

日本語訳『Qiskit Textbook Machine Learning』勉強会

- Introduction
- Parameterized quantum circuits

Daiki Murata

Senior Architect - IBM Consulting



Miss the old version of the textbook? Access it [here](#)

Qiskit Textbook (beta)

Course pages

Introduction

Parameterized quantum circuits

Data encoding

Training parameterized quantum circuits

Supervised learning

Variational classification

Quantum feature maps and kernels

Unsupervised learning

Quantum generative adversarial networks

Project

Quantum Tokyo



Congratulations!



量子機械学習＝量子×機械学習

現在の機械学習の取り組みについて量子計算を活かせそう？

- 観点①：問題設定

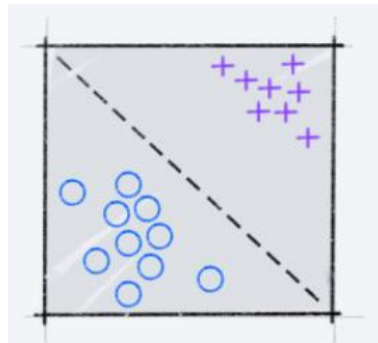
与えられた問題に対する有効度をどのように評価するか

- 観点②：モデル

学習をどんな最適化問題に落とし込むか

- 観点③：計算

学習をどのように効率的に行うか



例: 教師あり学習

→ 行列・ベクトル計算は量子力学の持つ線形代数の構造と相性がよさそう

→ 内積や行列の固有値計算に対し量子加速が期待できそう

量子機械学習の4つのアプローチ

データの生成と処理の方式の組み合わせ

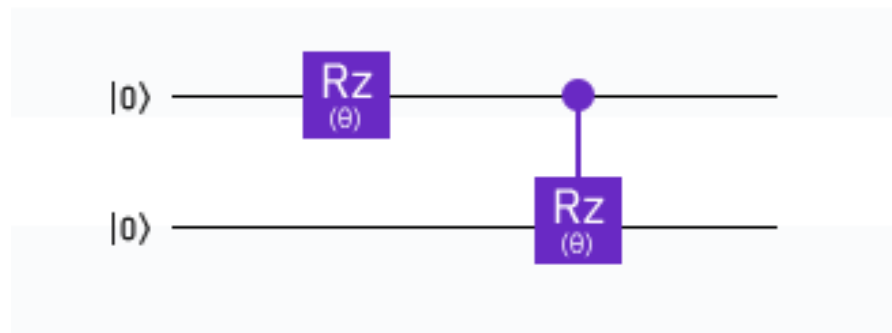
- CCアプローチ
従来の機械学習
- QCアプローチ
機械学習の量子計算への応用
- **CQアプローチ**
従来の機械学習の問題に量子アルゴリズムを適用
- QQアプローチ
量子データに量子アルゴリズムを適用

Type of algorithm		Type of data
CC	CQ	
QC	QQ	

パラメータ化された量子回路とは

チューニング可能なパラメータを持つ量子回路のこと。

特にNISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum)量子アルゴリズムの根幹を担う概念です。



パラメータ化された量子回路の特徴づけ

Textbookの参考文献1 *Sim et al. (2019)*では機械学習モデルとして最適なパラメータ化された量子回路を選択するために以下の指標を提唱しています。

- ・ **Expressibility** (表現能力)
- ・ **Entangling Capability** (エンタングリング能力)

回路の定量化

Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms

Sukin Sim,^{1,2,*} Peter D. Johnson,² and Alán Aspuru-Guzik^{2,3,4,5,†}

¹*Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University, 12 Oxford Street, Cambridge, MA 02138, USA*

²*Zapata Computing, Inc., 501 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA 02139, USA*

³*Department of Chemistry and Department of Computer Science, University of Toronto, 80 St. George Street, Toronto, ON M5S 3H6, Canada*

⁴*Canadian Institute for Advanced Research (CIFAR) Senior Fellow, 661 University Avenue, Suite 505, Toronto, ON M5G 1M1, Canada*

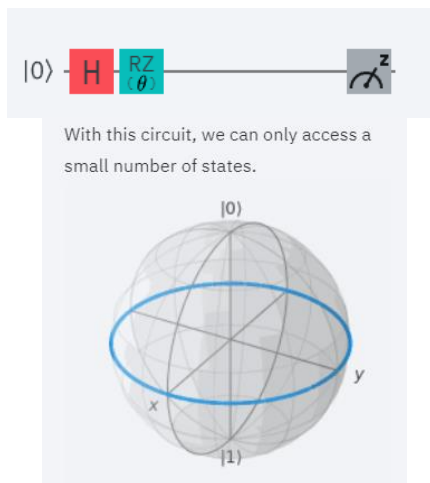
⁵*Vector Institute, 661 University Avenue, Suite 710 Toronto, ON M5G 1M1, Canada*

(Dated: May 28, 2019)

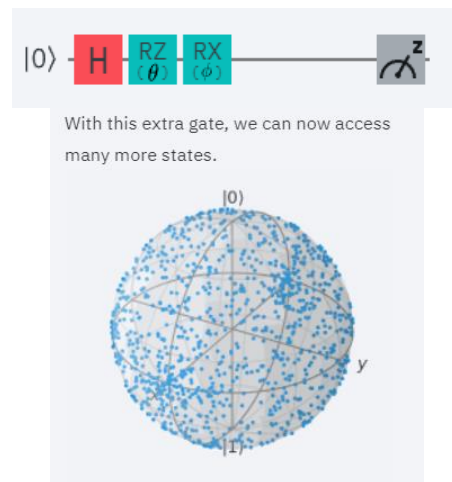
Expressibility

「量子回路から生成され得る状態がブロッホ球のどれだけカバーできるか」の値
(1量子ビットの場合)

→一様分布からのズレで評価



expressibility低



expressibility高

Entangling Capability

「量子回路から生成され得る状態がどれだけエンタングルされた状態か」の値
→Meyer-Wallach測度の平均で評価

※エンタングルされた状態

ある2つの量子ビットの状態 $|\psi\rangle_A$ と $|\psi\rangle_B$ からなる状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ が個別の量子状態のテンソル積で表せない状態

例:ベル状態

$$|B_{00}\rangle := \frac{1}{2}(|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B)$$

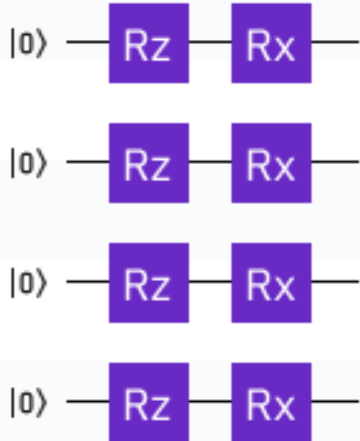
Entangling Capability

制御ゲートなし

→エンタングルされない

→Entangling Capability=0

Circuit A

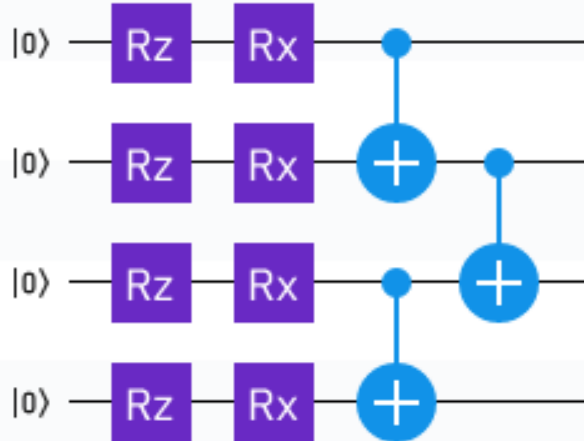


制御ゲートあり

→エンタングルされる

→Entangling Capability>0

Circuit B



様々な回路での数値計算

Expressibility

- ・ レイヤーを増やすほど値は改善
- ・ ある程度を超えると値が飽和

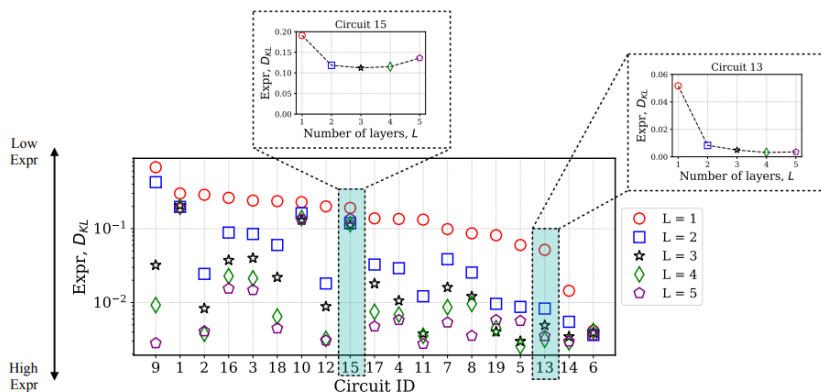


Figure 3: Expressibility values (or KL divergences) computed for the benchmark circuits from Fig. 2 with circuit widths of $n=4$ qubits. Marker colors indicate different numbers of circuit layers (L) applied to a circuit template. Data for each circuit are presented in the order of increasing expressibility (i.e. decreasing KL divergence) for $L=1$. The zoomed-in plots of the two highlighted regions show instances of “expressibility saturation” discussed in the text.

Entangling Capability

- ・ レイヤーを増やすほど値は改善
- ・ 小レイヤーでも十分な回路はレイヤー増で改悪

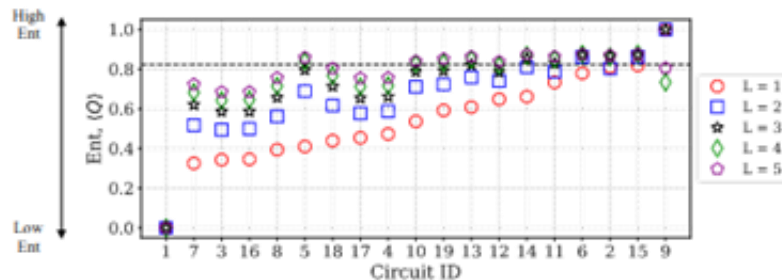
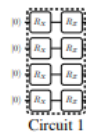
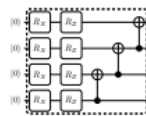


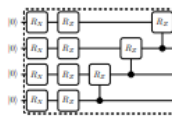
Figure 4: Entangling capability values for the benchmark circuits with widths of $n=4$. Marker colors indicate the different numbers of circuit layers (L) applied. Data for each circuit are presented in the order of increasing entangling capability for $L=1$. The black dashed line shows the mean Q value for random pure states.



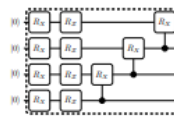
Circuit 1



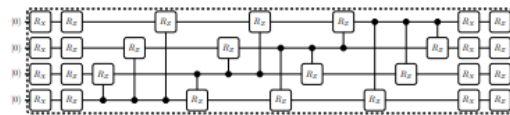
Circuit 2



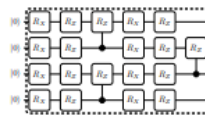
Circuit 3



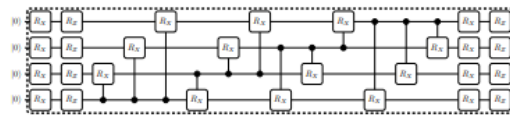
Circuit 4



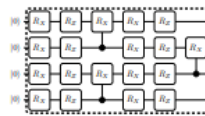
Circuit 5



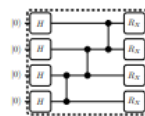
Circuit 6



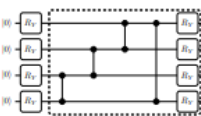
Circuit 7



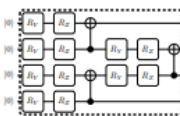
Circuit 8



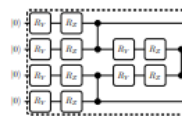
Circuit 9



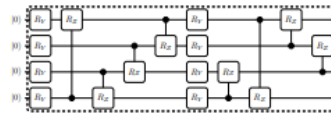
Circuit 10



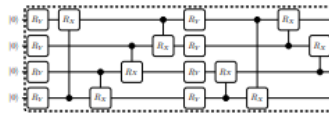
Circuit 11



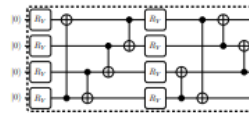
Circuit 12



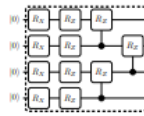
Circuit 13



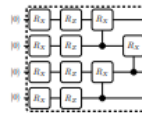
Circuit 14



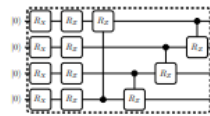
Circuit 15



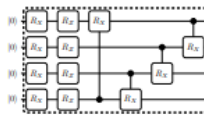
Circuit 16



Circuit 17



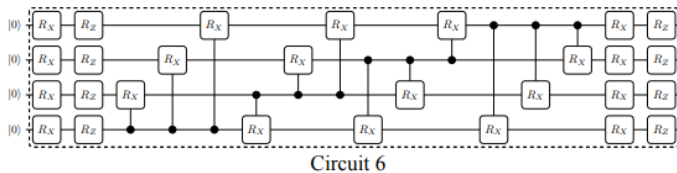
Circuit 18



Circuit 19

パラメータ付き量子回路の評価

・ 今回の例(4量子ビット回路)で適切な回路の候補は⑥に見えます。



・ ただしパラメータ数と回路の深さ(コスト)を考慮すると⑭が適当かもしれないですね。

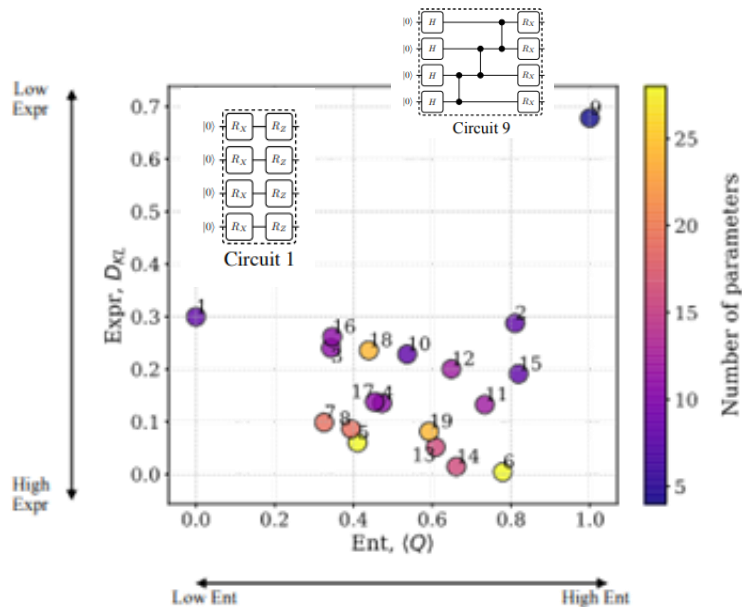
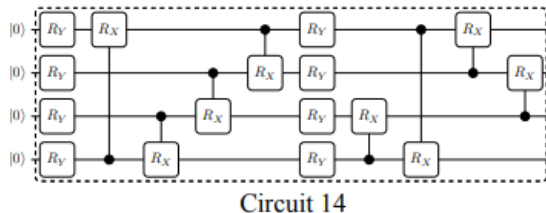


Figure 6: Circuit descriptor landscape for circuit instances with width of $n = 4$ qubits and depth of $L = 1$ layer. Circuits are labeled by their IDs assigned in Fig. 2. Marker color indicates the number of parameters associated with the circuit instance.

分類タスクと指標の関係(例)

後続の研究(*Hubregtsen et al. (2020)*)では分類タスクにおいて、Expressibilityと分類精度は強い相関があることが報告されています。

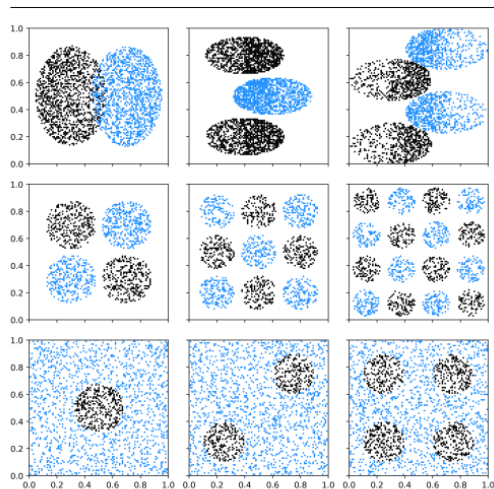


Fig. 2: Datasets used to benchmark classification accuracy, labelled numerically in the vertical direction and alphabetically in the horizontal direction

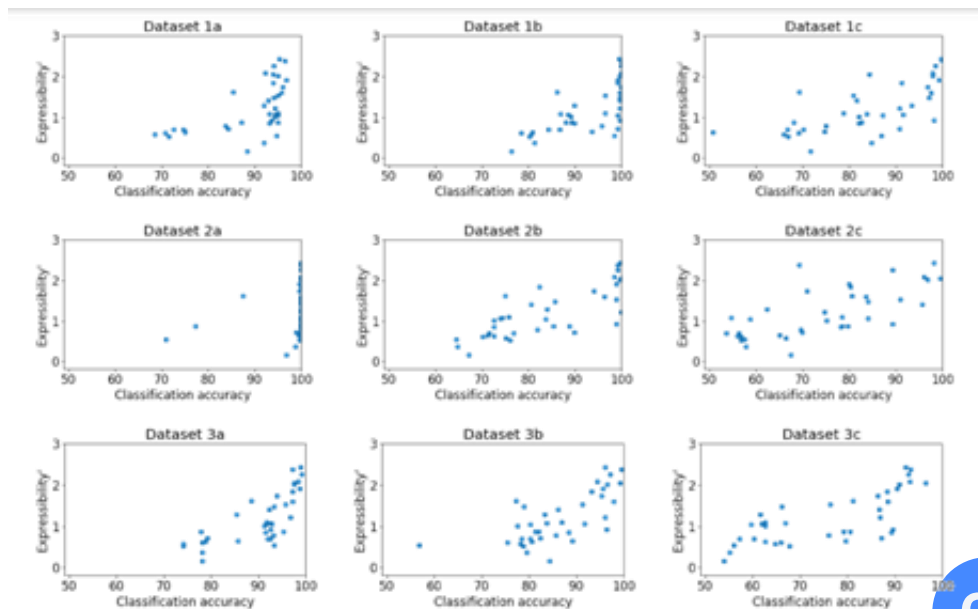


Fig. 4: Classification accuracy versus expressibility'

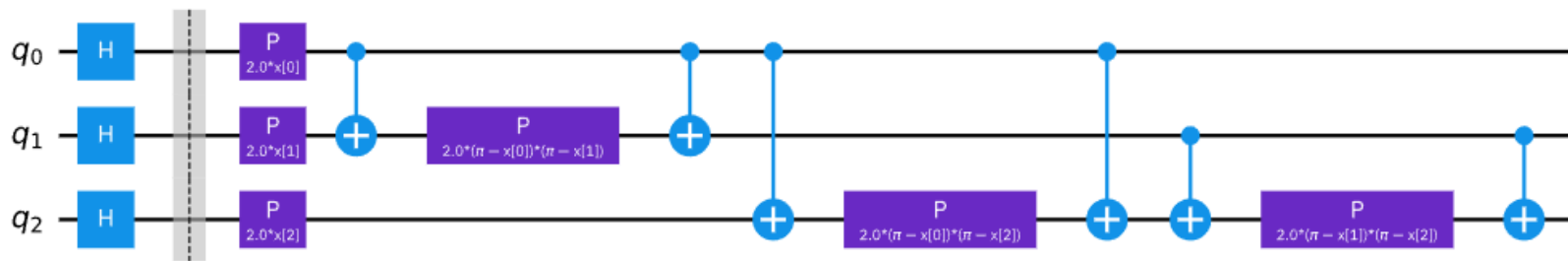
機械学習におけるパラメータ付き量子回路

主なユースケースは2つ

- データのエンコーディング

例: ZZFeaturemap (詳細は*Quantum feature maps and kernels*の節で)

$$U_{\Phi(x)} = \prod_d U_{\Phi(x)} H^{\otimes n}, U_{\Phi(x)} = \exp(i \sum_{S \subseteq [n]} \phi_S(x) \prod_{k \in S} P_k)$$



- 学習モデルの構築

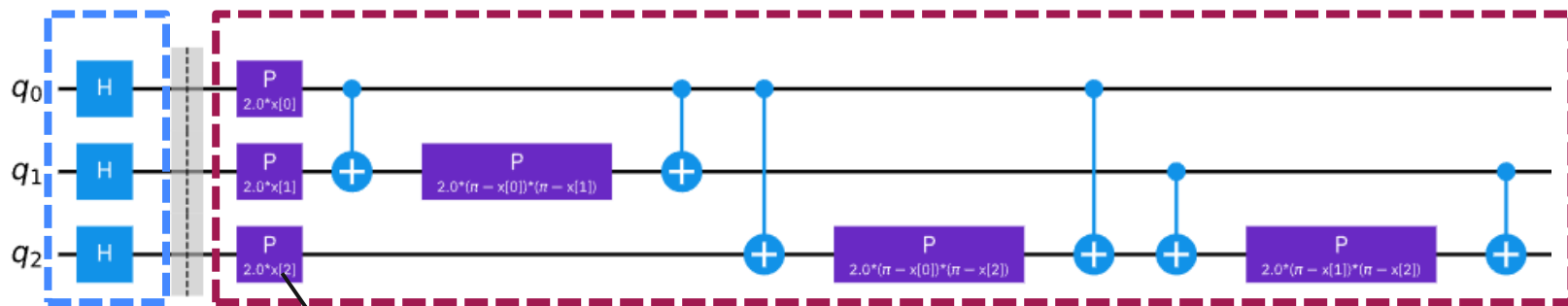
量子回路を確認してみる

ZZFeaturemapの回路の中身を確認

$$\mathcal{U}_{\Phi(x)} = \prod_d U_{\Phi(x)} H^{\otimes n}$$

$$\phi_S: x \mapsto \begin{cases} -x, & \text{if } S = \{i\} \\ (\pi - x_i)(\pi - x_j), & \text{if } S = \{i, j\} \end{cases}$$

$$U_{\Phi(x)} = \exp(i \sum_{S \subseteq [n]} \phi_S(x) \prod_{k \in S} P_k) = \exp(i(x_0 Z + x_1 Z + x_3 Z + x_1 x_2 ZZ + x_2 x_3 ZZ + x_3 x_1 ZZ))$$



$$e^{ixZ} = \begin{pmatrix} e^{ix} & 0 \\ 0 & e^{-ix} \end{pmatrix} = e^{ix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i2x} \end{pmatrix} = e^{ix} p(2x)$$

$$\text{※} p(\lambda) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\lambda} \end{pmatrix}$$

Qiskitにおける実装(qiskit.circuit.library)

※以下はテキストの例

- ZZFeaturemap

- TwoLocal / Nlocal

回転ゲートの層とエンタングルメントの層を交互に繰り返す

