

# 量子機械学習

近年の生成AIに代表されるように、機械学習は急速に進化しています。その進化を下支えしているのは、半導体技術の進歩による計算機の高速化です。そこで、従来のコンピュータ（古典コンピュータ）を超える計算能力を持っているとされる量子コンピュータに着目するのは自然な流れでしょう。今、量子コンピュータによって機械学習を高度化しようという研究が盛んです。この分野は量子機械学習と呼ばれています。

これまでの連載でも見てきたように、量子コンピュータによる加速は特定の計算タスクに対してのみもたらされるものであり、全てのタスクに対して有効というわけではありません。例えば生成AIを高速化しようとしても、単純にその計算を量子コンピュータ上で実行するだけでは高速化は期待できません。量子コンピュータを使うには、計算タスクの詳細を理解したうえで、「ここぞ」という部分だけを量子コンピュータで実行する必要がありますでした。機械学習においてそのような部分を見つけ、「実用的」な量子加速が得られるかどうかは、現状理論的にも未解明です。しかし、できたときのインパクトの大きさから、その可能性に期待が寄せられており、様々なアイデアが提案されてきています。連載第6回となる今回は、そんな量子機械学習のアイデアを紹介します。

## 機械学習

量子機械学習を理解するために、まずは機械学習の基本を振り返りましょう。代表的な機械学習タスクの一つは、与えられたデータ  $x$  から、そのデータの何らかの性質  $y$  の予測を行うことです。化学分野であれば、例えば分子の構造  $x$  からその分子のエネルギー  $y$  を予測するといったタスクが考えられます。このタスクを解くには、データ  $x$  と  $y$  の関係を表す**推論モデル**  $f(x, \theta)$  を構築するのが一般的なアプローチです。 $\theta$  はパラメータで、モデル  $f(x, \theta)$  が正しい  $y$  を出力するように  $w$  を調整することを学習もしくは訓練と呼びます。訓練は、実験などから得られた  $(x, y)$  の組を大量に使い、適当な尺度のもとで  $y$  と  $f(x, w)$  の差を最小化することで行われます。

例えば線形回帰では  $f(x; a, b) = ax + b$  という形のモデルを使います。特に線形モデルで二乗誤差を最小化することを目指す場合、訓練は適当な連立方程式を解くことに帰着されます。この場合行列演算を使って解析的に最適なパラメータを求めることができます。ニューラルネットワークでは、多層の非線形関数を組み合わせたモデルが使われます。ニューラルネットワークの最適パラメータを解析的に求めることは一般に困難で、訓練は多くの場合、勾配降下法と呼ばれるアルゴリズムを使って行われます。学習の様子は図1に示しました。

近年注目を集める**生成モデル**は、推論モデルのように入力  $x$  からある特定の  $y$  を出力するのではなく、与えられた  $x$  についてもっともらしい  $y$  の確率分布  $p(y|x)$  をコンピュータ上で作ることを目指すものです。わざわざ例を挙げることも不要かもしれませんが、生成モデルのタスクとして代表的なものに、テキストからの画像生成や、チャットボットのような自然言語生成などが挙げられます。生成モデルは、パラメータ  $\theta$  を使った確率分布  $q(y|x, \theta)$  として定義されます。推論モデルと同様に、生成モデルの訓練は、大量のデータを使い、モデルの分布  $q$  と実際のデータの分布  $p$  の差を小さくするように行われます。

これらについて、量子コンピュータを使って高度化するための手法を見ていきましょう。

## 量子コンピュータによる推論モデル

量子機械学習の一つのアプローチは、推論モデル  $f(x, w)$  を量子コンピュータの力を借りて高度化することを目指すものです。近年最も注目を浴びているのは、**量子特徴量**を使った一連の手法です。量子特徴量は、機械学習における**特徴量**という概念を量子で高度化することを目指すものです。そもそも特徴量とはなんなのでしょうか？図1にその概念図を示しました。図1のように、円形のデータを分類するタスクを考えてみましょう。このデータは、線形なモデル、すなわち直線を使って分類することはできません。しかし、このデータを適切な特徴量空間（図1右）に写像することで、線形なモデル（この場合は平面）で分類できるようになります。このように、データ  $x$  を適切に事前処理することによって、学習が簡単になることがあります。このような事前処理で出力される量の特徴量と呼びます。

量子特徴量は、量子的な重ね合わせ状態を特徴量として利用するアプローチです。図1下に示したように、与えられたデータ  $x$  を、量子的な重ね合わせ状態に写像したものを量子特徴量と呼びます。このような状態は、データ  $x$  に依存する適当な量子回路を、量子コンピュータ上で実行することで作ります。量子コンピュータで作れる量子状態の中には、古典コンピュータで効率的に表現できないものも含まれるため、量子特徴量を使うことで、古典コンピュータでは難しかった機械学習タスクを解ける可能性があります。

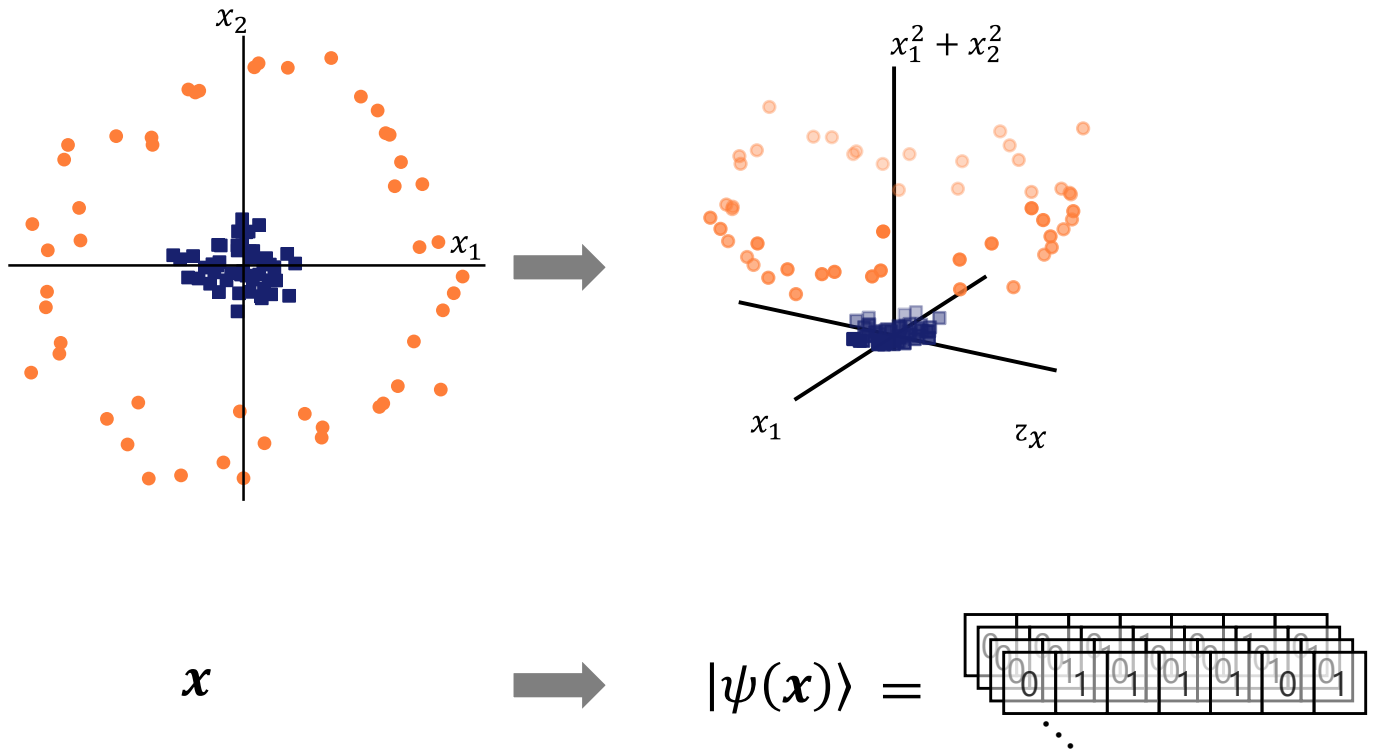


図1 特徴量・量子特徴量の概念図。円形のデータ  $x$  を、適切な特徴量空間に写像することで、線形なモデルによって学習できるようになります。量子特徴量は量子的な重ね合わせ状態を特徴量として利用するアプローチです。

量子特徴量の使い方として代表的なものに、量子回路学習と量子カーネル法の二つがあります。量子回路学習 [K. Mitarai et al., Physical Review A 98, 032309 (2018)] は、パラメータ  $\theta$  を持つ量子回路を量子特徴量  $|\psi(x)\rangle$  に作用させ、最後に測定を行うことで、重要な特徴を抽出しようとする手法です。図2にその概念図を示しました。パラメータ  $\theta$  としては、量子回路のゲートの種類や配置、回路の深さなどを使います。これらのパラメータを最適化することで、量子特徴量から特に重要な情報を抜き出し、適切な予測を行おうとするのが、量子回路学習のアイデアです。ちょうどパラメータ  $\theta$  を持つ量子回路がニューラルネットワークのように見えるので、量子ニューラルネットワークと呼ばれることもあります。

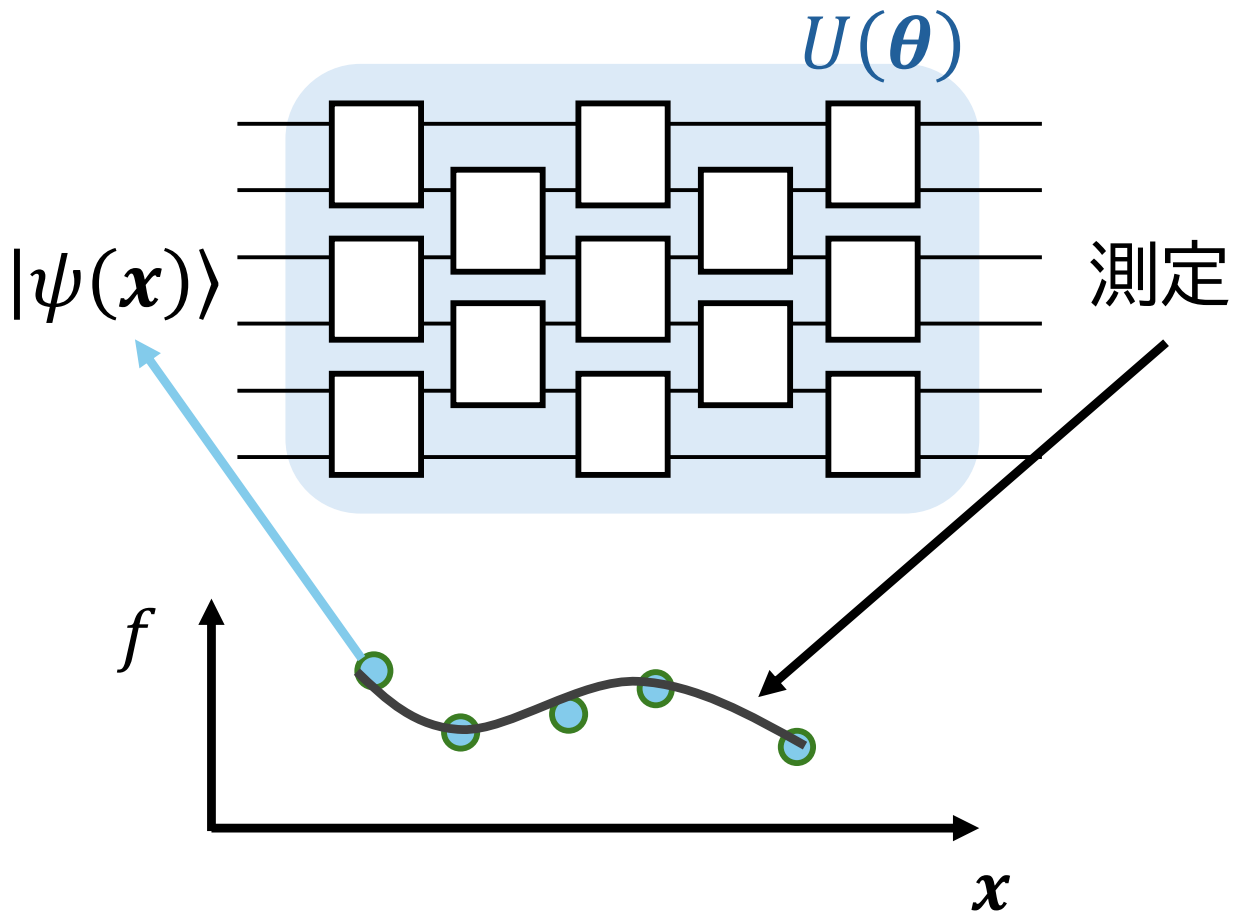


図2 量子回路学習の概念図。量子回路学習では、パラメータ  $\theta$  を持つ量子回路を量子特徴量  $|\psi(x)\rangle$  に作用させ、最後に測定を行います。パラメータ  $\theta$  を最適化することで、重要な特徴を抽出し、図下実線のようにデータに適合する予測値を出すことを目指します。

量子カーネル法 [V. Havlíček, et al., Nature 567, 209 (2019)] は、量子回路の出力から直接予測値を得るのではなく、量子特徴量間の内積を使って学習を行う手法です。量子カーネル法の数学をここで詳しく説明することはできませんので、ここでは直感的な説明にとどめます。まず、特徴量の内積は、特徴量空間でのデータの類似度とみなすことができます。2つの単位ベクトルの間の内積の値は、それらが平行であるとき1、直交するとき0となることを思い出しましょう。量子カーネル法において予測値は、訓練データに含まれているすべてのデータと、そのラベルを予測したい新しいデータとの間の類似度を計算し、その類似度情報をもとに出力します。訓練は、訓練データのうち、「予測をするにあたってどのデータとの類似度が重要か」を最適化することで行われます。

## 量子コンピュータによる生成モデル

量子機械学習のもう一つのアプローチとして、生成モデルを量子コンピュータによって高度化することが挙げられます。このアプローチの魅力は、量子コンピュータの出力が確率的であることを活かす点にあります。量子コンピュータは、一般的な計算問題では古典コンピュータに比べて優位性を持ちにくいものの、特定の確率分布を作り出す能力においては優れています。実際、量子コンピュータが作り出せる確率分布には、古典コンピュータでは効率的に生成できないと考えられているものが含まれます。例えば、ランダムな量子回路からの出力や素因数分解アルゴリズムの結果などがそれに当たります。生成モデルは、複雑な確率分布からサンプリングを行うことで、画像生成を含む多様なタスクをこなせるモデルであり、量子コンピュータからしか生成できない確率分布を、生成モデルに何らかの形で利用することは非常に興味深いと言えます。図3にその一つである量子回路ボルンマシンの概念図を示しました。

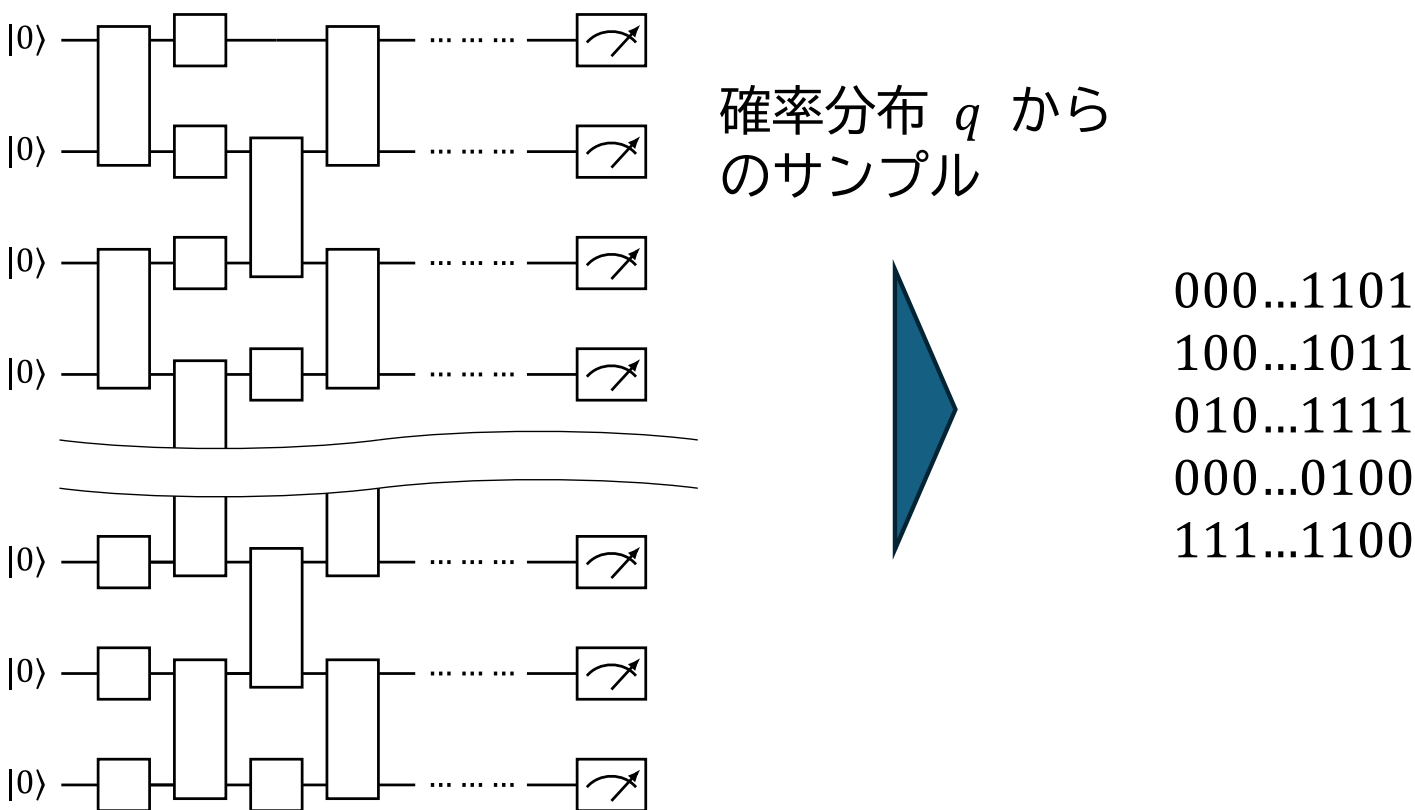


図3 量子回路ボルンマシンの概念図。量子回路ボルンマシンは、量子回路の出力をそのまま生成モデルの出力として利用します。量子回路を適切な形へと最適化していくことによって、データ分布に類似した所望の確率分布を生成することを目指します。

## おわりに

今回は量子機械学習のためのアプローチとして、量子特徴量を使った推論モデルと、量子コンピュータによる生成モデルを紹介しました。これらのモデルは、量子コンピュータの力を機械学習の高度化に使うためのコンセプトとして非常に面白く、盛んに研究が行われています。しかし、現状ではまだ実用的な成果は出ていません。どの研究を見ても、実用的なタスクにおいて、量子コンピュータによって効率化できるという確たる証拠はないのです。このようなアプローチによる量子機械学習の研究はまだ始まったばかりであり、その成果がどのような形で現れるかは未知数です。これからの研究の進展を楽しみにしましょう。