単に導入できることから、誤り補償手法全般において重要な役目を果たすと考えられる。

6. 氏名（所属）

矢野 碩志(慶應義塾大学 大学院理工学研究科)

鈴木 雄大(慶應義塾大学 大学院理工学研究科)