

# 応用レベル(量子機械学習):テキスト

## 1 量子機械学習とは

- 量子機械学習: Quantum Machine Learning、QML
- 広い意味では、「機械学習と量子情報の相乗効果を用いたアプローチ全般」を指す。
- 狭義には、次のいずれかである。
  - ・ 量子コンピュータを用いた機械学習
  - ・ 量子の知見に基づいた機械学習
- 直感的には、従来の機械学習手法に対して量子の理論および特性を適用することにより、新たな優位性(例えば計算量の削減)を見出そうというものである。

機械学習

+

量子

- ・ 量子の知見
- ・ 量子コンピュータ

=

量子機械学習

## 2 機械学習における量子コンピュータの可能性

- 従来の機械学習分野における「ブレークスルー」は、計算能力の向上やデータセットの規模の拡大に基づいた成果がほとんどである。言い換えると、根本的に新しい手法が開発されたことによるものではない。
- ニューラルネットワークや深層学習などの最新の手法は基本的に1990年代以前に発明されており、新しいものではない。多くの機械学習のタスクは難しい最適化問題へと変換されてしまうため、根本的に新しい手法を見つけ出すことは困難。
- この問題を解決するためには、コンピュータは解を含む広大な領域から手当たり次第に最適な解の候補を見つけ出さなければならない。これは量子計算の活用を考える上で興味深いポイントであり、量子計算が機械学習手法の開発を大きく前進させる可能性を秘めている。

## 3 参考資料

[「量子コンピュータによる機械学習」\(共立出版\)](#)

[「A Few Useful Things to Know about Machine Learning」\(PDF\)](#)

## 1 4つのアプローチ

機械学習への量子適用には、従来の手法を含めて4つのアプローチが考えられる。

		データ処理デバイス	
		C	Q
データを生成する系	C	①CC	③CQ
	Q	②QC	④QQ

C: 古典  
Q: 量子

- ① CCアプローチ  
機械学習における従来のアプローチ。  
データ生成、データ処理ともに古典処理にて行う。
- ② QCアプローチ  
データ生成を量子で行う。  
機械学習が量子計算にどのように役立つか調べるもの。
- ③ CQアプローチ  
データ処理を量子で行う。  
主な課題はデータマイニングのための量子アルゴリズムの設計。
- ④ QQアプローチ  
データ生成、データ処理ともに量子で行う。  
研究成果は現在のところ**わずかしか発表されていない**。

## 2 CQアプローチにおける2つの方策

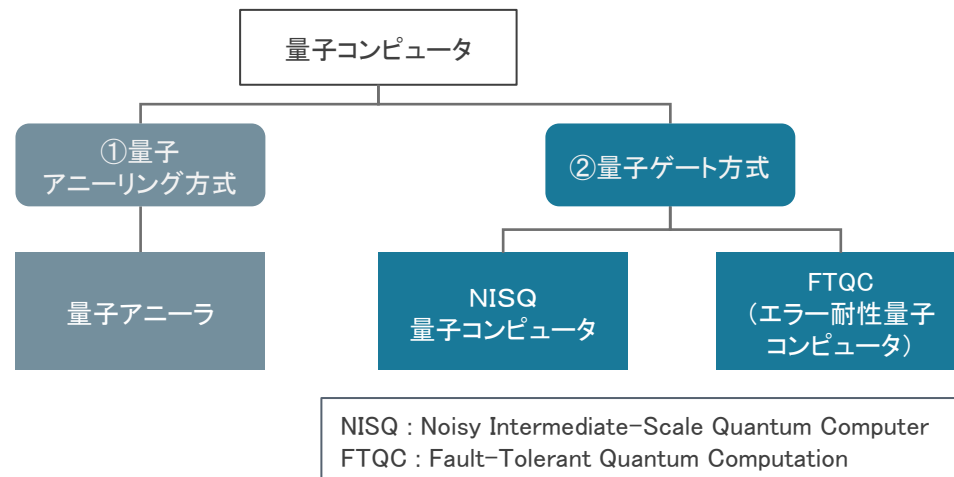
- 翻訳的アプローチ  
古典による機械学習のモデルを量子力学の言語に翻訳して**アルゴリズムの高速化**を目指すアプローチ。  
ニューラルネットワークなどのモデルの結果を再現し、計算全体もしくは一部を量子デバイスに委託する。  
量子加速性により、**既存アルゴリズムの高速化**をねらう。
- 探索的アプローチ  
量子コンピュータの利用を前提としたとき、どのタイプの機械学習モデルがその物理学的な特性や制約、形式、言語、提唱されている利点に適合するかを問うもの。量子デバイスオリジナルの学習モデルであり、古典アルゴリズムにはないものとなる。  
この方策が持つさまざまな潜在的な可能性は**未だ解明されていない**。

## 3 参考資料

[「量子コンピュータによる機械学習」\(共立出版\)](#)  
[QQアプローチの例:「Quantum-enhanced machine learning」](#)  
[JGS2020 量子コンピュータ\(PX-103\) 発表資料\(KMAP内\)](#)

## 1 量子機械学習手法のアプローチ

量子コンピュータにはいくつかの種類があり、大きくは次のように分類できる。



量子アニーリング方式〔[基礎レベルテキスト4-3](#)〕の量子コンピュータは [組合せ最適化](#)〔[基礎レベルテキスト 5-1](#)〕に特化しているため、量子機械学習は [量子ゲート方式](#)〔[基礎レベルテキスト4-2](#)〕に適用される手法となる。

量子ゲート方式は、さらにNISQとFTQC(エラー耐性量子コンピュータ)に分類することができる。量子コンピュータへの期待の中心はFTQCにあるが、ハードウェアは開発途上であり、FTQCの実現にはまだ時間がかかると考えられている。そこで現在はNISQを対象とした研究が行われており、量子機械学習アルゴリズムについても同様にNISQ向けの研究が行われている。

## 2 NISQ向けアルゴリズム

NISQ向けアルゴリズムで考慮すべきは、「計算過程で生じるエラーへの対策」である。(FTQCでは計算過程で生じるエラーが訂正されることから、エラーを気にせずアルゴリズムを構築することができるが、NISQでは同じようにはいかない。)

エラー対策手法には、例えば「計算過程で生じるエラー(ノイズ)を統計的な処理により低減させる」といったものがある。こうしたさまざまな工夫により、NISQ向けのアルゴリズムを実現している。

以下はNISQ向けアルゴリズムの例である。

- 変分量子固有値ソルバー(VQE) 〈量子化学計算〉
- 量子近似最適化アルゴリズム(QAOA) 〈最適化〉
- 量子回路学習(QCL) 〈量子機械学習〉

FTQCが実現されるまでの間は、NISQ向けアルゴリズムを使って現実課題を解くことが量子コンピュータ普及のための一つのミッションとなっている。

## 3 参考資料

[IPA 2020年度未踏ターゲット事業「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」\(PDF\)](#)

- 機械学習および量子機械学習に関する手法を一覧で整理する。あわせて、量子機械学習を適用することによるメリットを整理する。

カテゴリ	古典機械学習手法	量子機械学習への応用有無	量子機械学習の適用によるメリット
教師あり学習（回帰）	線形回帰	線形回帰	
	サポートベクター回帰（SVR）	—	
教師あり学習（分類）	ロジスティック回帰	—	
	サポートベクターマシン（SVM）	QSVM	量子回路学習と同じ。
	最近傍法、k近傍法	—	
	ニューラルネットワーク	量子ニューラルネットワーク、量子回路学習	重ね合わせの原理による高次元の特徴量空間が利用可能で、古典コンピュータ上で効率的に表現しにくい非線形モデルも効率的に構築できると期待される。またユニタリー変換のみでモデルを構築することがある種の正則化として機能し、過学習が抑えられる。 <出典：嶋田義皓「量子コンピューティング」p.158>
			量子力学の重ね合わせの原理から、指数関数的に増える多数の計算基底を使って状態を表現できることが量子コンピュータの強みです。この強みを生かすことで、データ間の複雑な相関を学習できる可能性が生まれます。そこに量子機械学習の最も大きな強みがあると考えられています。 <出典： <a href="#">東京大学素粒子物理国際研究センター「量子コンピューティング・ワークブック」</a> >
	畳み込みニューラルネットワーク（CNN）	量子畳み込みニューラルネットワーク	利点不明。学習面や予測精度の面で量子回路がCNNを上回るのは難しそう。 <出典：嶋田義皓「量子コンピューティング」p.164>
	回帰ニューラルネットワーク（RNN）	—	
	決定木	—	
	ランダムフォレスト	—	
教師なし学習	主成分分析（PCA）	量子主成分分析	
	k-means（k平均法）	量子k-means、Q-means	出力を得るために必要とされる操作が、1回のアダマールと2回の測定のみ。これは入力ベクトルやデータセットの規模に関係なく有効。例えば、データセットがサイズ100万の訓練ベクトル10億個で構成される場合でも3つの演算にかかる実行時間が同程度である定数時間アルゴリズムが存在するだろう。 <出典：M. Schuld他「量子コンピュータによる機械学習」p.21>
	ガウス混合モデル	ガウス混合モデル	

カテゴリ	古典機械学習手法	量子機械学習への応用有無	量子機械学習の適用によるメリット
強化学習	GAN	QGAN	古典モンテカルロ数値積分計算より、量子モンテカルロ積分は効率的。(参考: <a href="#">S. Woener他「Quantum risk analysis」</a> ) 量子モンテカルロ計算では、確率分布を量子回路に再現するが、その際、QGANを使うと再帰的な方法よりも少数のゲートで実装可能で、計算コストが減らせる。(参考: <a href="#">中村悠馬「Systematic Preparation of Arbitrary Probability Distribution with a Quantum Computer」</a> )
	Q-Learning	—	
	Deep Q-Learning (DQN)	量子強化学習	
その他の手法	—	量子データフィッティング	
		量子勾配法	
		量子最適化近似 (QAOA)	QAOAで大規模な問題を解くには多数の量子ビットが必要で、実機の量子ビットの接続トポロジーと問題のグラフは必ずしもマッチしないので、組み込みのための情調整も必要。近似解アルゴリズムとしての性能もそれほど明らかではない。QUBO形式の組み合わせ最適化問題を扱う専用マシンは多く、NISQ上のQAOAアルゴリズムがサイズや解の精度など何らかの点で優位となるような問題設定の発見がまたれる。 <出典: 嶋田義皓「量子コンピューティング」p.153>
	—	量子自然言語処理	
	—	量子Autoencoder	
※全体	—	—	量子機械学習がその恩恵を一番受けることができるのは、おそらく量子的なデータやモデルの背景に量子系があるような場面の学習問題に適用したときであると考えられる。 <出典: <a href="#">御手洗光祐他「量子コンピュータを用いた変分アルゴリズムと機械学習」</a> >





本資料の著作権は、日本アイ・ビー・エム株式会社（IBM Corporationを含み、以下、IBMといいます。）に帰属します。

ワークショップ、セッション、および資料は、IBMまたはセッション発表者によって準備され、それぞれ独自の見解を反映したものです。それらは情報提供の目的のみで提供されており、いかなる参加者に対しても法律的またはその他の指導や助言を意図したものではなく、またそのような結果を生むものでもありません。本資料に含まれている情報については、完全性と正確性を期するよう努力しましたが、「現状のまま」提供され、明示または暗示にかかわらずいかなる保証も伴わないものとします。本資料またはその他の資料の使用によって、あるいはその他の関連によって、いかなる損害が生じた場合も、IBMまたはセッション発表者は責任を負わないものとします。本資料に含まれている内容は、IBMまたはそのサプライヤーやライセンス交付者からいかなる保証または表明を引きだすことを意図したものでも、IBMソフトウェアの使用を規定する適用ライセンス契約の条項を変更することを意図したものでもなく、またそのような結果を生むものでもありません。

本資料でIBM製品、プログラム、またはサービスに言及していても、IBMが営業活動を行っているすべての国でそれらが使用可能であることを暗示するものではありません。本資料で言及している製品リリース日付や製品機能は、市場機会またはその他の要因に基づいてIBM独自の決定権をもっていつでも変更できるものとし、いかなる方法においても将来の製品または機能が使用可能になると確約することを意図したものではありません。本資料に含まれている内容は、参加者が開始する活動によって特定の販売、売上高の向上、またはその他の結果が生じると述べる、または暗示することを意図したものでも、またそのような結果を生むものでもありません。パフォーマンスは、管理された環境において標準的なIBMベンチマークを使用した測定と予測に基づいています。ユーザーが経験する実際のスループットやパフォーマンスは、ユーザーのジョブ・ストリームにおけるマルチプログラミングの量、入出力構成、ストレージ構成、および処理されるワークロードなどの考慮事項を含む、数多くの要因に応じて変化します。したがって、個々のユーザーがここで述べられているものと同様の結果を得られると確約するものではありません。

記述されているすべてのお客様事例は、それらのお客様がどのようにIBM製品を使用したか、またそれらのお客様が達成した結果の実例として示されたものです。実際の環境コストおよびパフォーマンス特性は、お客様ごとに異なる場合があります。

IBM、IBM ロゴは、米国やその他の国におけるInternational Business Machines Corporationの商標または登録商標です。他の製品名およびサービス名等は、それぞれIBMまたは各社の商標である場合があります。現時点でのIBMの商標リストについては、[ibm.com/trademark](http://ibm.com/trademark)をご覧ください。