

量子コンピュータの現状と機械学習への応用

藤井 啓祐

大阪大学基礎工学研究科 教授

量子情報・量子生命研究センター 副センター長



QIQB

大阪大学 世界最先端研究機構

量子情報・量子生命研究センター

自己紹介

藤井啓祐 教授 大阪大学大学院基礎工学研究科



- ・ 2002年 大阪府立天王寺高等学校 卒業
- ・ 2006年 京都大学工学部 卒業
- ・ 2011年 京都大学大学院工学研究科 博士（工学）
- ・ 大阪大学大学院基礎工学研究科、特別研究員（2011-2013）
- ・ 京都大学白眉センター、特定助教（2013-2016）
- ・ 東京大学光量子科学研究センター、助教（2016-2017）
- ・ 京都大学大学院理学研究科、特定准教授（2017-2019）
- ・ 大阪大学大学院基礎工学研究科、教授（2019-現在）
- ・ 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 副センター長（2020-現在）
- ・ 理化学研究所 創発物性科学研究センター チームリーダー（2020-現在）

【人材育成】

未踏ターゲット事業ゲート式量子コンピュータ部門
プロジェクトマネージャー



Better Life
with IT

情報処理推進機構

【産学連携】

株式会社 QunaSys創業メンバー
最高技術顧問



はじめに：
量子力学から量子技術へ

量子力学

ミクロな世界を記述するもっとも基本的な物理法則

- 1900年代に入って構築された、原子・電子・分子などのミクロな世界を記述する基本的な物理の枠組み(量子技術0.0)
- 現代のテクノロジーの基礎

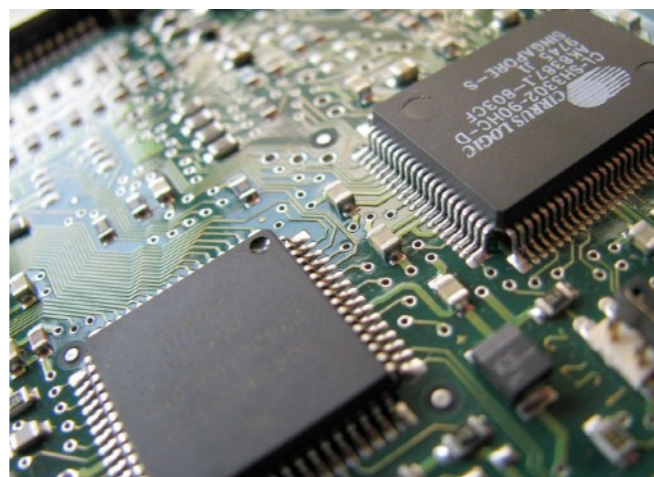
量子技術1.0

MRI(NMR 核磁気共鳴)



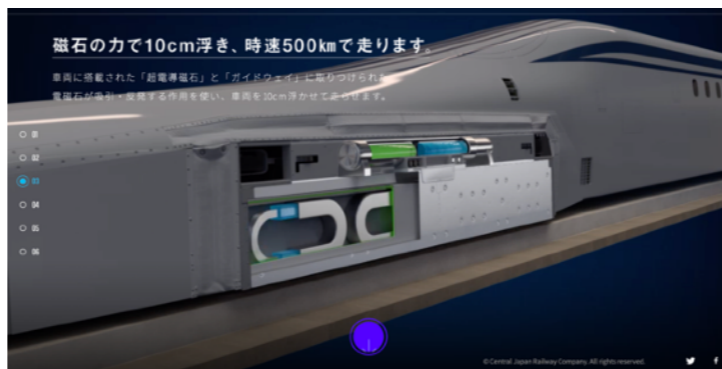
核スピン(微小な磁石)の
量子的なふるまい

半導体



固体中の電子の量子的なふるまい

超電導



<https://linear-chuo-shinkansen.jr-central.co.jp/about/?noise>

レーザー

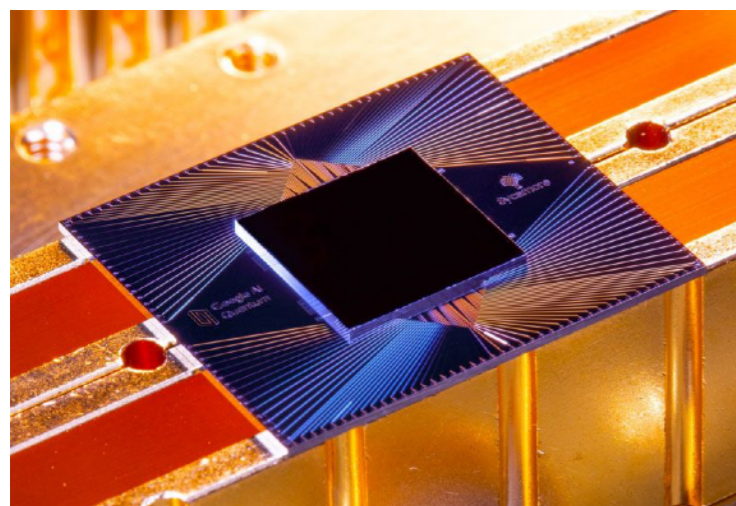


光の量子性

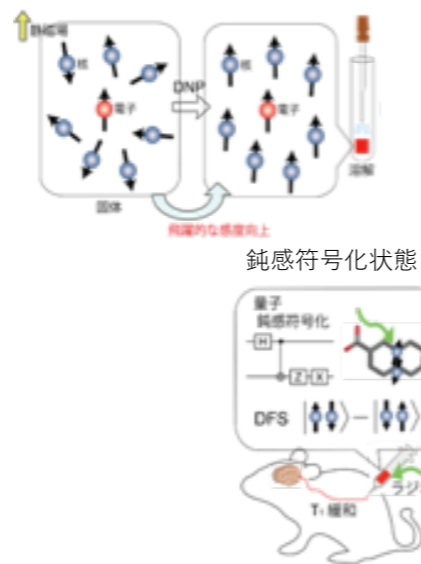
量子力学は
エレクトロニクスの
縁の下の力持ち

量子技術2.0

量子の不思議から量子を利用する技術へ



Google team, Nature 574 505 (2019)

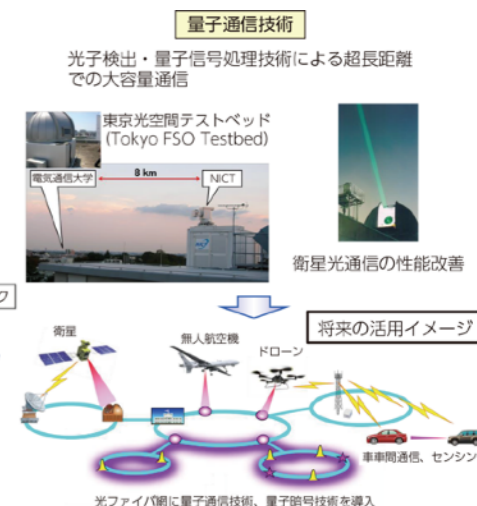


量子計測・センシング



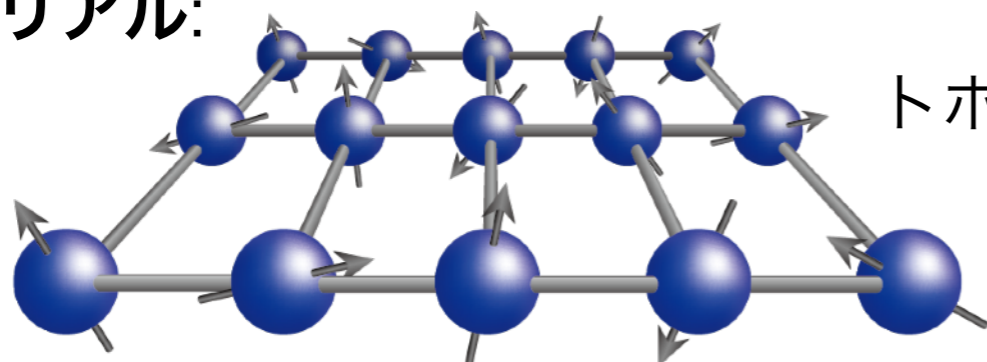
<https://www.soumu.go.jp/johotsusintokei/whitepaper/ja/r01/html/nd247620.html>

量子暗号・通信



量子コンピューティング ・シミュレーション

量子マテリアル:



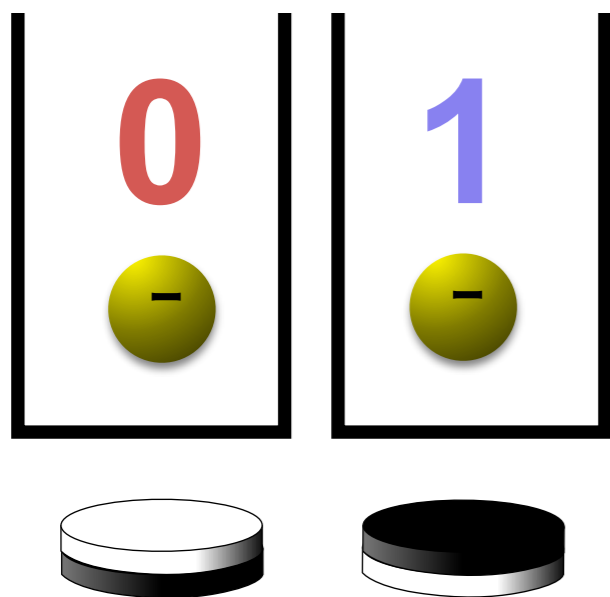
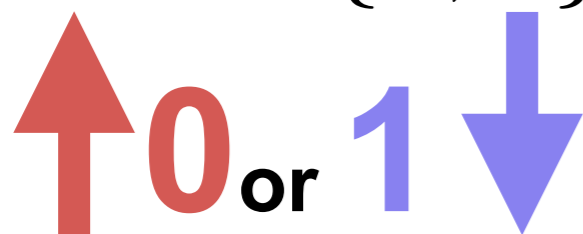
トポロジカル量子物質、スピントロニクス材料、エネルギー変換材料、フォトニクス材料

量子ビット

量子の世界の情報の最小単位

古典ビット:

$$x \in \{0, 1\}$$



量子ビット:

0

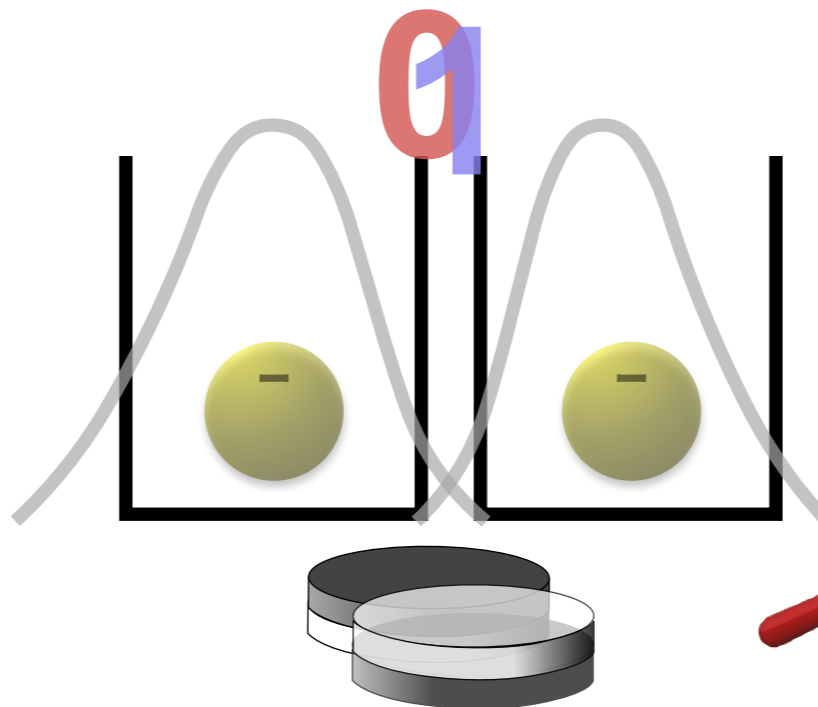


$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

複素ベクトル空間

0と1の重ね合わせ状態

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$



測定 0 or 1 ?

$$p_0 = |\alpha|^2$$

$$p_1 = |\beta|^2$$

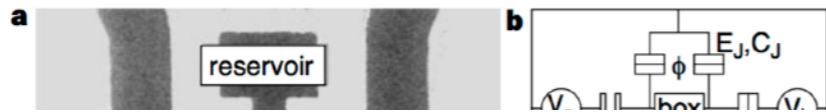
0か1かはまだ決定していない

絶対値の2乗が確率

様々な量子ビットたち

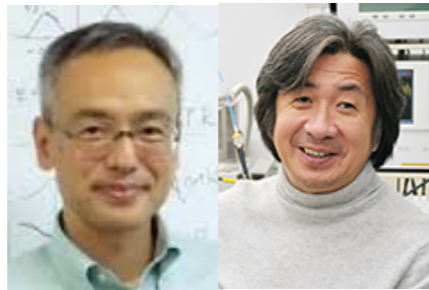
ミクロな世界は量子力学で動いている → 皆量子ビット

超伝導量子ビット



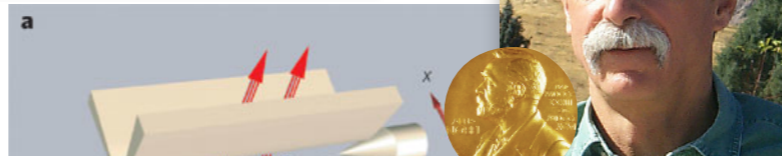
Yonakani et al., Nature
398, 786 (1999)

量子化した電気回路



中村・蔡先生

イオントラップ



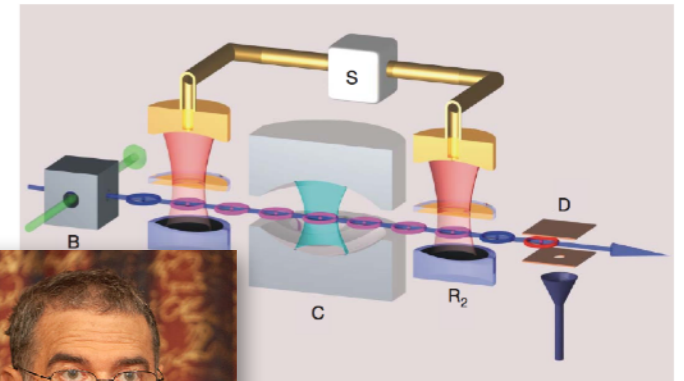
D. Winland

<http://patapsco.nist.gov/imageGallery/details.cfm?imageid=576>



原子(イオン)の内部状態 & 振動状態

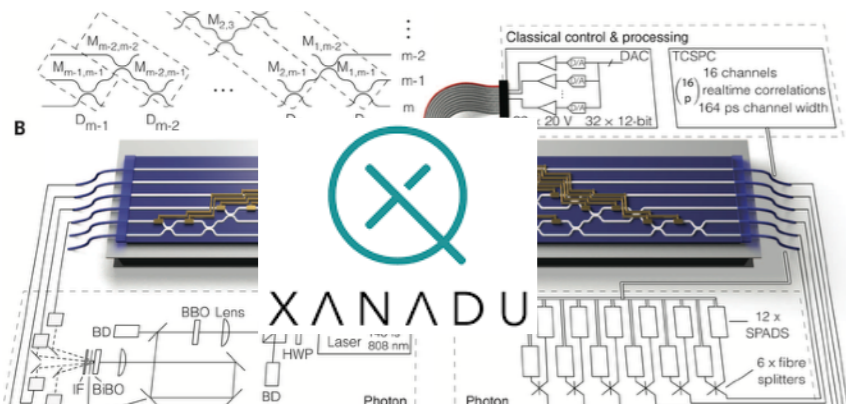
キャビティQED



S. Haroche

原子の内部状態 & 光

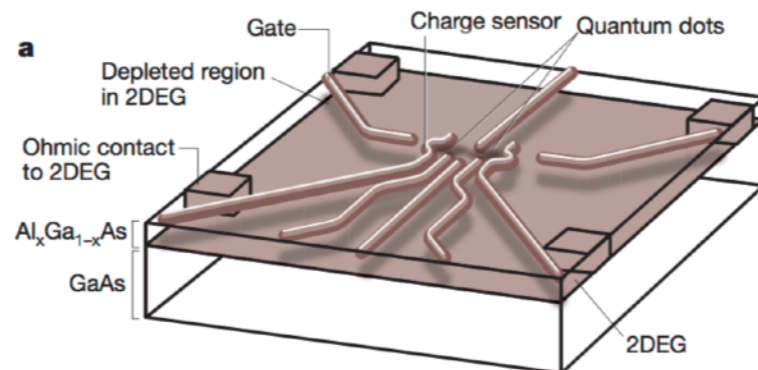
光量子ビット



J. Carolan et al., Science 349, 711 (2015)

単一光子(空間モード, 偏光モード)

量子ドット



T.D. Ladd et al., Nature 464, 45 (2010)

半導体量子井戸に捕獲した電子

トポロジカル量子ビット

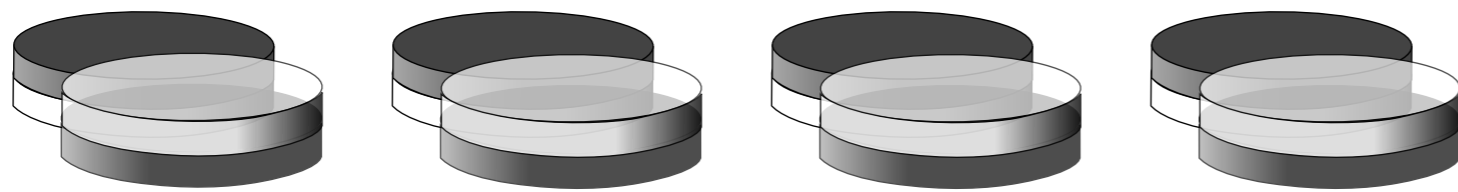


S. M. Albrecht et al., Nature 531, 206 (2016)

マヨラナゼロモード
(半導体ナノワイヤ+超伝導)

量子コンピュータが実行する計算

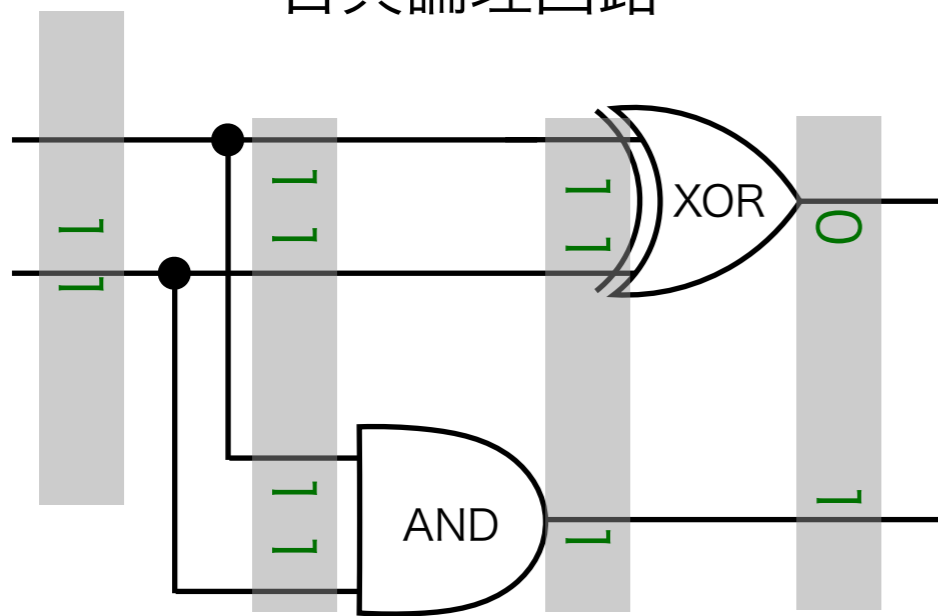
量子力学に従い、自然にベクトル・行列演算を実行



N量子ビット → 2^N パターンの重ね合わせ

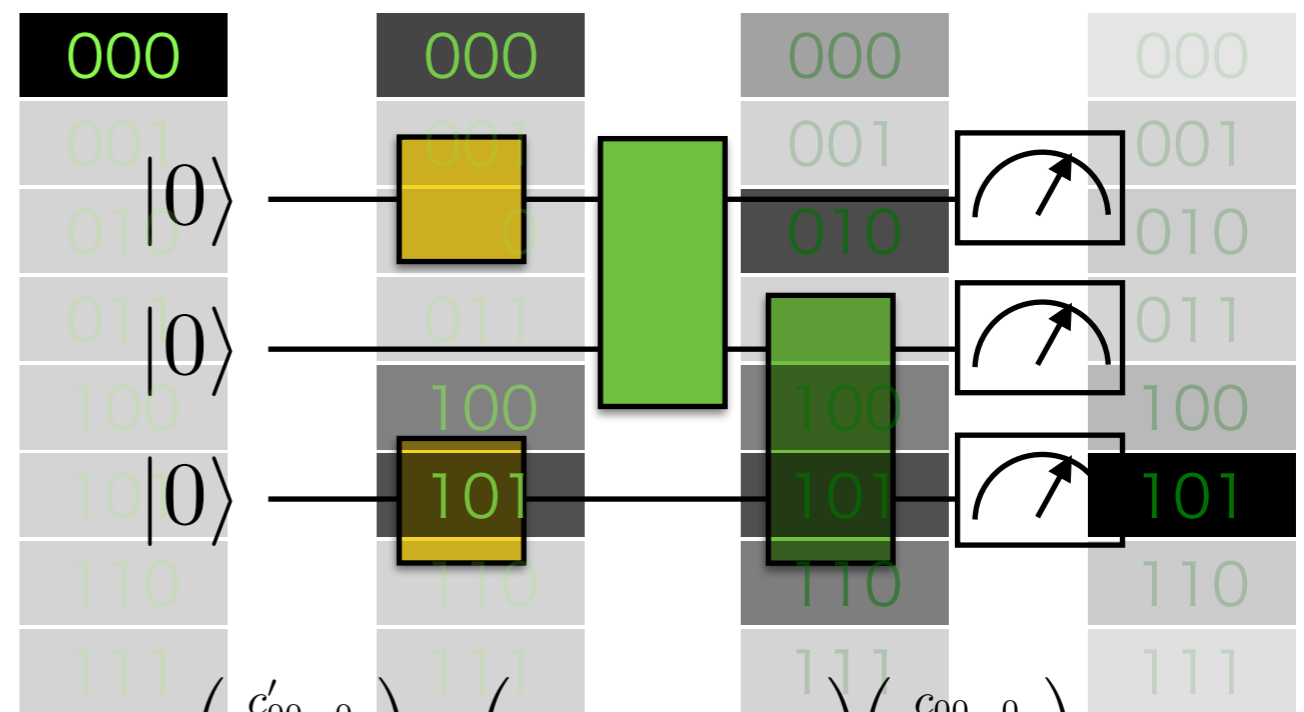
$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_{00\dots 0} \\ c_{00\dots 1} \\ \vdots \\ c_{11\dots 1} \end{pmatrix}$$

古典論理回路



必ず1つの状態を選びながら計算

量子回路



$$\begin{pmatrix} c'_{00\dots 0} \\ c'_{00\dots 1} \\ \vdots \\ c'_{11\dots 1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{00\dots 0} \\ c_{00\dots 1} \\ \vdots \\ c_{11\dots 1} \end{pmatrix}$$

いろいろなパターンを重ね合わせて計算する

量子コンピュータで何ができるのか

特定の問題に対して優位性があると期待されている

セキュリティ



- ・素因数分解(暗号解読)
- ・量子ネットワーク
- ・量子クラウド計算
- ・量子マネー、量子認証

難しい(安全)問題の定義が変わる
量子による情報の質の変化

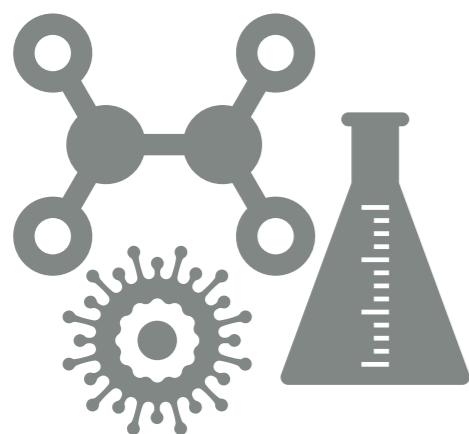
人工知能・データ科学



- ・データベース探索
- ・逆行列計算
- ・量子機械学習

膨大なデータと巨大な次元
量子インスパイア技術

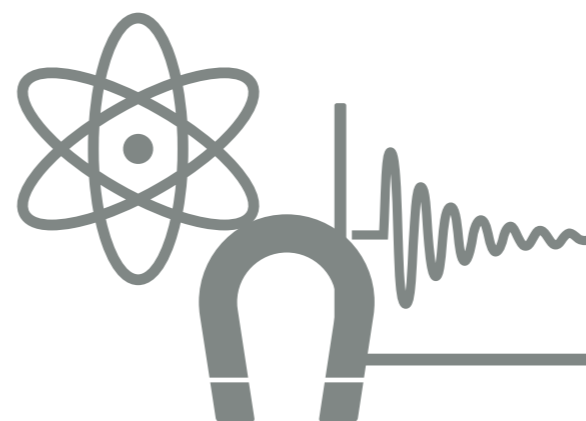
化学・材料



- ・量子化学計算
- ・分子のシミュレーション
- ・化学反応探索
- ・触媒開発・創薬

触媒の開発、光合成の解明
→地球規模の問題の解決

科学技術フロンティア



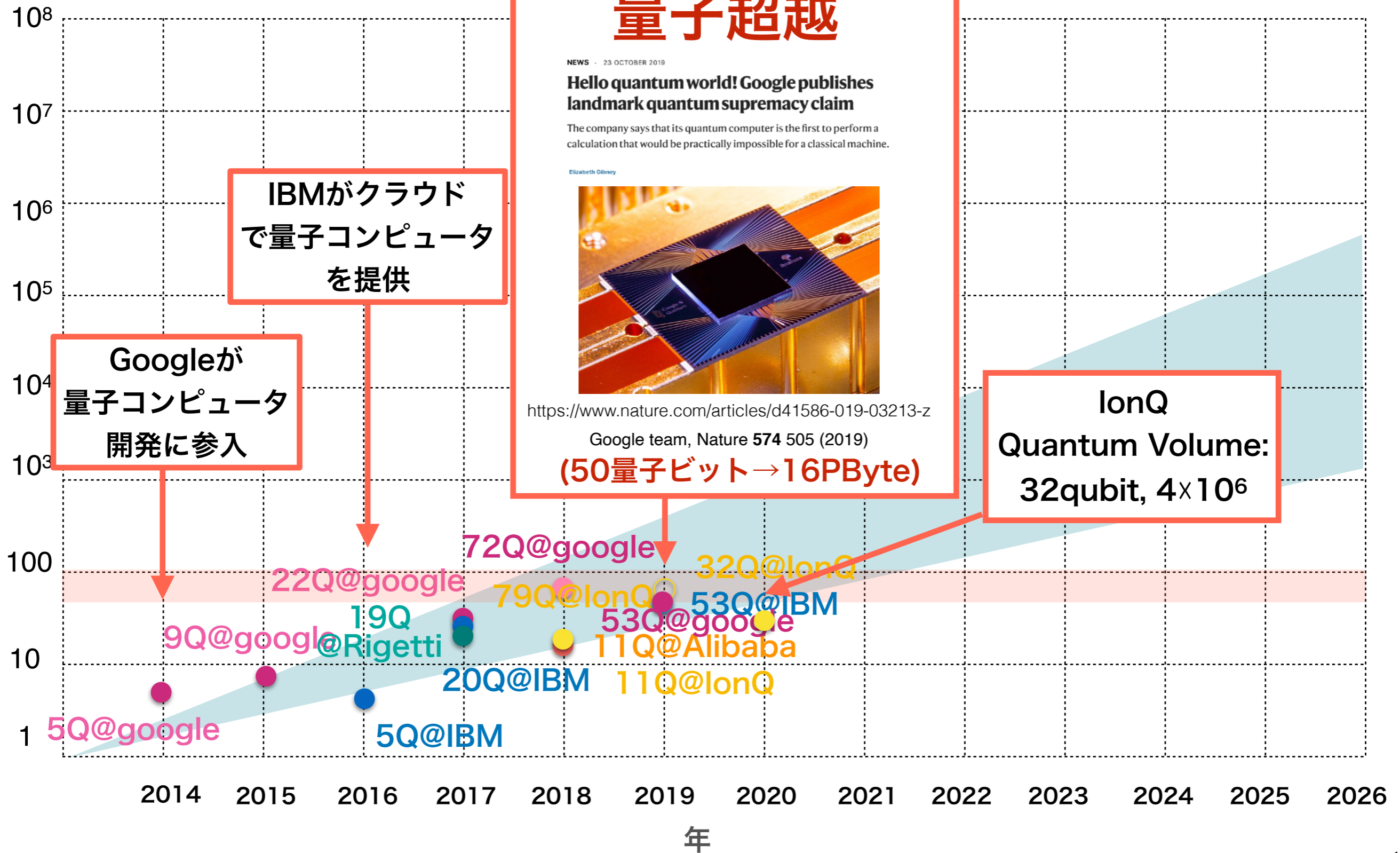
- ・新奇な物性の探索
- ・高温超電導
- ・基礎物理
- ・ブラックホール

物理法則と互換性のあるコンピュータ
→新たな物理の探索ツール

量子コンピュータ の現在

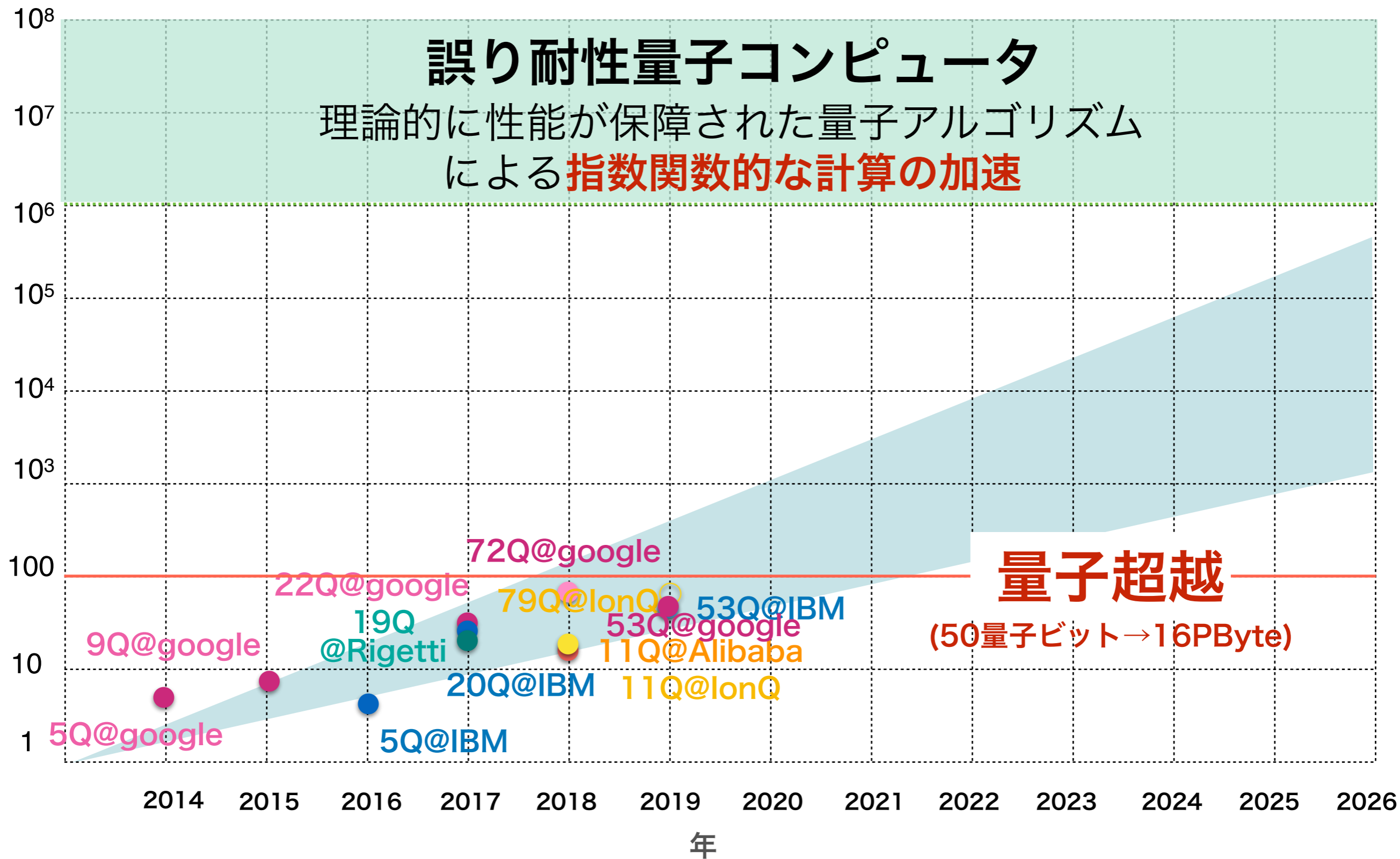
“量子版”ムーアの法則？

量子ビット数



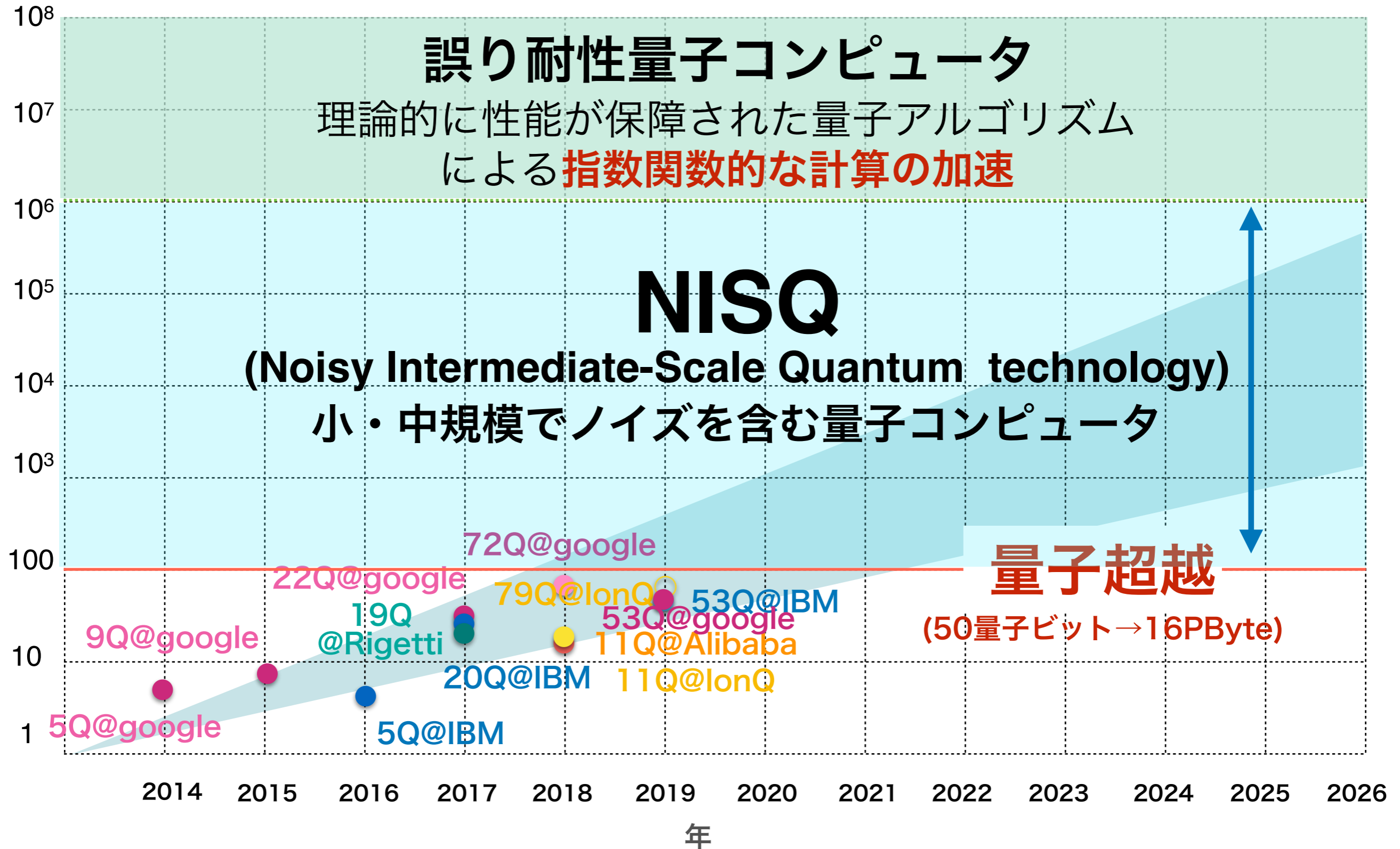
“量子版”ムーアの法則？

量子ビット数

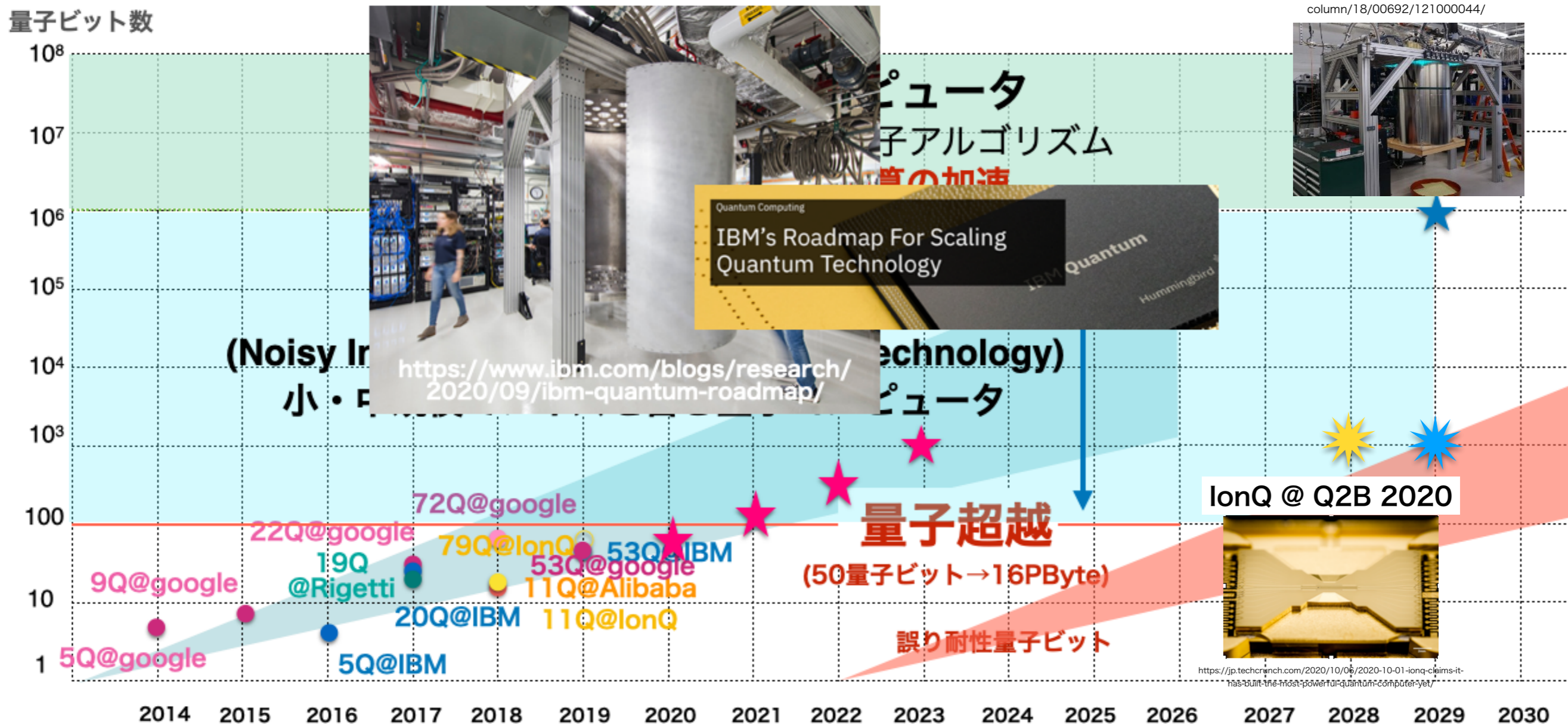


“量子版”ムーアの法則？

量子ビット数



“量子版”ムーアの法則？

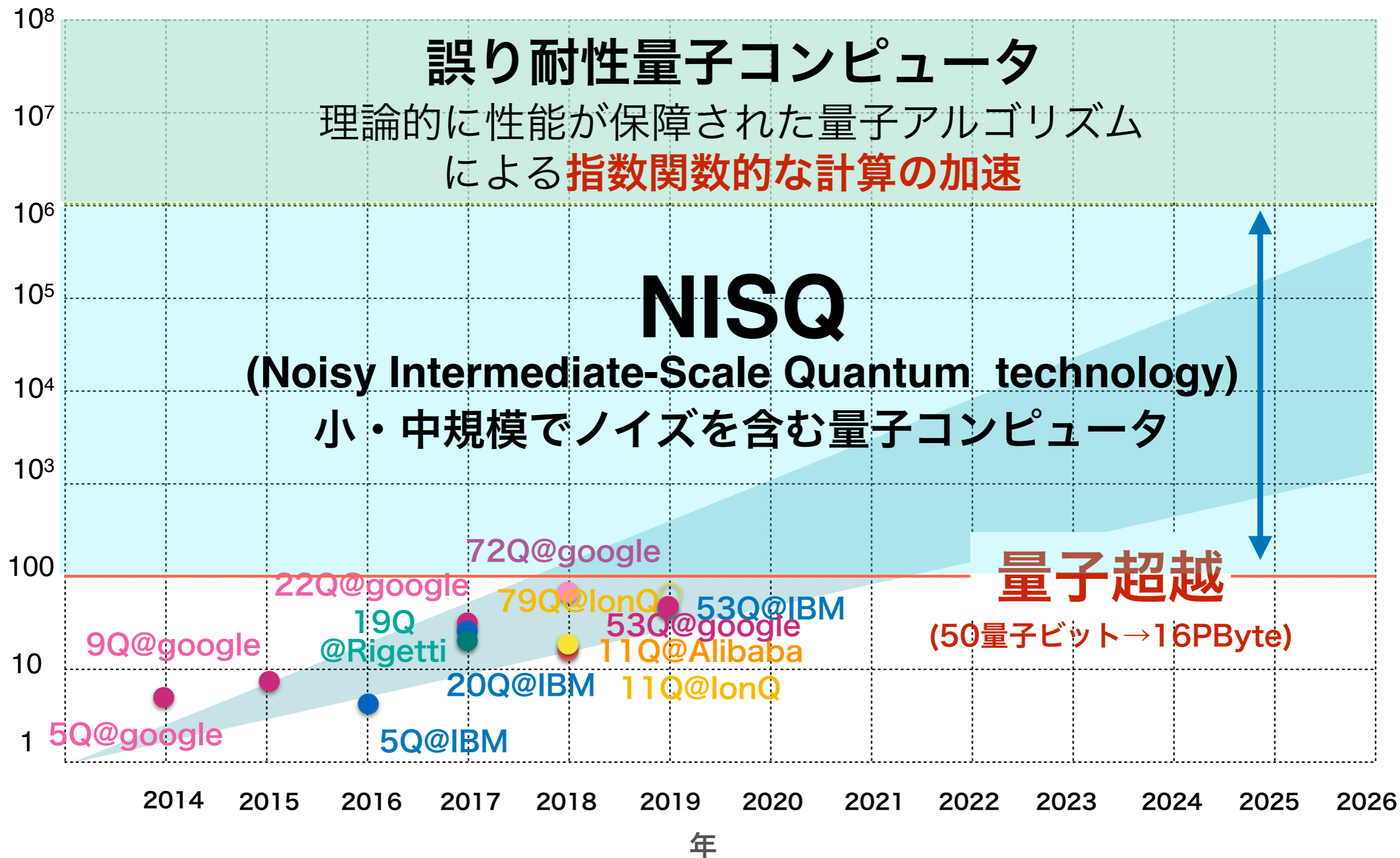


中田 敦 日経クロステック 「完全な量子コンピューターの実現は近い、グーグルやスタートアップの勝算とは」：
<https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/column/18/00692/121000044/>

AIと量子コンピュータ

“量子版”ムーアの法則？

量子ビット数

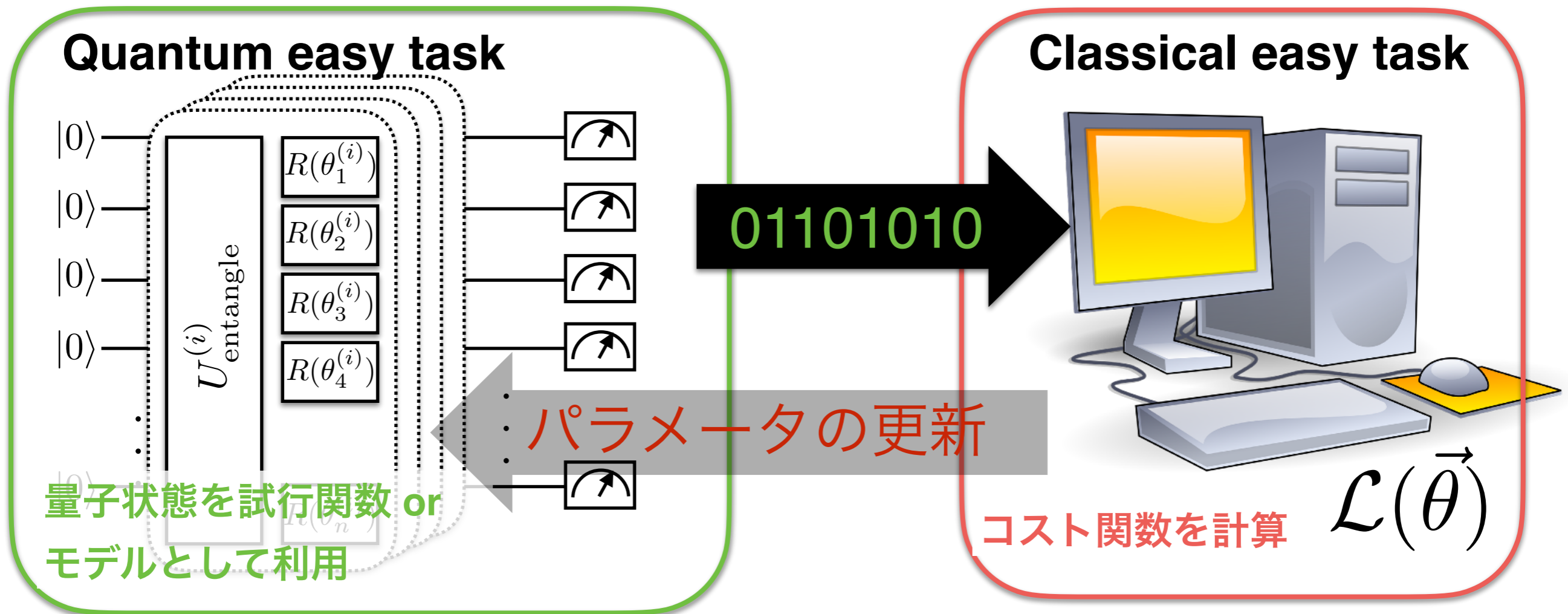


変分量子アルゴリズム

Review Paper: M. Cerezo et al., “Variational Quantum Algorithms”, arXiv:2012.09265

量子コンピュータ

古典コンピュータ



近似最適化 : QAOA (quantum approximate optimization algo.)

- E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, arXiv preprint arXiv:1411.4028 (2014).

基底状態探索 : VQE (variational quantum eigensolver)

- A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'brien, Nature Communications 5, 4213 (2014).

教師あり機械学習 : QCL (quantum circuit learning)

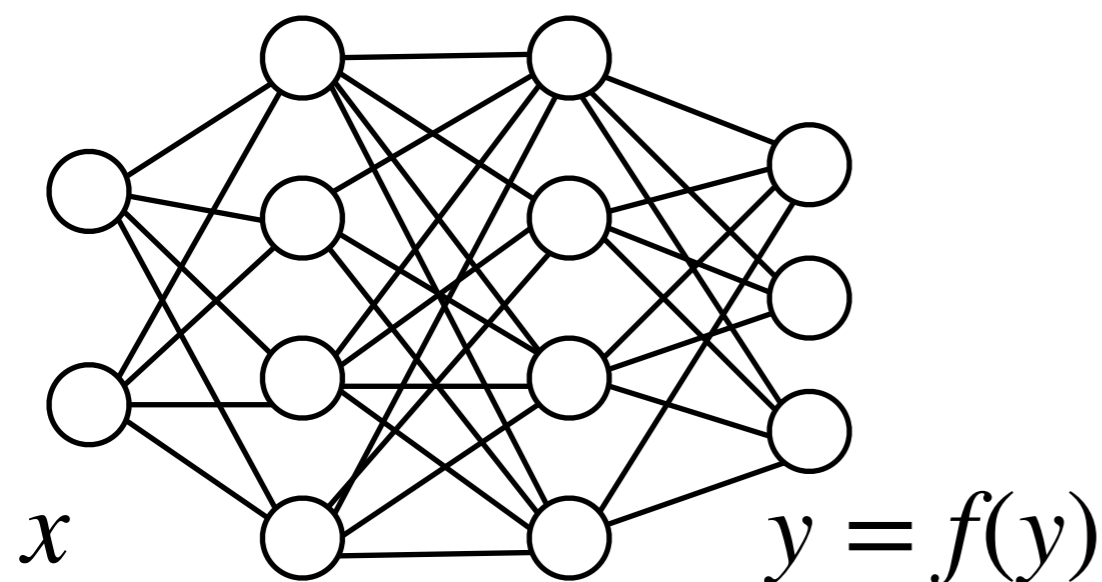
- K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii Phys. Rev. A **98**, 032309 (2018)

量子×機械学習

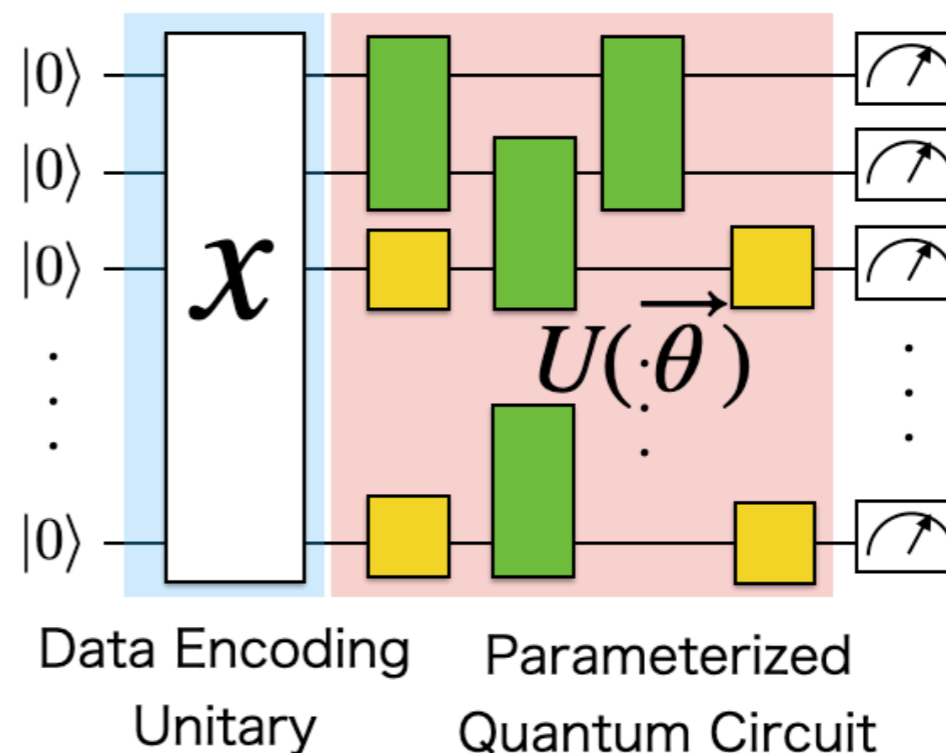
量子回路学習 (Mitarai'18)

Top1%論文

ニューラルネットワーク



NISQデバイスの最初の機械学習への応用



$$U(\vec{\theta}) |\Psi(\vec{x})\rangle$$

$$y(x, \theta) = \langle \Psi(\vec{x}) | U^\dagger(\vec{\theta}) A U(\vec{\theta}) | \Psi(\vec{x}) \rangle$$

損失関数

$$L = \sum_i (y_{\text{teacher}}^{(i)} - y(x^{(i)}, \vec{\theta}))^2$$

ニューラルネットワークの代わりにパラメータ付き量子回路からの出力をモデルとして、教師あり機械学習

量子機械学習ライブラリ

まだ原理は、固まっていないがライブラリーが突貫工事で準備されている



TensorFlow Quantum

インストール 学ぶ API リソース もっと見る

量子データ

GoogleColabで実行 GitHubでソースを表示 ノートブックをダウンロードする

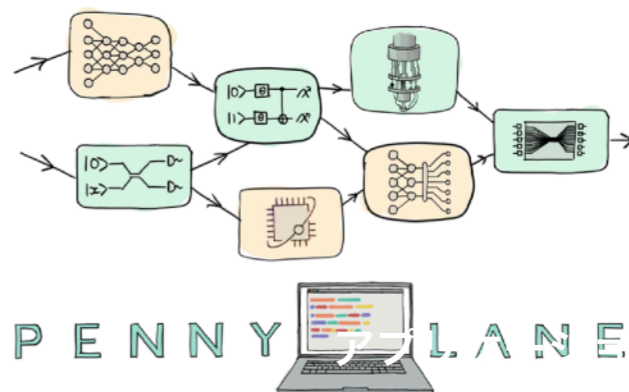
行われた比較のオフ構築MNISTのチュートリアル、このチュートリアル探究の最近の作品Huang。これは、さまざまなデータセットがパフォーマンスの比較にどのように影響するかを示しています。この研究では、著者は、古典的な機械学習モデルが量子モデルと同様に（またはそれよりも優れて）学習できる方法と時期を理解しようとしています。この作品はまた、慎重に作成されたデータセットを介して、古典的な機械学習モデルと量子機械学習モデルの間の経験的なパフォーマンスの分離を示しています。あなたはするであろう：

1. 縮小された次元のFashion-MNISTデータセットを準備します。
2. 量子回路を使用してデータセットにラベルを付け直し、Projected Quantum Kernel features (PQK)を計算します。
3. 再ラベル付けされたデータセットで古典的なニューラルネットワークをトレーニングし、PQK機能にアクセスできるモデルとパフォーマンスを比較します。

<https://www.tensorflow.org/quantum>



Features



- *Follow the gradient.* Built-in **automatic differentiation** of quantum circuits.
- *Best of both worlds.* Support for **hybrid quantum and classical models**; connect quantum hardware with PyTorch, TensorFlow, and NumPy.
- *Batteries included.* Provides **optimization and machine learning tools**.
- *Device independent.* The same quantum circuit model can be **run on different backends**. Install **plugins** to access even more devices, including **Strawberry Fields, Amazon Braket, IBM Q, Google Cirq, Rigetti Forest, Microsoft QDK, and ProjectQ.**

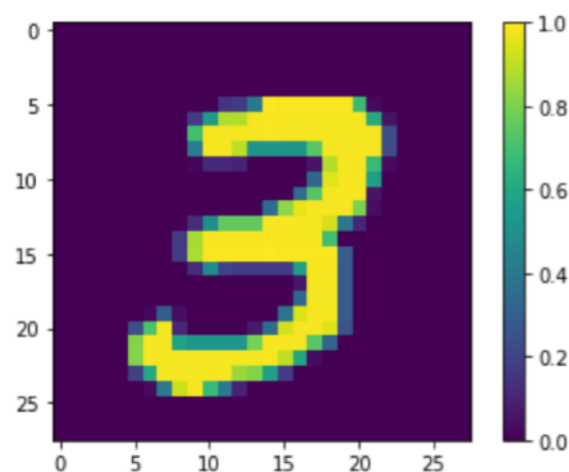
https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_variational_classifier.html

Qiskit を使った量子計算の学習



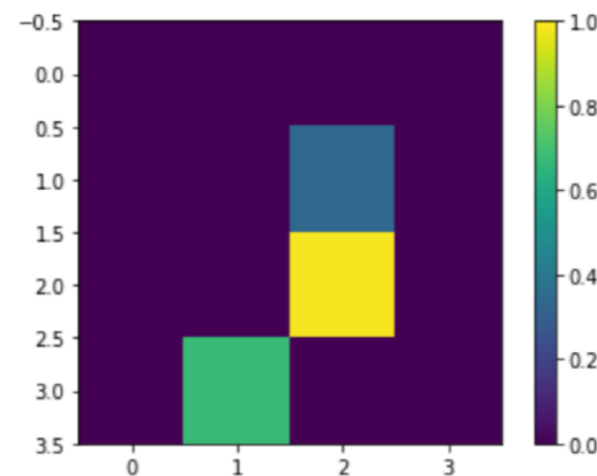
まとめ

- 量子コンピュータデバイスは急激に進展
- 近未来的にはNISQデバイスの応用、長期的にはFTQCが目標
- 機械学習に応用した場合の優位性はまだ不明
- ライブラリなどの開発環境も整備されつつある
- 量子機械学習にはハイプも多いので要注意

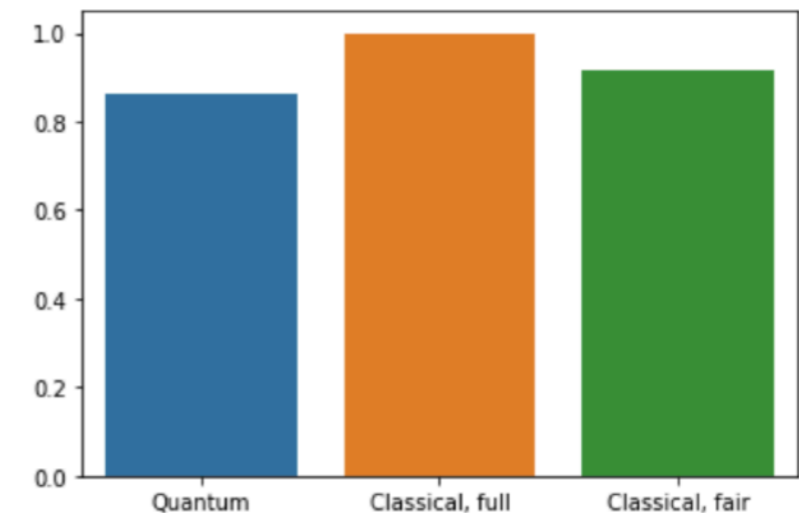


28×28ピクセル

次元が大きすぎるとそもそも
入力できない



4×4ピクセル



次元削減しても古典ベストには勝てていない