OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

| | |
|---|---|
| Title | Applications and performance analyses of quantum machine learning via fast classical simulation of a quantum computer |
| Author(s) | 河瀬, 良亮 |
| Citation | 大阪大学, 2023, 博士論文 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://doi.org/10.18910/92207 |
| rights | |
| Note | |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

# 論　文　内　容　の　要　旨

| 氏　名　（　河瀬　良亮　） | |
|---|---|
| 論文題名 | Applications and performance analyses of quantum machine learning via fast classical simulation of a quantum computer<br>（量子コンピュータの高速古典シミュレーションによる量子機械学習の応用および性能評価） |

論文内容の要旨

量子コンピュータは、量子力学の性質を利用して、従来（古典）コンピュータでは計算が困難な問題を解くことが期待されている次世代コンピュータである。現在、巨大IT企業や大学、そして国の研究機関においてその開発が進められている。現在すでに数十〜数百量子ビットの量子コンピュータが実現されており、ある種のサンプリング問題を従来の古典コンピュータよりも高速に解けることが実証されている。しかしながら、これはベンチマークのためのタスクであったため、金融、量子化学、機械学習などの実用的なタスクへの応用研究が進められている。

量子機械学習は、分類や回帰などの機械学習タスクを実行するために量子コンピュータを活用する新しい分野である。現在実現されている量子コンピュータは量子ビット数やゲート操作に制限があり、またノイズの影響も受けるため、量子機械学習アルゴリズムの最適化や性能評価には古典シミュレーションが有効なアプローチである。また量子機械学習アルゴリズムの開発やその仕組みの理解において量子データの可視化は、古典機械学習におけるそれと同様に非常に重要である。しかしながら、量子系の次元は量子ビットの増加に対して指数関数的に大きくなるため、古典シミュレーションや量子データの可視化は挑戦的な課題である。

本論文では、量子機械学習アルゴリズムの開発を加速させるために、量子ダイナミクスの古典シミュレーションの高速化手法と量子データの可視化手法を提案する。まず量子ダイナミクスの古典シミュレーションの高速化は、ハミルトニアンに含まれるパウリ演算子の交換関係を利用することで、トロッター展開による逐次的にシミュレーションを行うアプローチと比較して、大幅な高速化に成功した。これは量子回路学習や量子近似最適化アルゴリズムなどの量子アルゴリズムの古典シミュレーションの高速化に役立つ。

次に、量子状態の類似度を保つように、2次元の古典データに写像する方法を提案する。これは量子状態に適用するパラメータ付き量子回路を最適化することで行う。その結果、横磁場イジングモデルの量子ダイナミクスの可視化において、量子状態の特徴に従った可視化に成功した。しかしながら、本手法ではデータを可視化するために、パラメータ付き量子回路の設計や観測量の選択を適切にする必要があり、量子状態の直接的な評価は困難である。そこで、これらを回避するために、量子カーネルを用いて量子データを可視化する。古典データを量子状態に埋め込む量子回路（量子特徴量写像）を介して古典データをヒルベルト空間に埋め込み、その類似度が2次元空間においても維持するようにカーネル法を用いて学習する。その結果、大量の量子データを高い精度で２次元可視化することに成功し、古典データをヒルベルト空間に埋め込む量子特徴写像の評価や、変分量子アルゴリズムの最適化の軌跡の可視化が可能になった。量子特徴写像を評価できることで量子回路のデザインの改善や、変分量子アルゴリズムの最適化の軌跡の可視化により局所最適解に止まってしまうというバレンプラトー問題の回避などに役立つと考えられる。

量子機械学習は、近年大きな広がりを見せる分野である。しかし、依然として古典機械学習による優位性が得られるような条件や状況の手がかりは乏しい。そのような中、本論文によって得られた成果、量子ダイナミクスの古典シミュレーションの高速化によって、量子回路学習や量子近似組合せ最適化などで利用される量子ダイナミクスのシミュレーションを10倍以上高速化することができるため、アルゴリズムの開発が加速され量子優位性の確立に貢献すると期待している。また、新たな量子機械学習アルゴリズムの仕組みの理解や改善については、単に開発サイクルを加速するだけではなく、量子データの可視化によって示唆を得ることも不可欠である。以上のように、本論文で構築された量子ダイナミクスの高速古典シミュレーション方法と量子データの可視化技術は、今後の量子機械学習の分野に発展に大きく貢献する。

様式７

# 論文審査の結果の要旨及び担当者

| 氏　　名　（　河瀬　良亮　） | | |
|---|---|---|
| | （職） | 氏　　名 |
| 論文審査担当者 | 主 査　教 授<br>副 査　教 授<br>副 査　教 授<br>副 査　准教授 | 藤井　啓祐<br>北川　勝浩<br>山本　俊<br>水上　渉（量子情報・量子生命研究センター） |

## 論文審査の結果の要旨

本論文では、量子コンピュータのアルゴリズム研究において重要となる２つの要素、(i)量子コンピュータのシミュレーション手法、(ii)量子データの可視化手法の２つにおいて新たな手法を提案するものである。現在、数十から数百量子ビット規模の量子コンピュータが実現されている。このような量子コンピュータは、量子誤り訂正を実装するには量子ビット数が少なく、ノイズの影響が無視できない量子計算デバイス（NISQ: noisy intermediate-scale quantum device）と呼ばれている。ノイズの影響が大きいため、素因数分解アルゴリズムなどの優位性が証明されている複雑な量子アルゴリズムを実行することはできない。このため、この規模の量子コンピュータで利用が可能な量子アルゴリズム、NISQアルゴリズムの研究が現在進められている。NISQアルゴリズムの研究においては、実機が発展途上にあるということもあり、古典コンピュータによるシミュレーションが活用されている。量子ビット数が増えるにつれて、古典コンピュータを用いたシミュレーションに要する時間が指数関数的に増加するため、より高速なシミュレーションが重要となる。また、量子状態は指数関数的に大きい次元を持つ複素ベクトルによって表現されるため、それを直感的に把握することも難しい。このような問題を克服するために、量子コンピュータのシミュレーション及び量子データの可視化手法が重要となる。

(i)について、特に量子回路学習や量子近似最適化（QAOA: quantum approximate optimization algorithm)、そして量子化学計算などに用いられるハミルトニアンダイナミクスに着目し、その古典シミュレーションを高速化する手法を提案している。具体的には、ハミルトニアンをパウリ演算子で展開し、互いに交換する項をグループとしてまとめ、クリフォード演算によって計算基底で対角化するという手法が提案されている。対角演算を量子状態に作用させる場合は、複数の操作をまとめて１回のメモリーアクセスによってシミュレーションを実行でき、ハミルトニアンの各項を逐次的にシミュレーションするよりも計算時間が短縮される。実際に横磁場イジング模型およびマヨラナフェルミオン模型を用いて、提案手法を実装し、約10倍程度の高速化が確認された。

(ii)については、機械学習分野における可視化手法であるt-SNE（t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding）を量子状態へと拡張することで量子データの可視化手法を提案している。パラメータ付き量子回路を用いて高次元データから低次元データへと写す写像を学習するアプローチと、量子状態間の内積からカーネル関数を定義し可視化するアプローチの２つを提案し、その性能を評価・比較している。特に、カーネル関数を用いる手法では、パラメータ付き量子回路の最適化プロセスを回避することができ、量子データの可視化手法としてはより精度が高いことが数値実験によって明らかになっており、古典カーネルを用いた可視化手法と比べても同等の高い精度で低次元埋め込みが達成されていることが確認されている。量子データの可視化の応用として、変分量子アルゴリズムの最適化プロセスを可視化し、変分量子回路の構成の違いや初期パラメータの違いによって最適化プロセスがどのような経路をたどるか考察している。

以上のように本論文で得られた(i)ハミルトニアンダイナミクスのシミュレーションの高速化手法、(ii)量子データの可視化手法は、量子計算という解析や可視化が難しい対象物を評価する上で重要であり、現在発展の目覚ましいNISQアルゴリズムの性能評価や性能改善に大きく貢献することが期待され、学術的意義は大きい。以上の理由から博士(工学)の学位論文として価値があるものと認める。