



WOMEN IN DATA SCIENCE
TOKYO @ IBM

2022/06/03

QUANTUM COMPUTING TALK #2

量子機械学習でMNIST分類

沼田祈史 (Kifumi Numata, IBM)

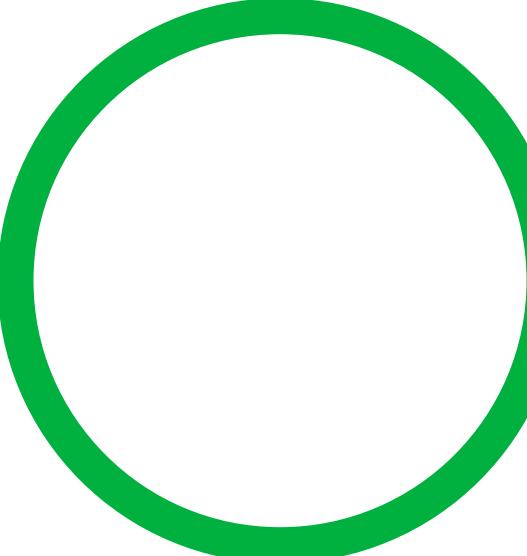


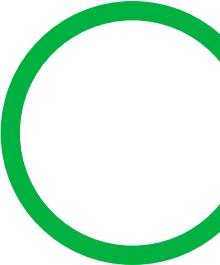
#WiDS2022 #WiDSTokyoIBM



WOMEN IN DATA SCIENCE

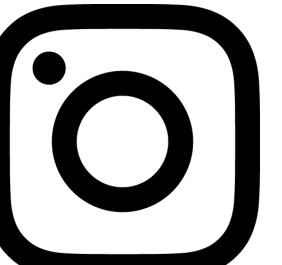
本セッションのSNS投稿について

SNS投稿:  全てOK

 OK: テキストによる文字のみの投稿

 OK: スクリーンショットの画像/動画を含んだ投稿

ハッシュタグ: #WiDS2022 #WiDSTokyoIBM



本日の内容

- 量子コンピューターの計算
- 量子カーネル計算による量子機械学習
- MNIST分類のQiskit実装

一緒にQiskitのコードを実行してみたい方は

[IBM Quantum Lab](https://quantum-computing.ibm.com/) (<https://quantum-computing.ibm.com/>)にログインできる
ようにしておいてください。

ご参考：[『IBM Quantum Composerへの登録（くわしいバージョン）』](https://qiita.com/kifumi/items/7ac33ab7939d2dd796d0)
(<https://qiita.com/kifumi/items/7ac33ab7939d2dd796d0>)

本日の資料



量子コンピューターの量子ビット

「量子重ね合わせ」現象により「0」と「1」を重ね合わせで持つ。

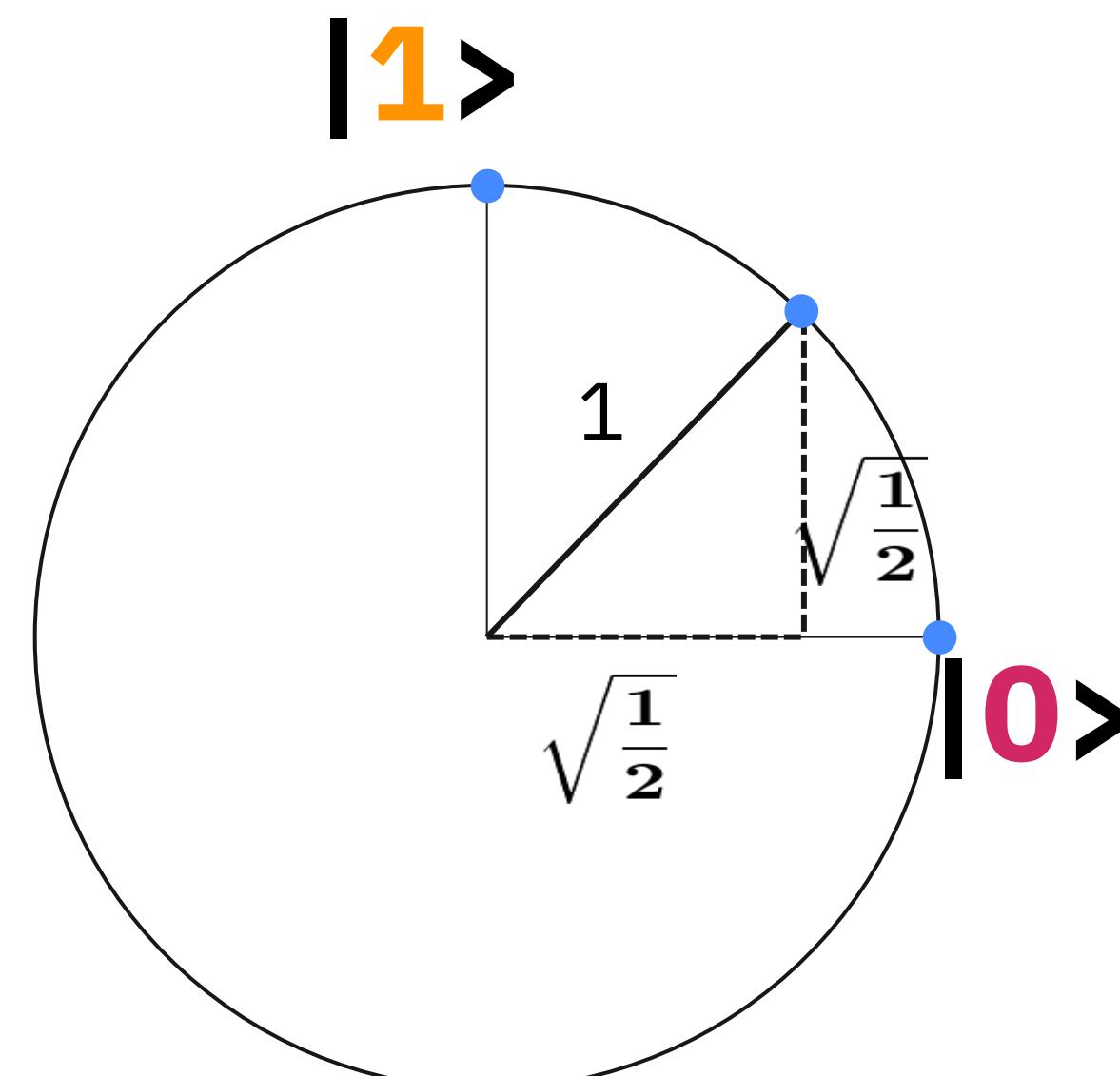
$$\alpha x | 0 \rangle + \beta x | 1 \rangle$$

例

$$|0\rangle = 1 \times |0\rangle + 0 \times |1\rangle$$

$$|1\rangle = 0 \times |0\rangle + 1 \times |1\rangle$$

均しい



量子コンピューターの量子ビット

「量子重ね合わせ」現象により「0」と「1」を重ね合わせで持つ。

$$\alpha \times |0\rangle^{\text{ケット}} + \beta \times |1\rangle^{\text{ケット}}$$

例

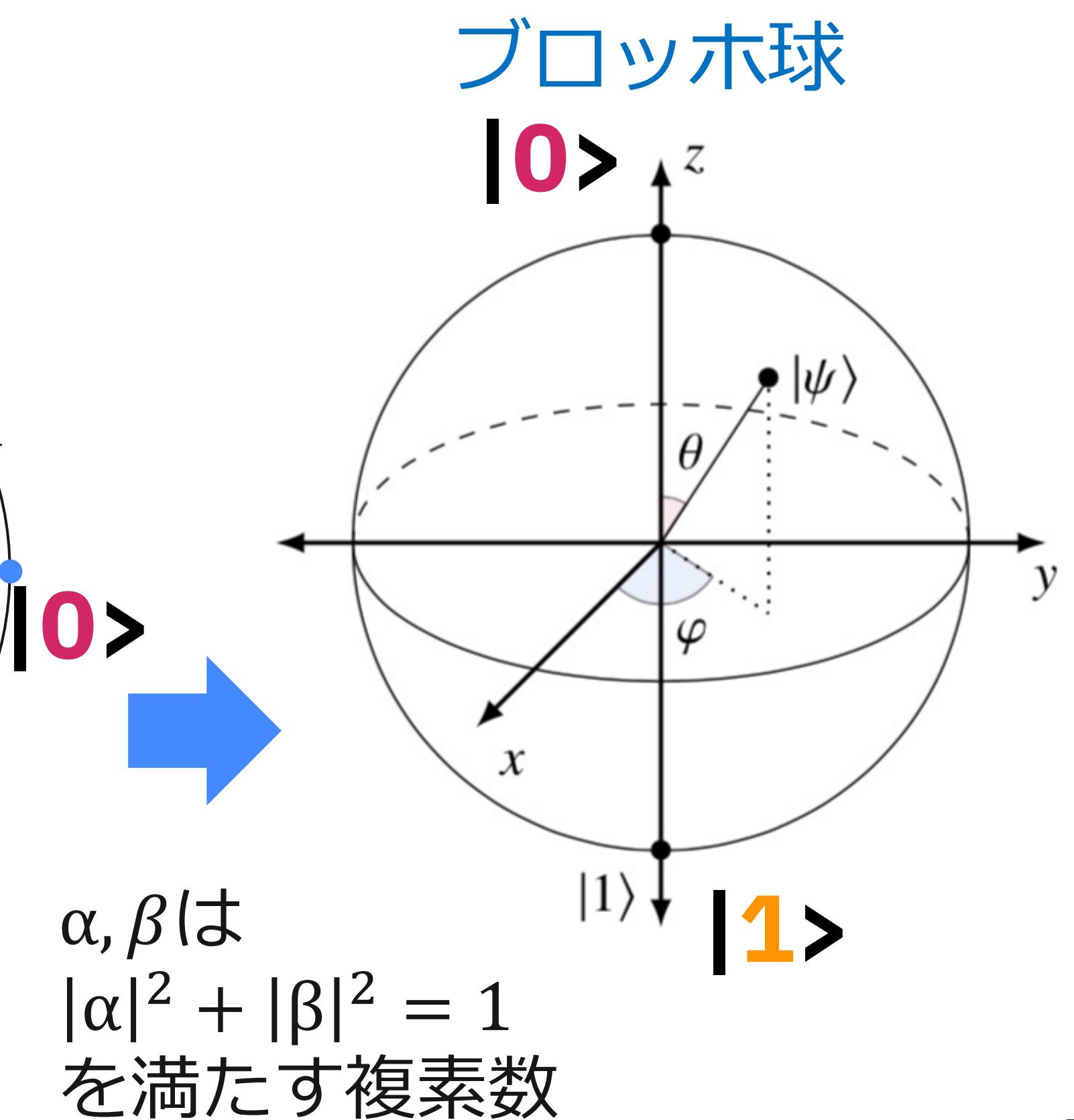
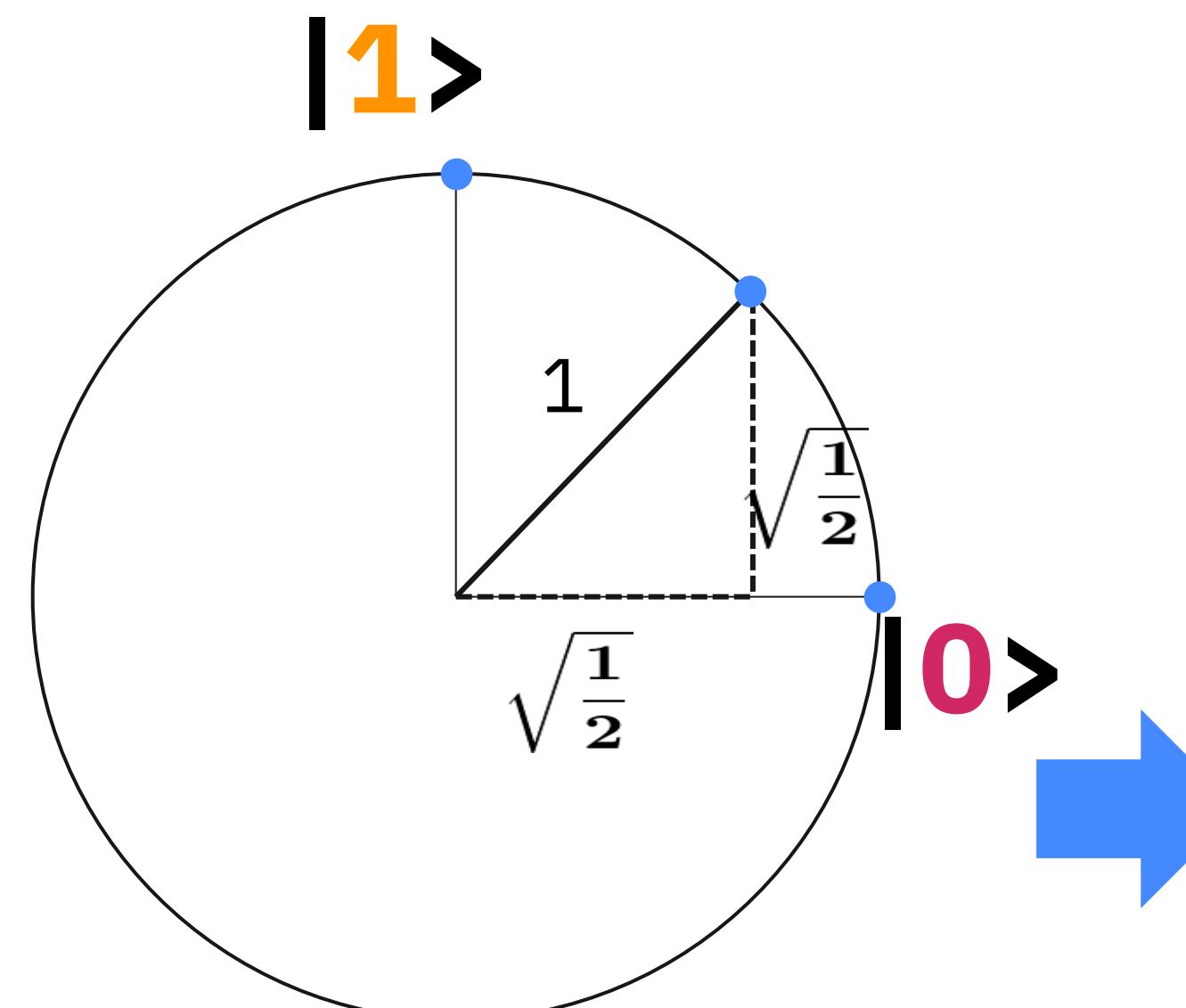
$$|0\rangle = 1 \times |0\rangle + 0 \times |1\rangle$$

$$|1\rangle = 0 \times |0\rangle + 1 \times |1\rangle$$

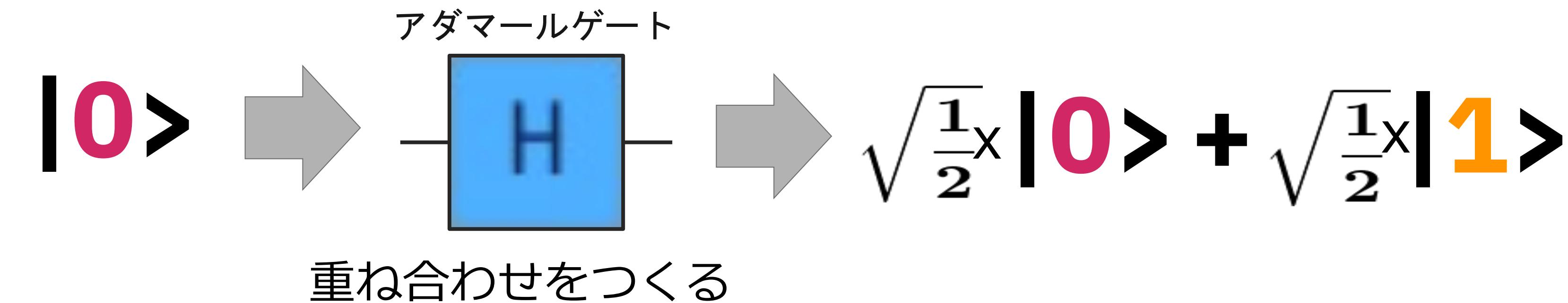
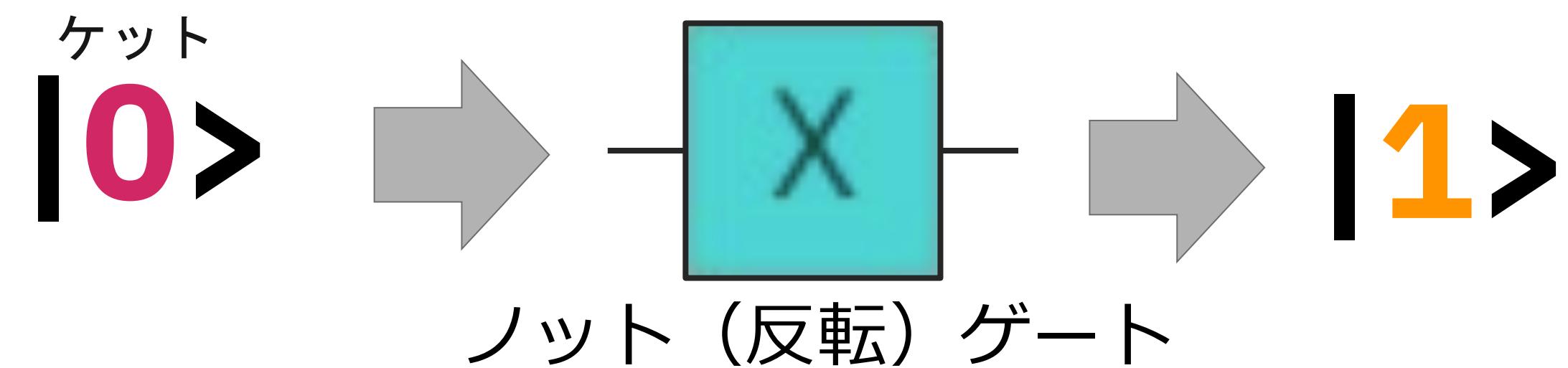
均しい

$$\text{重ね合わせ} : \sqrt{\frac{1}{2}} |0\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} |1\rangle$$

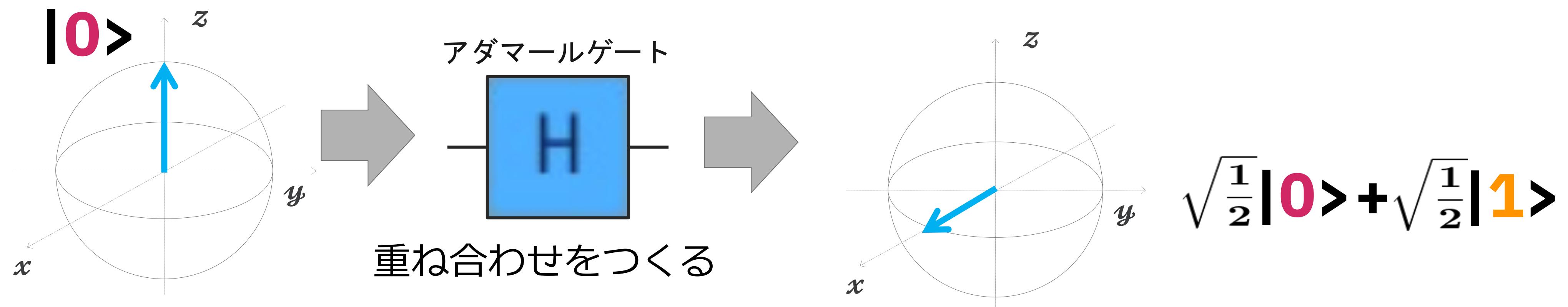
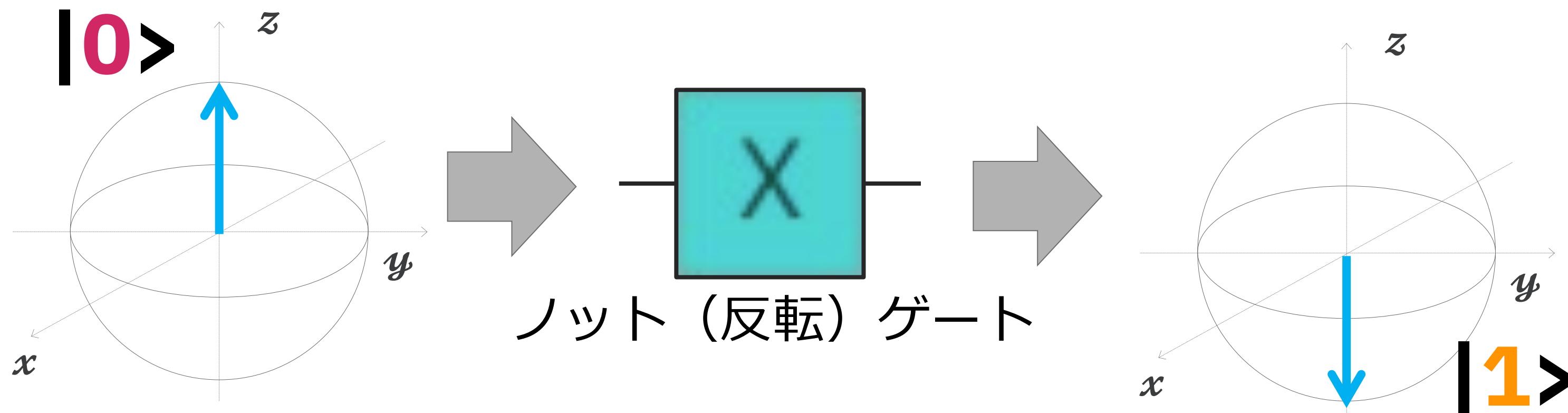
確率振幅 確率振幅



量子コンピューターの計算方法例



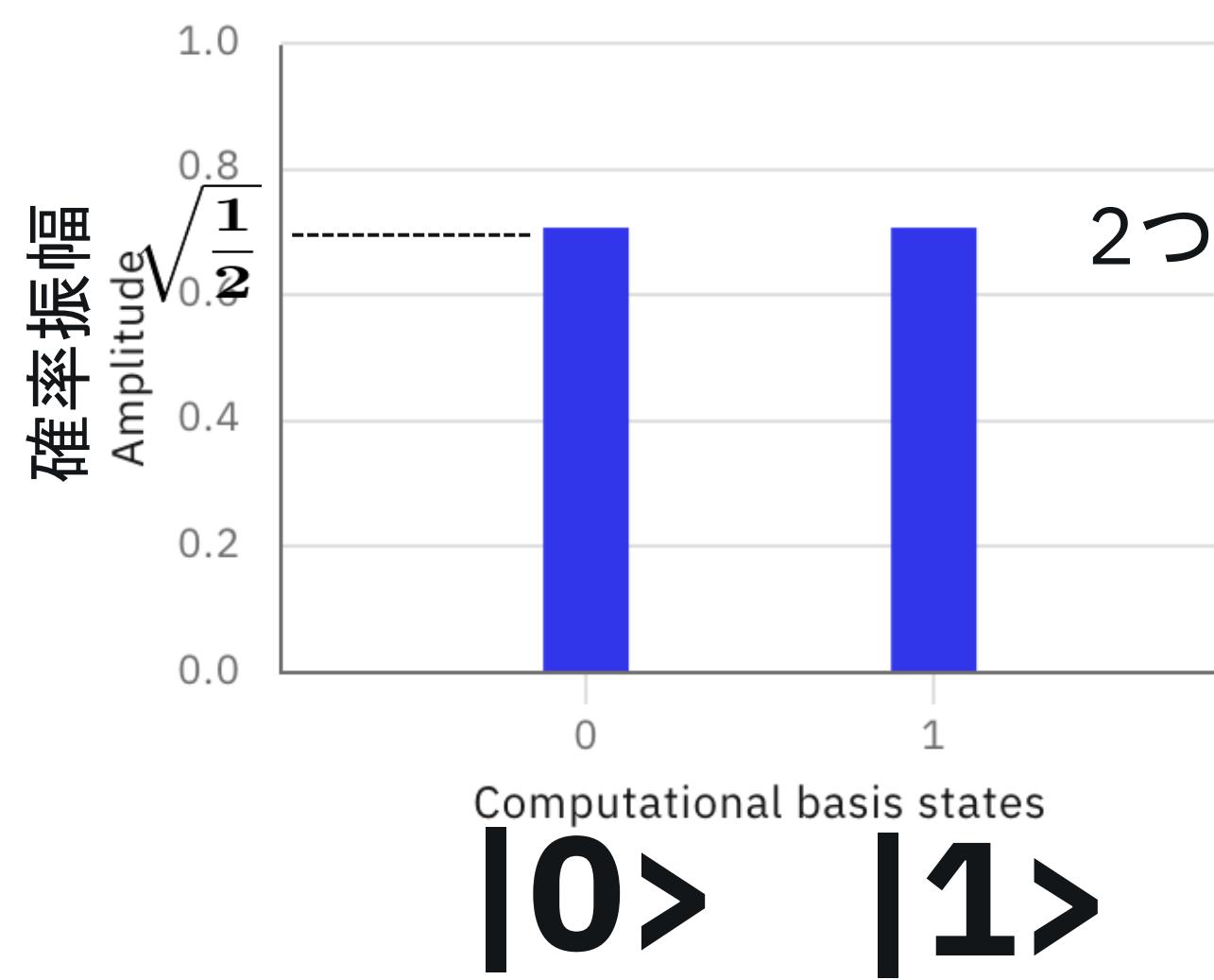
量子コンピューターの計算方法例



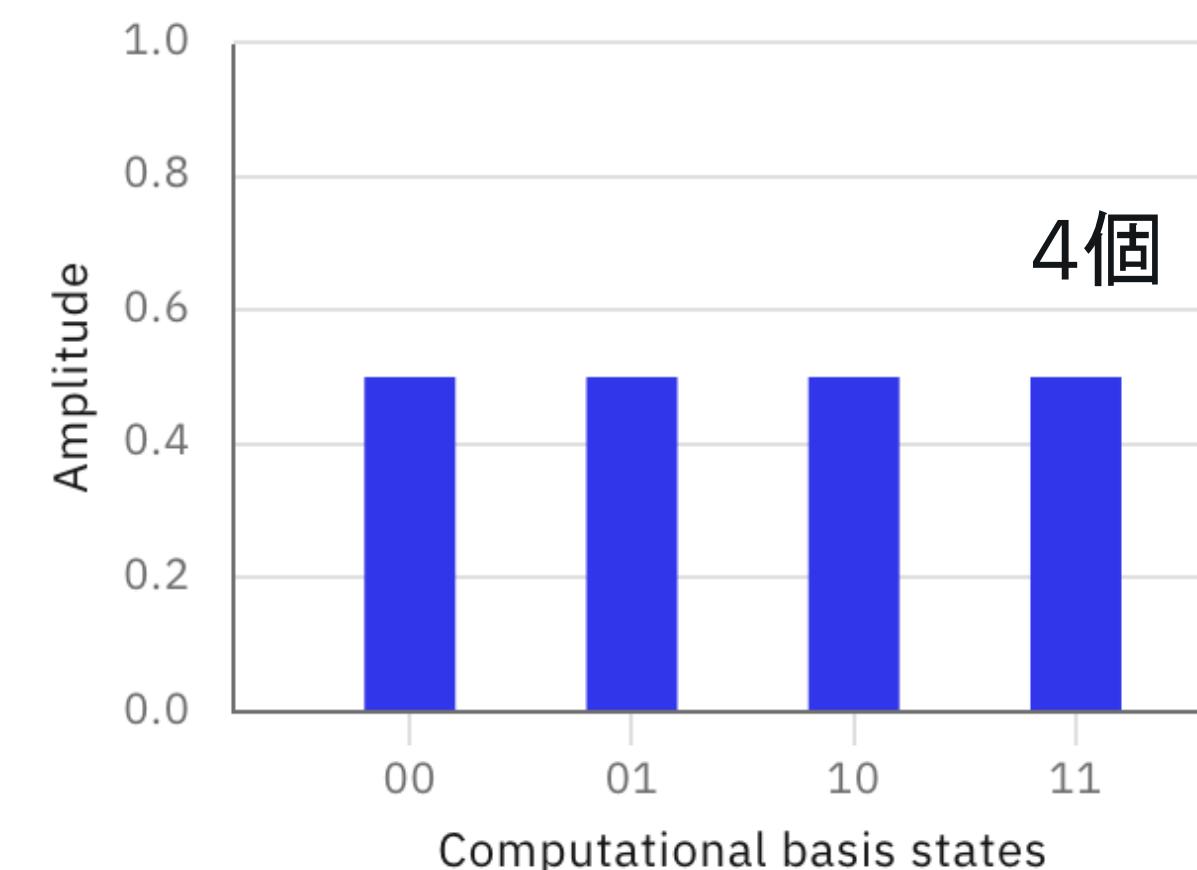
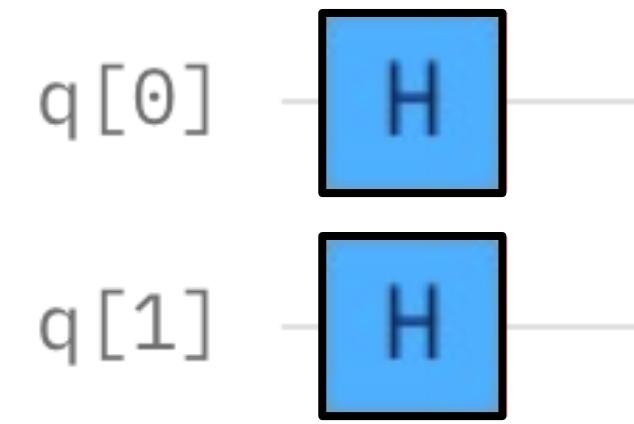
半径が1の球の中心から表面を結んだ**ベクトルの向き**を変える計算

量子回路：量子重ね合わせ

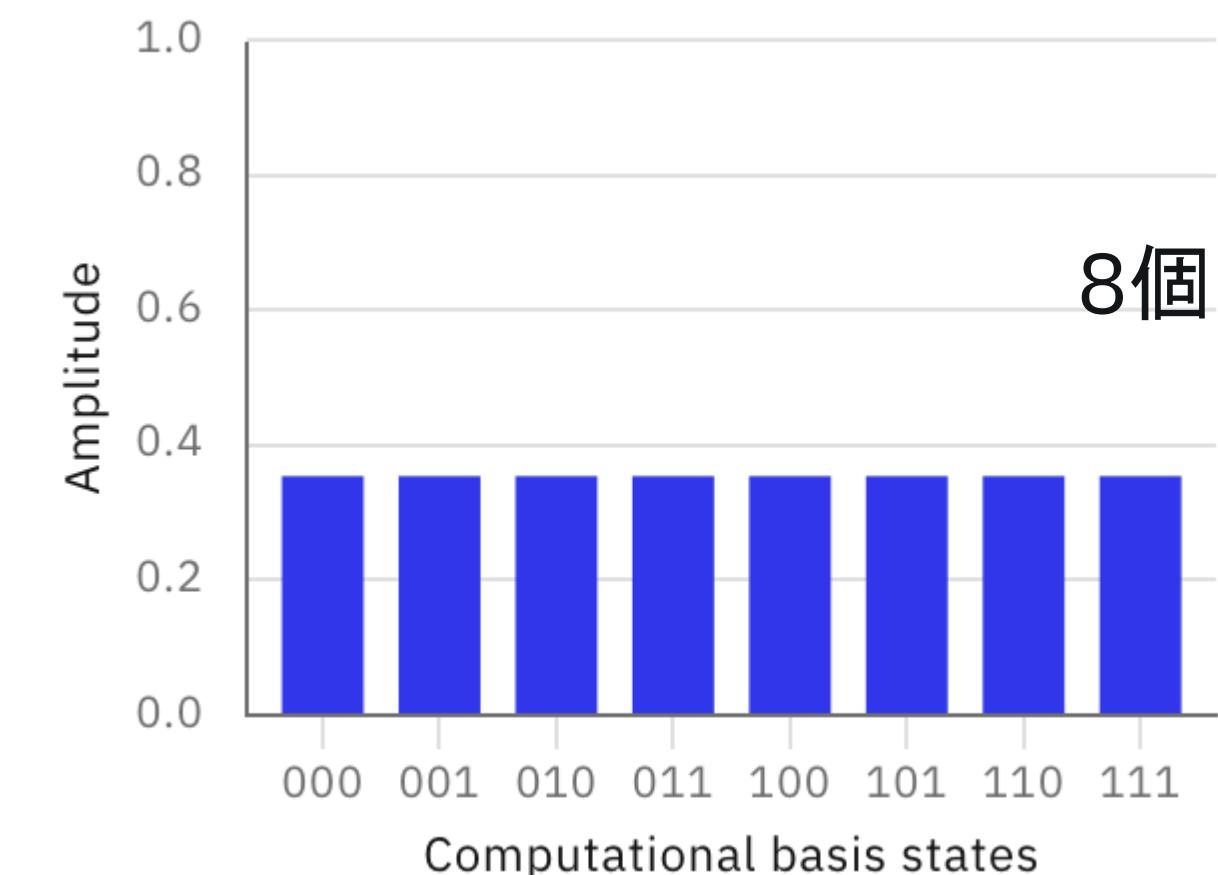
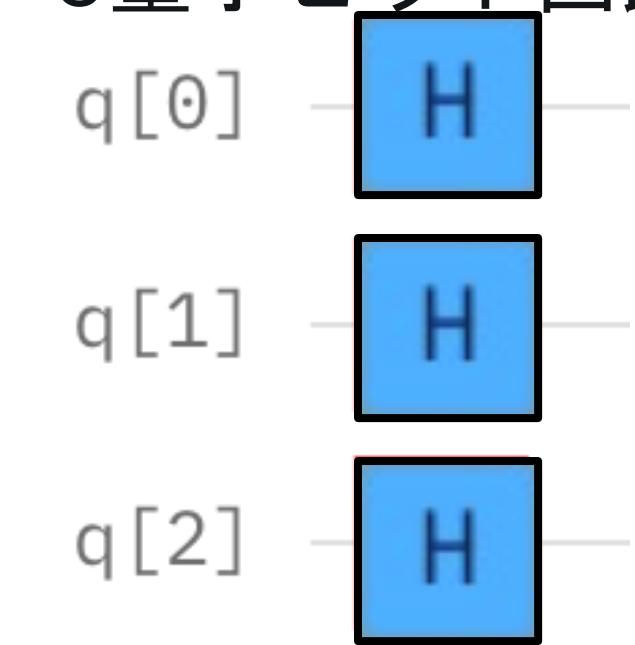
1量子ビット回路



2量子ビット回路



3量子ビット回路

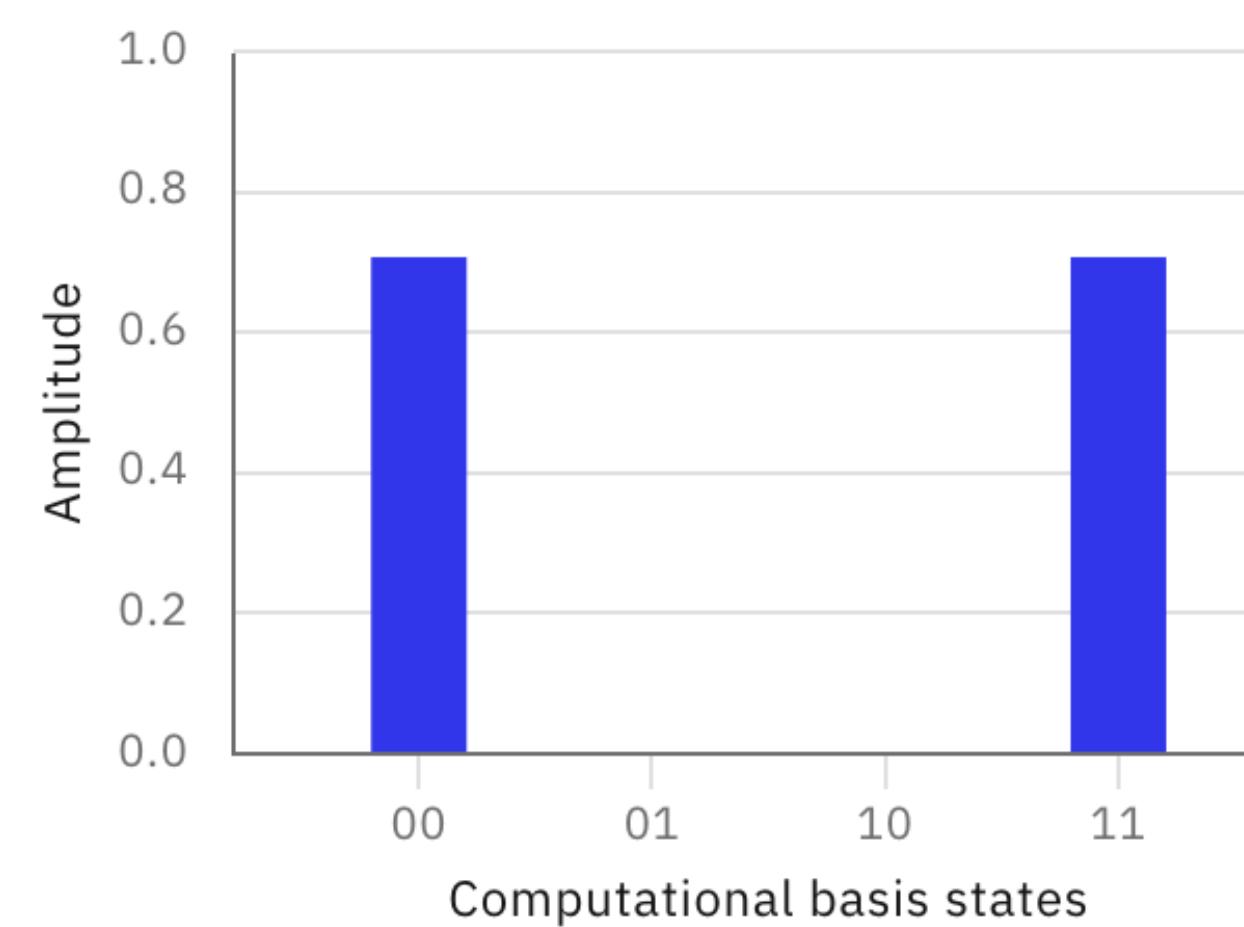
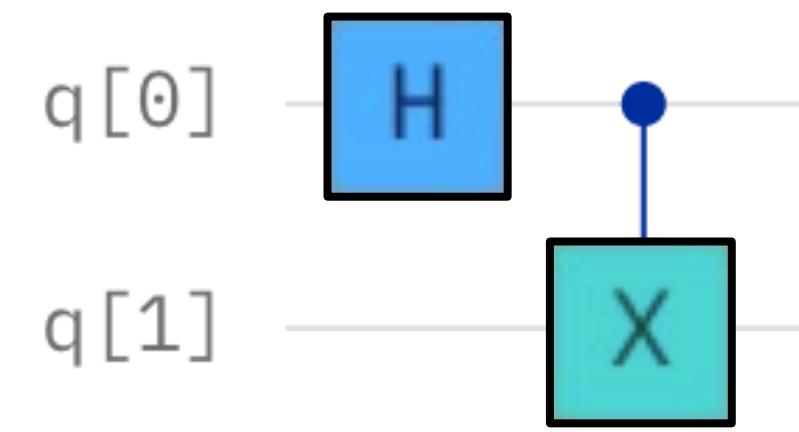


量子ビット数が増えると 2^n 倍で表現できる状態が増える

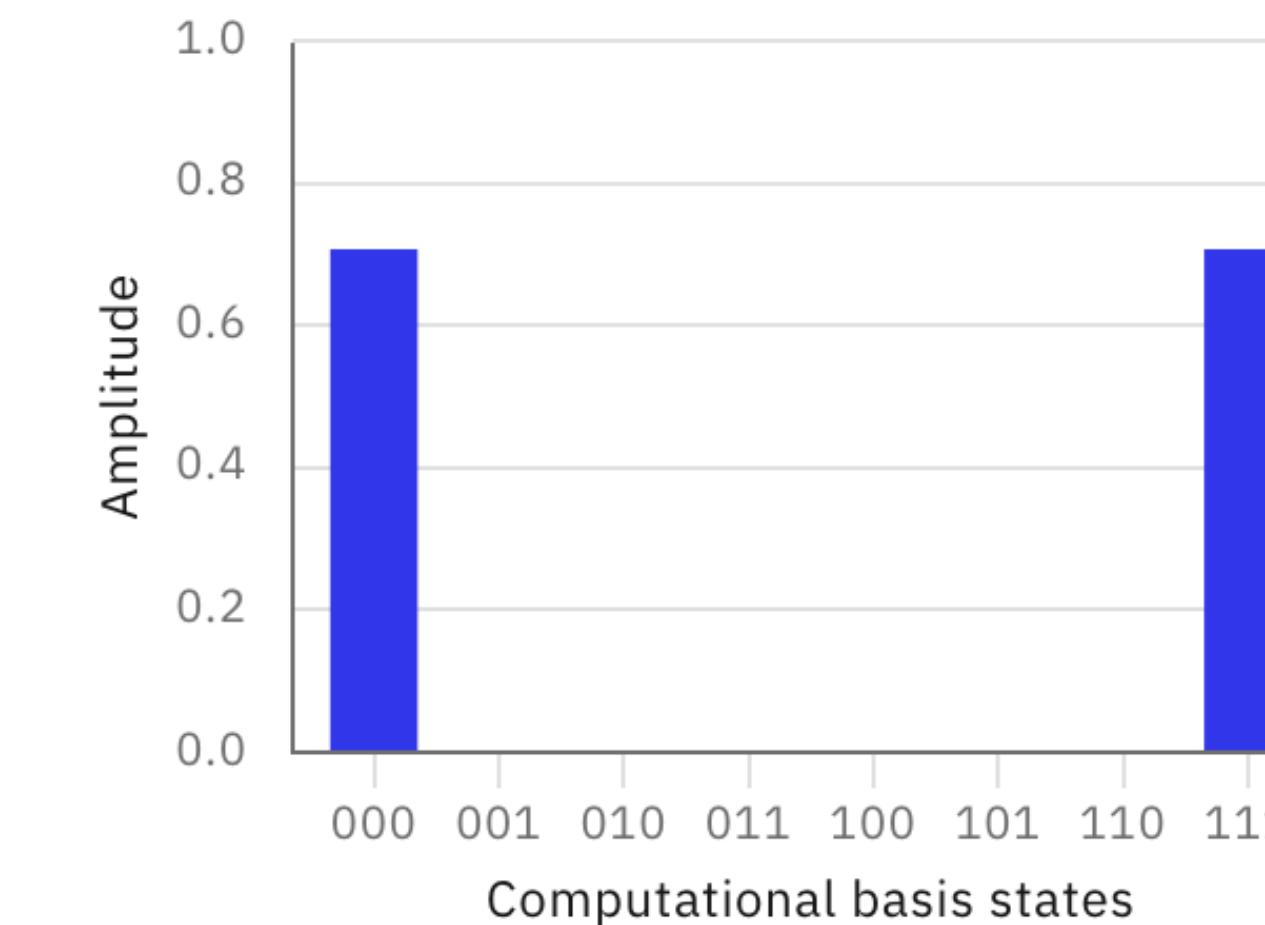
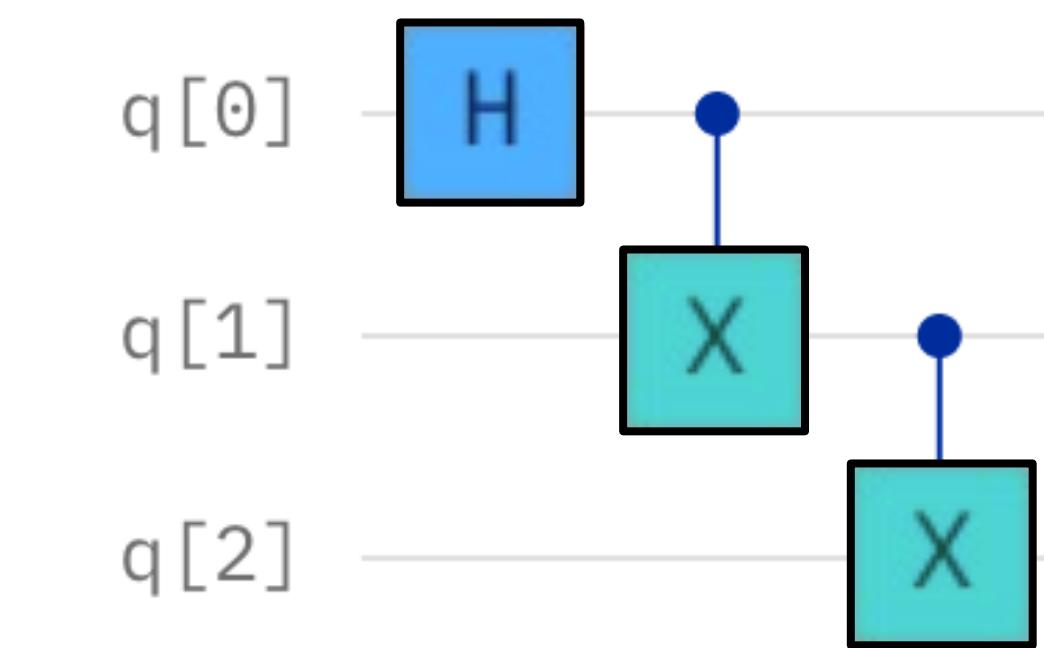
量子回路：量子もつれ(エンタングルメント)

量子的に相関のある量子ビット

2量子ビットのエンタングルメント

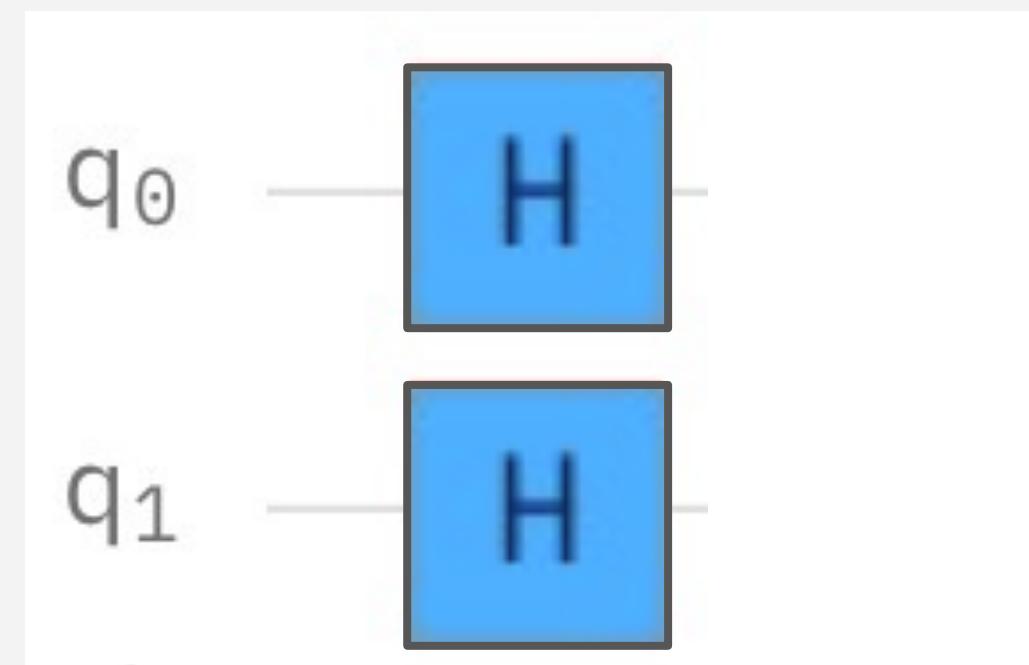


3量子ビットのエンタングルメント



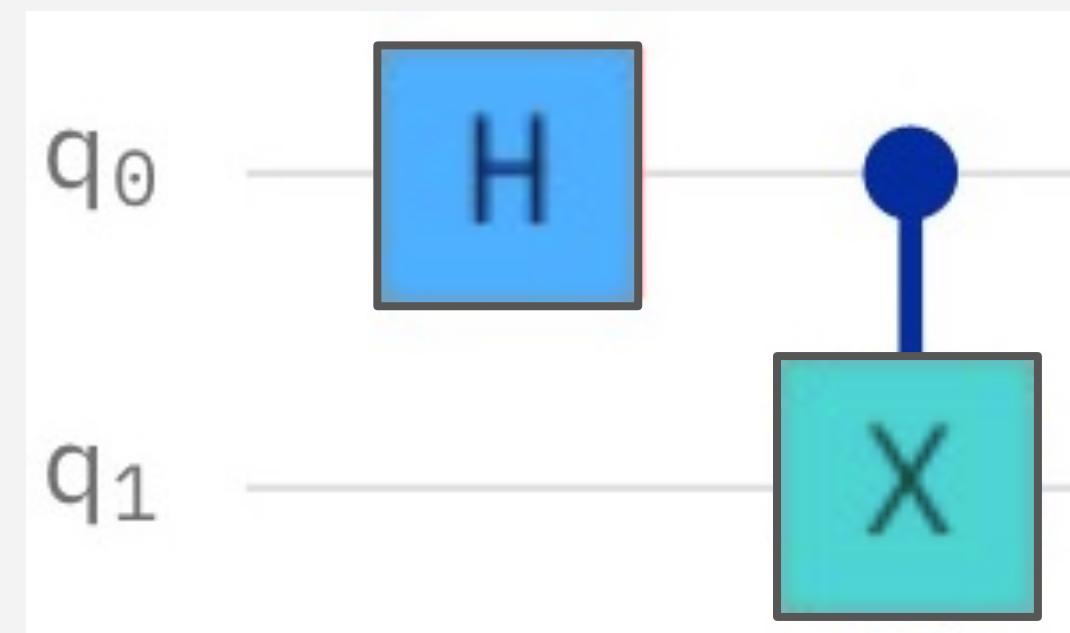
量子の干渉で量子状態を絞る

量子重ね合わせ



| | |
|------------|---------|
| 0 0 | ... 25% |
| 0 1 | ... 25% |
| 1 0 | ... 25% |
| 1 1 | ... 25% |

量子もつれ (エンタングルメント)



| | |
|------------|---------|
| 0 0 | ... 50% |
| 0 1 | ... 0% |
| 1 0 | ... 0% |
| 1 1 | ... 50% |

量子コンピューターによる計算：

「量子重ね合わせ」と「量子もつれ」を使って古典計算にはない計算を行う

量子アルゴリズム

量子優位性のある問題

- グローバーの探索アルゴリズム
- 量子位相推定、素因数分解など

→ 大規模な誤り訂正つき量子コンピューターの開発が待たれる

近い将来向けの量子アルゴリズム

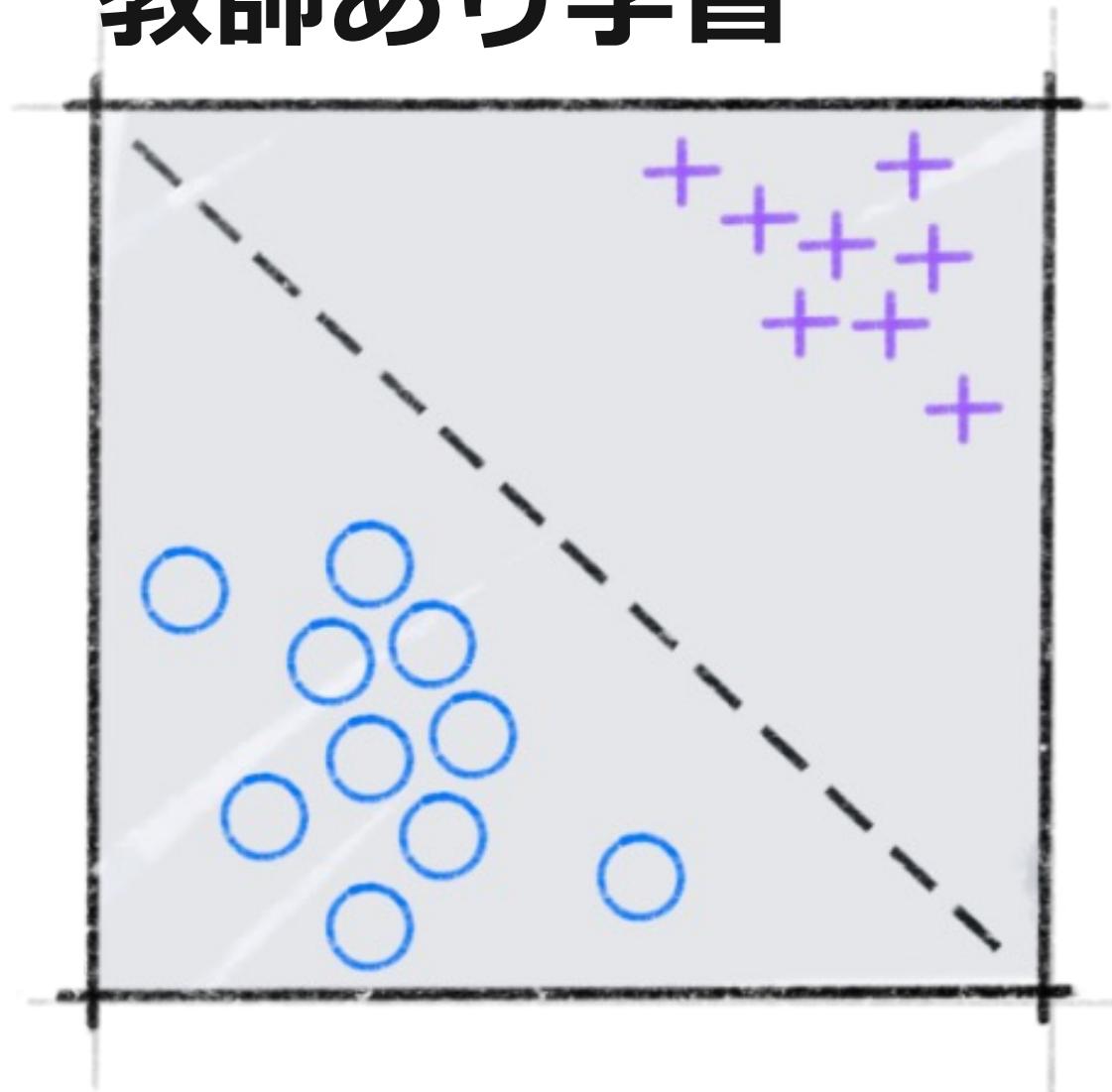
- 短い量子回路を活用（パラメータ化回路など）
- 従来の古典コンピューターとのハイブリッド計算

→ 今回紹介するアルゴリズムはこちらに属する

機械学習

機械学習は、以下の3つの分野に大別されます。

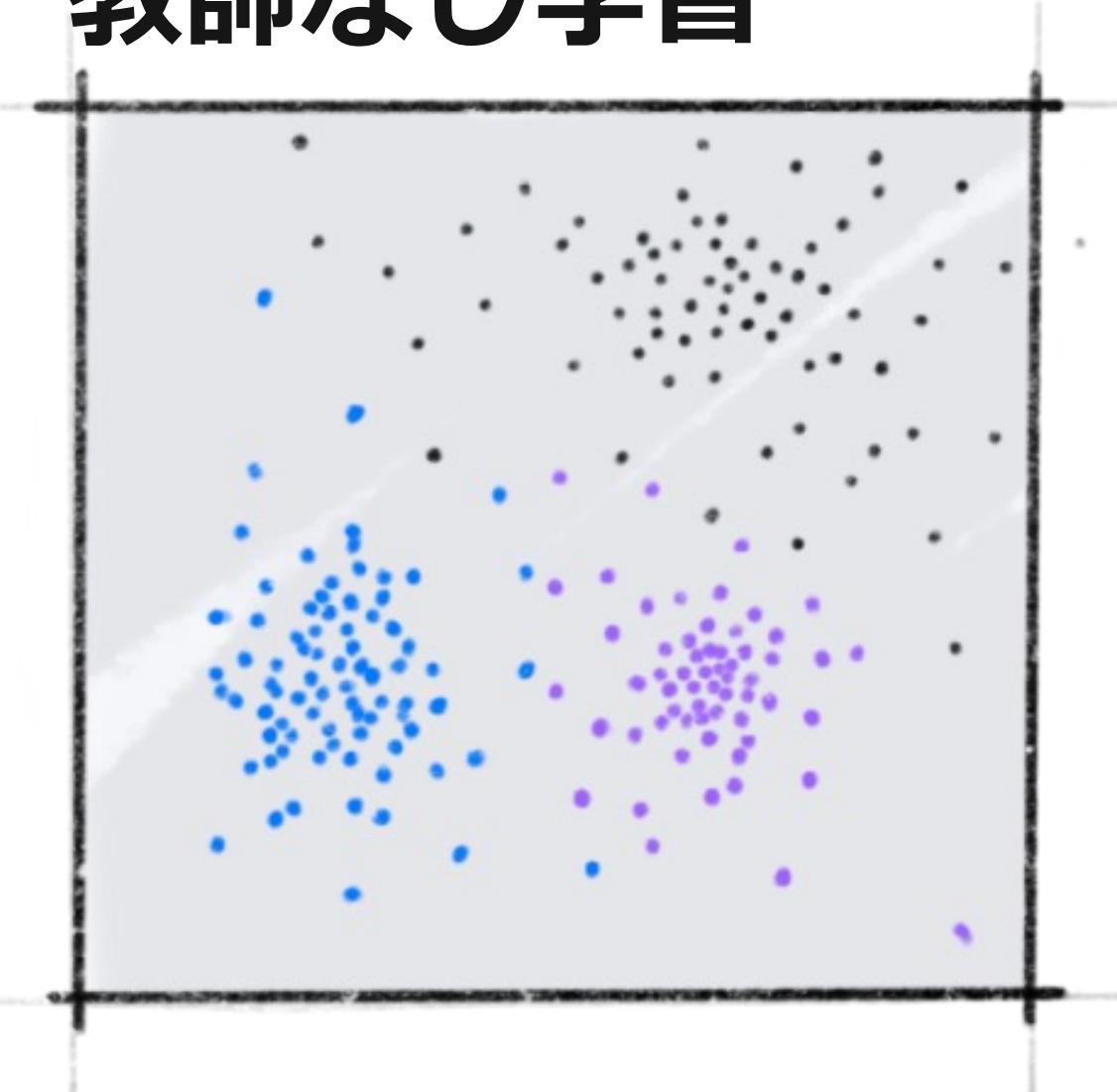
教師あり学習



ラベル付きデータ (x_i, y_i) :
マッピングする関数 $y = f(x)$ を
学習。

例) 猫や犬の写真がラベル付けされた
集合から、新しい猫や犬の写真を識別す
る。

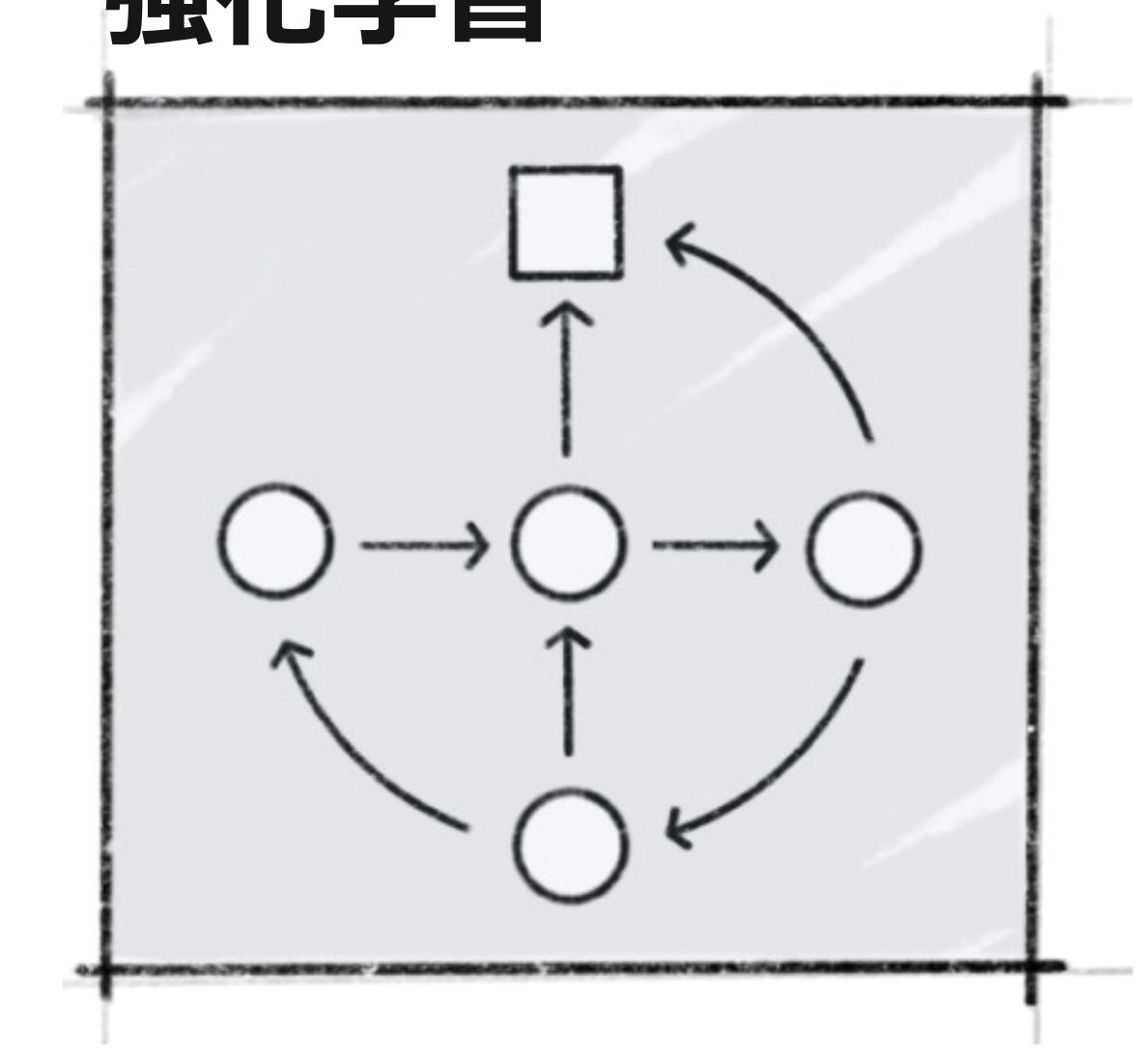
教師なし学習



ラベルのないデータ：
何らかの構造を学習。

例) 映画の視聴履歴に基づいて視聴者を
グループ分けし、新しい映画を推薦す
る。

強化学習



行動に応じて報酬が得られる環
境で、期待される報酬を最大化。

例) 「パックマン」のプレイ方法をア
ルゴリズムで学習する。

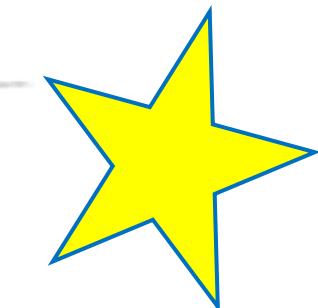
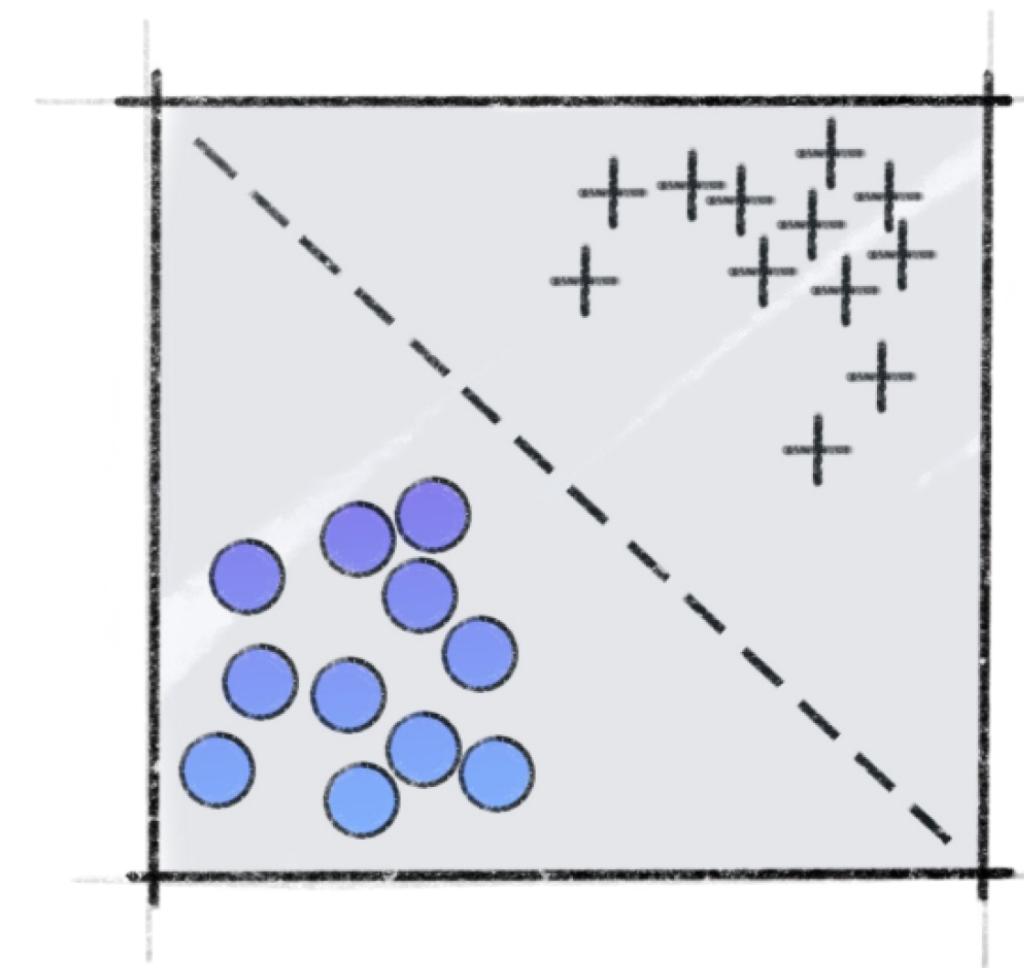
機械学習：教師あり学習

ラベル付きデータ (x_i, y_i) が与えられたとき、マッピングする関数 $y = f(x)$ を学習。

分類：

データを特定のカテゴリに割り当てる。

例) 椅子またはテーブルのラベル付き画像のセットが与えられたとき、新しい写真が椅子またはテーブルのどちらかを特定する。

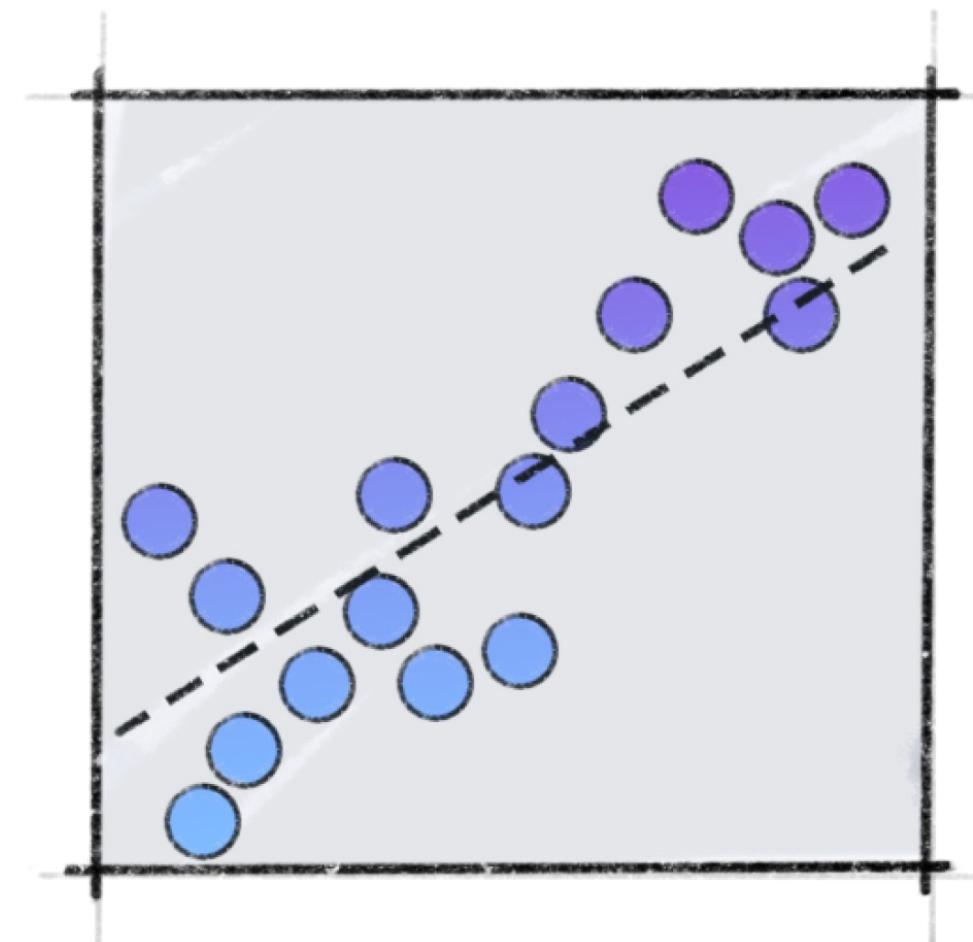


近い将来向けの
量子アルゴリズムとしては、
分類にフォーカス。

回帰：

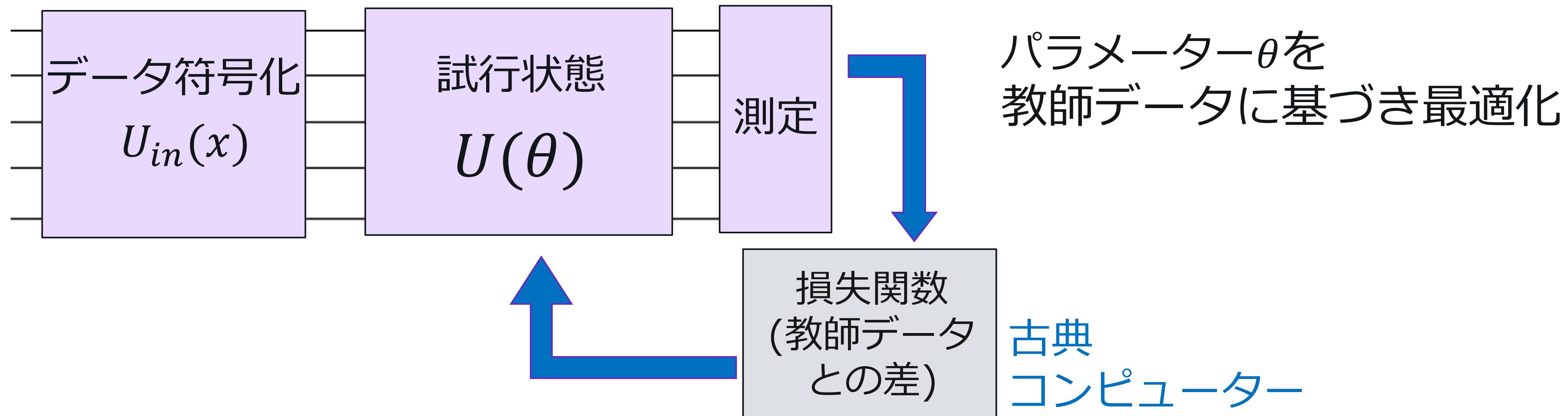
従属変数と独立変数の関係を明らかにする。一般に予測に使われる。

例) 一連の過去の株価を前提として、将来の株価を予測する。

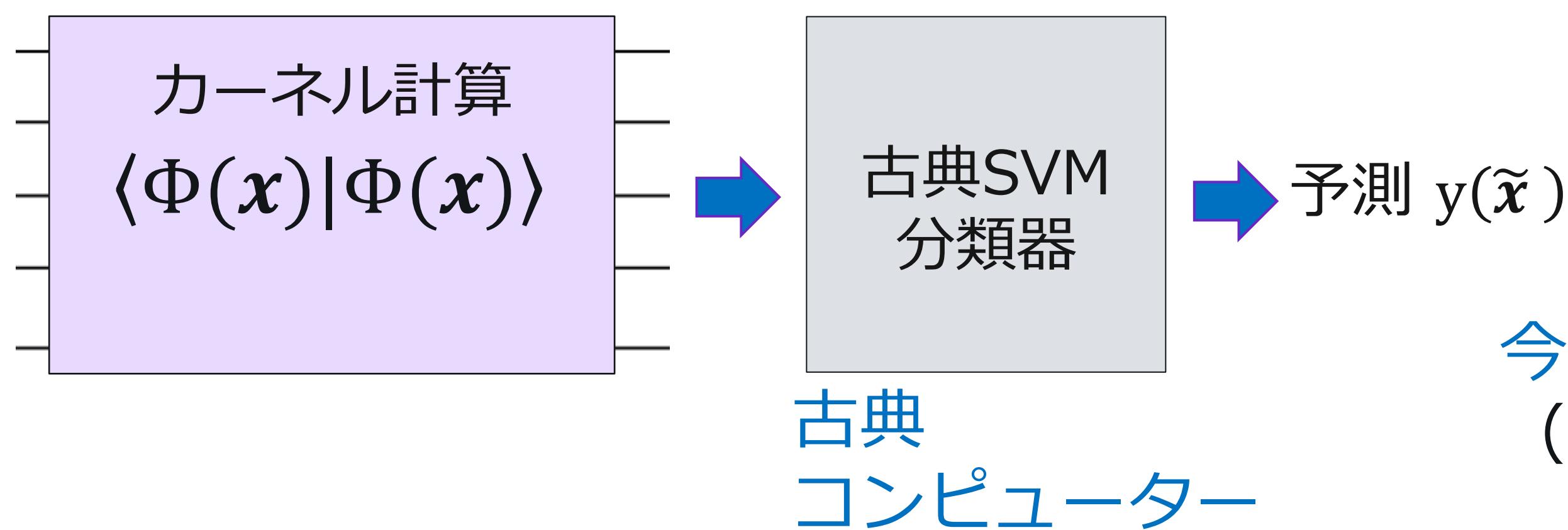


量子アルゴリズムによる教師あり学習の分類の手法には主に2種

量子変分分類：



量子カーネル分類：



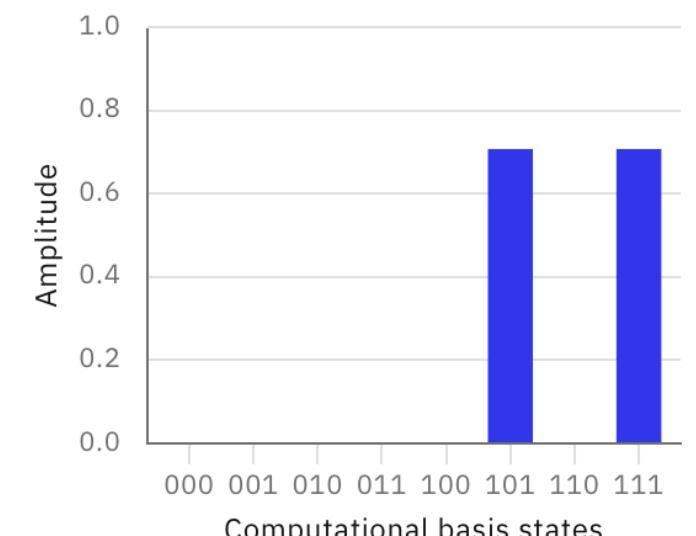
今回はこちらを紹介！
(古典でのパラメーター最適化はしない)

データを量子機械学習のために符号化する手法（代表的なもの）

1. 計算基底符号化

例) データセット $X = \{x_1 = 101, x_2 = 111\}$

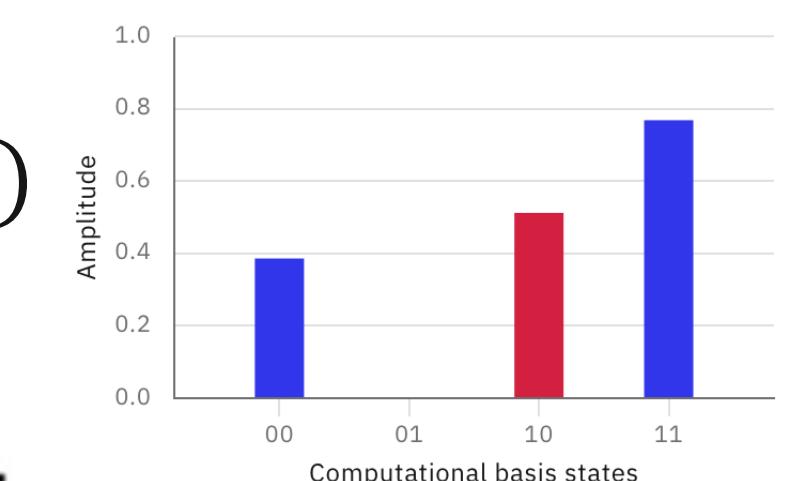
量子状態
 $|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle + |111\rangle)$



2. 振幅符号化

例) $X = \{x_1 = (1.5, 0), x_2 = (-2, 3)\}$

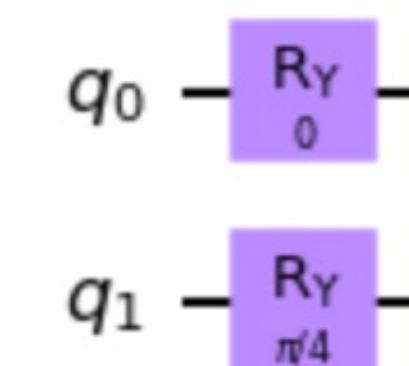
$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{15.25}}(1.5|00\rangle - 2|10\rangle + 3|11\rangle)$



3. 角度符号化

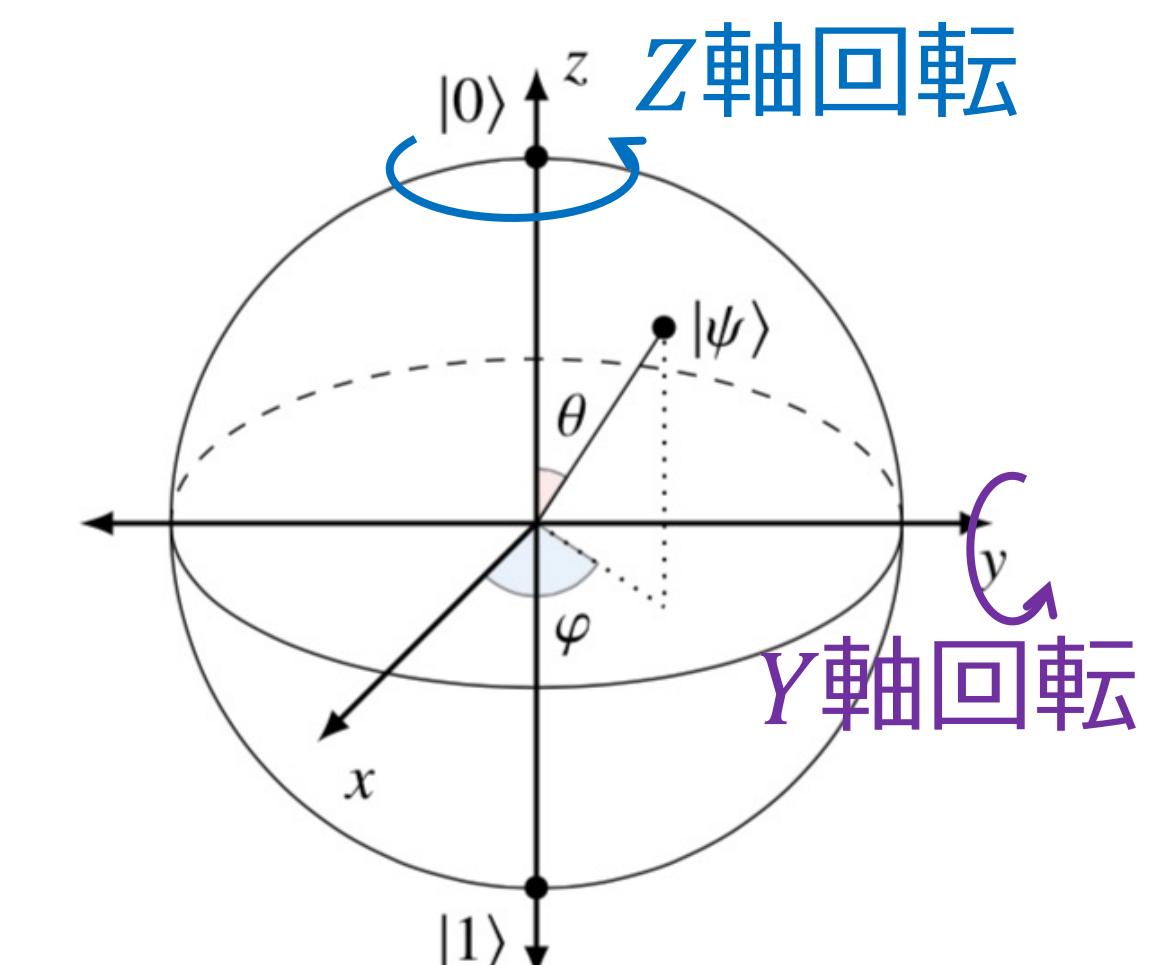
例) データポイント $x = (x_1, x_2)$

$S_x = RY(2x_1) \otimes RY(2x_2)$



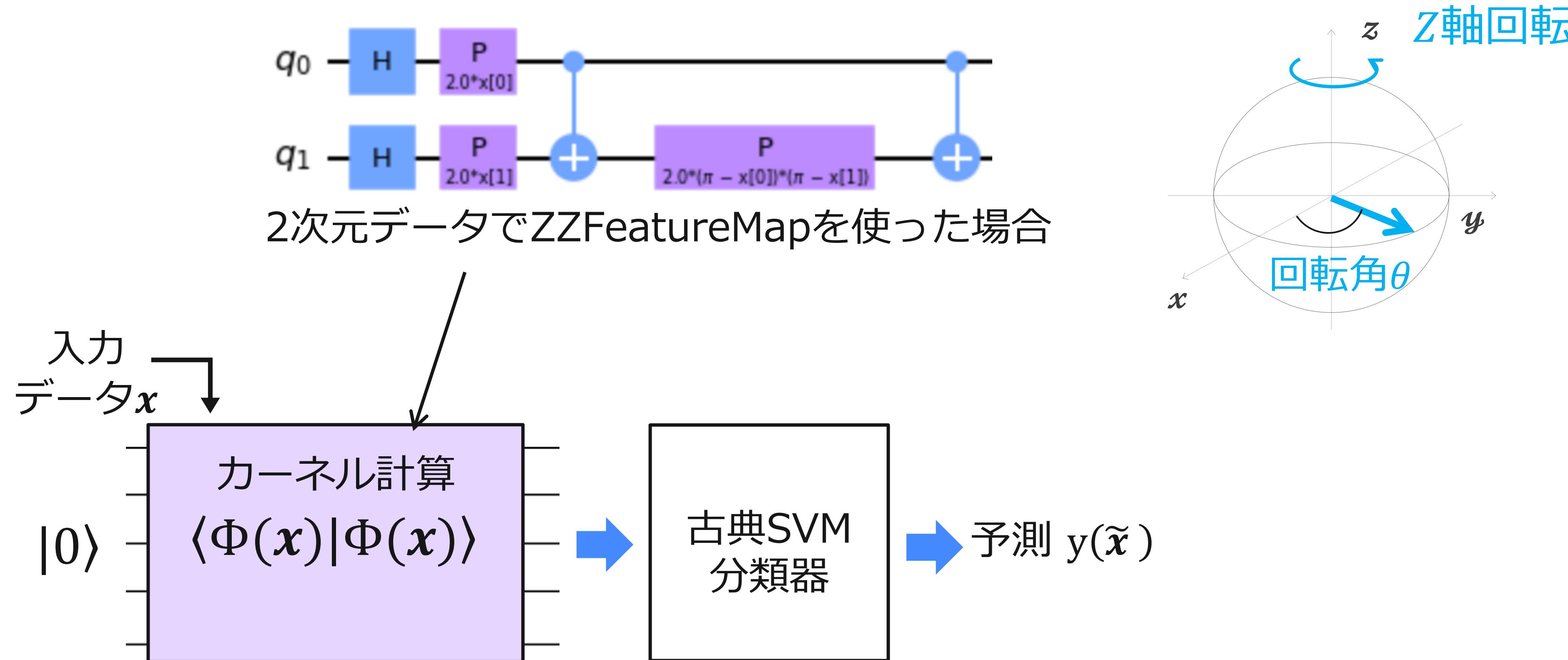
4. 任意の符号化(角度符号化の拡張)

例) $x = (x_1, x_2)$



量子カーネル分類（量子サポートベクターマシン）

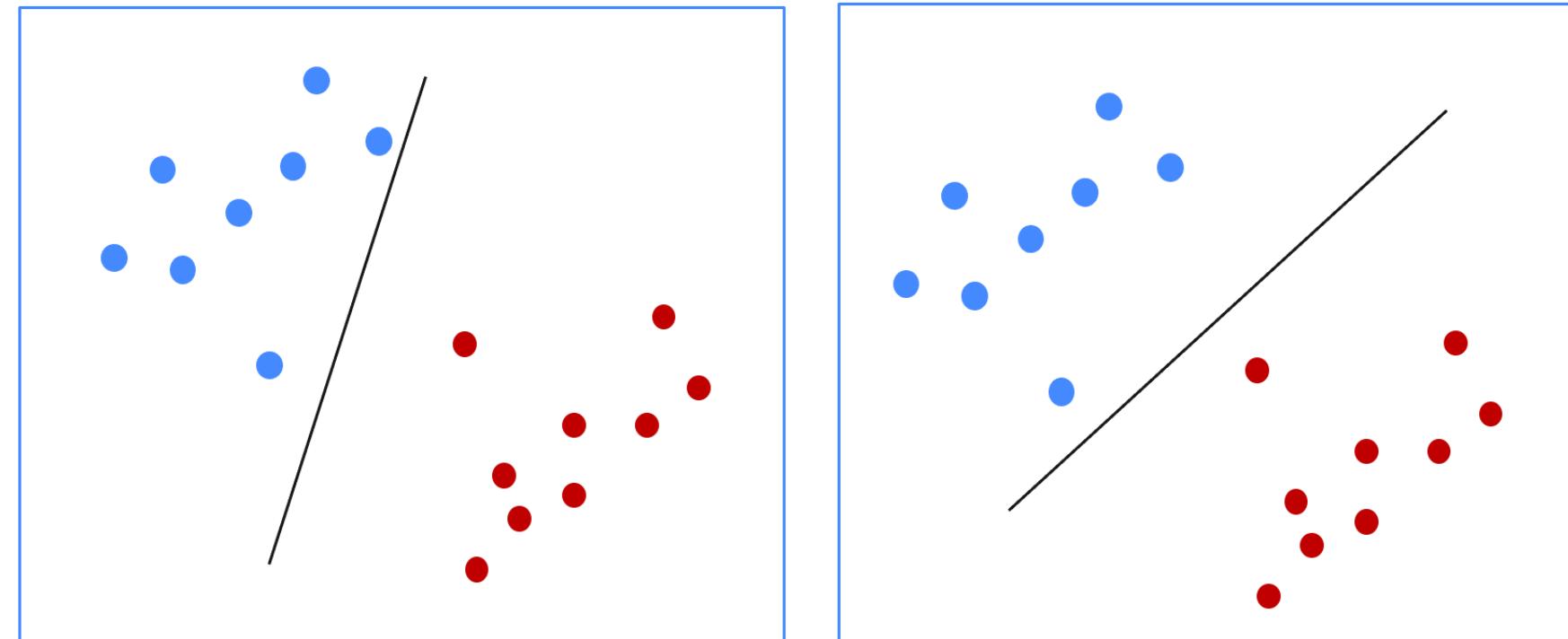
データを量子データにエンコード（符号化）する際に、パラメーター（量子ゲートの回転角 θ ）を使った**量子特徴量マップ(Feature Map)**を用います。



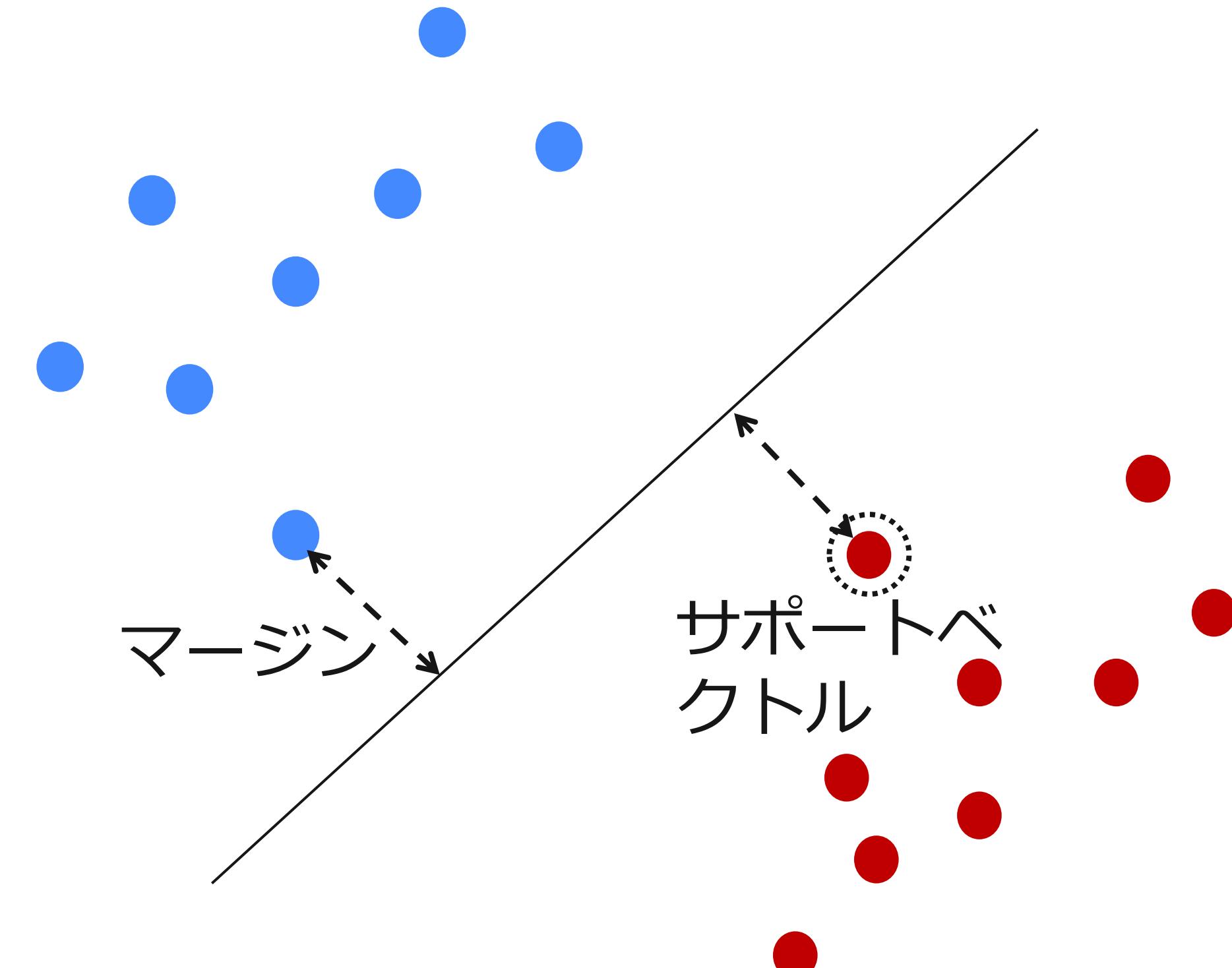
量子回路で量子カーネル(類似度)の計算を行い、
量子カーネルを使って、古典SVM計算(線形な境界面で分ける2値分類)で学習・分類を行います。

SVM(サポートベクターマシン) とは

データを2つのグループに分ける手法(2値分類)



- ・ グループ間の境界面を定める分析手法
- ・ マージン（境界線と最近接データ点との距離）をできるだけ大きく取るように最適化

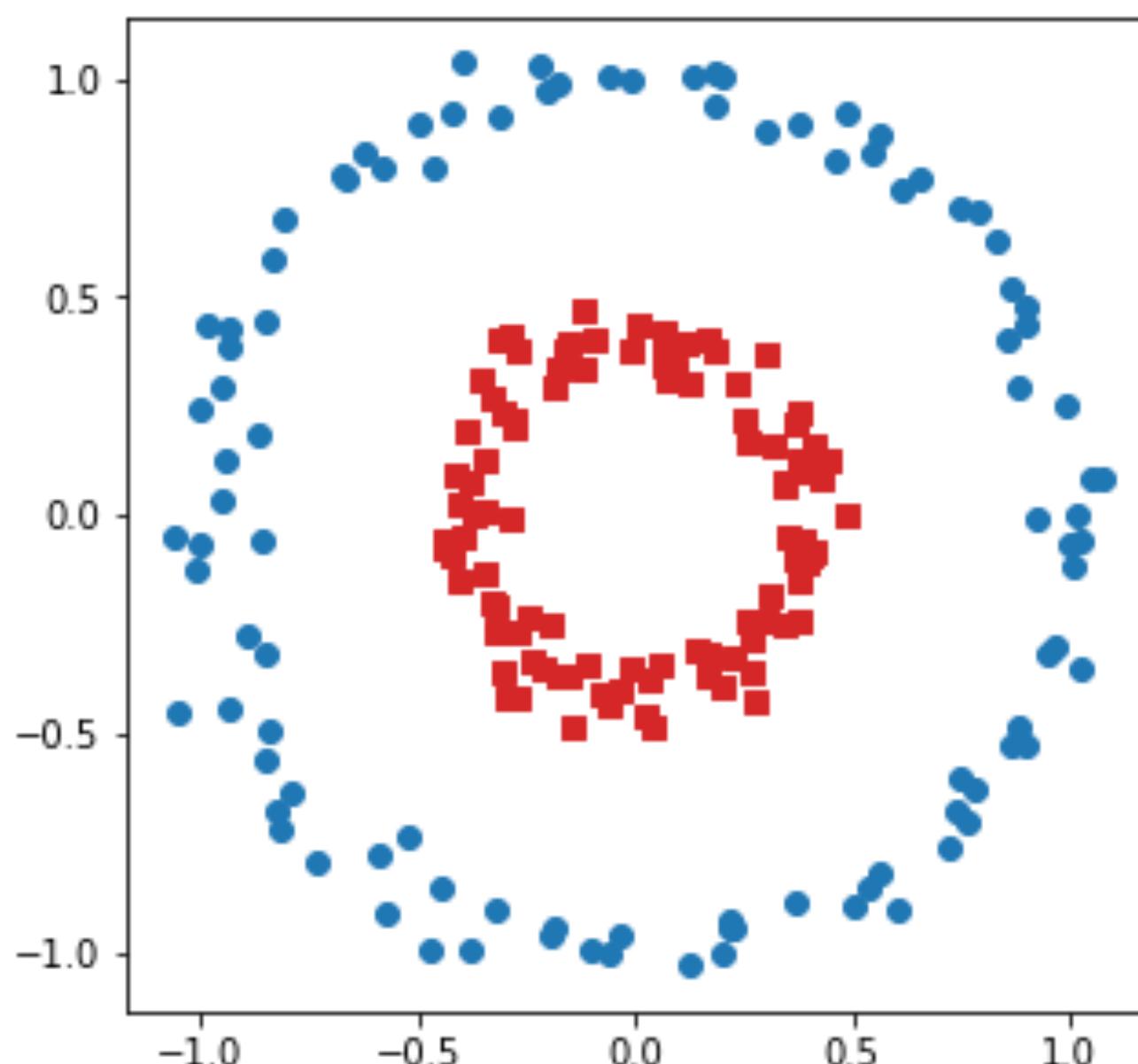


出典：中村 悠馬さん「Qiskitチュートリアル勉強会 量子機械学習編-2」

<https://www.youtube.com/watch?v=9LKbqPvT2gc>

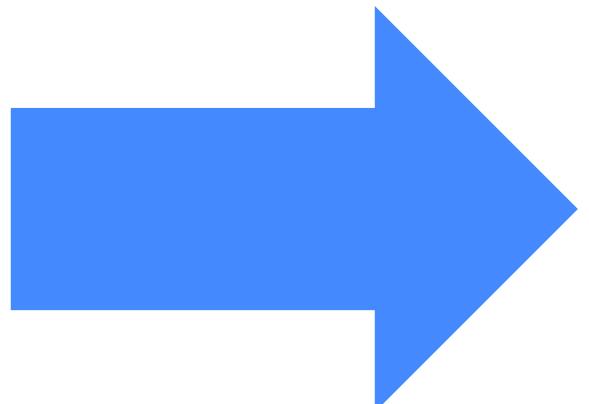
非線形SVM

下のようなデータセットは、構造があることは明らかですが、2つの円は2次元で線形分離可能ではありません。

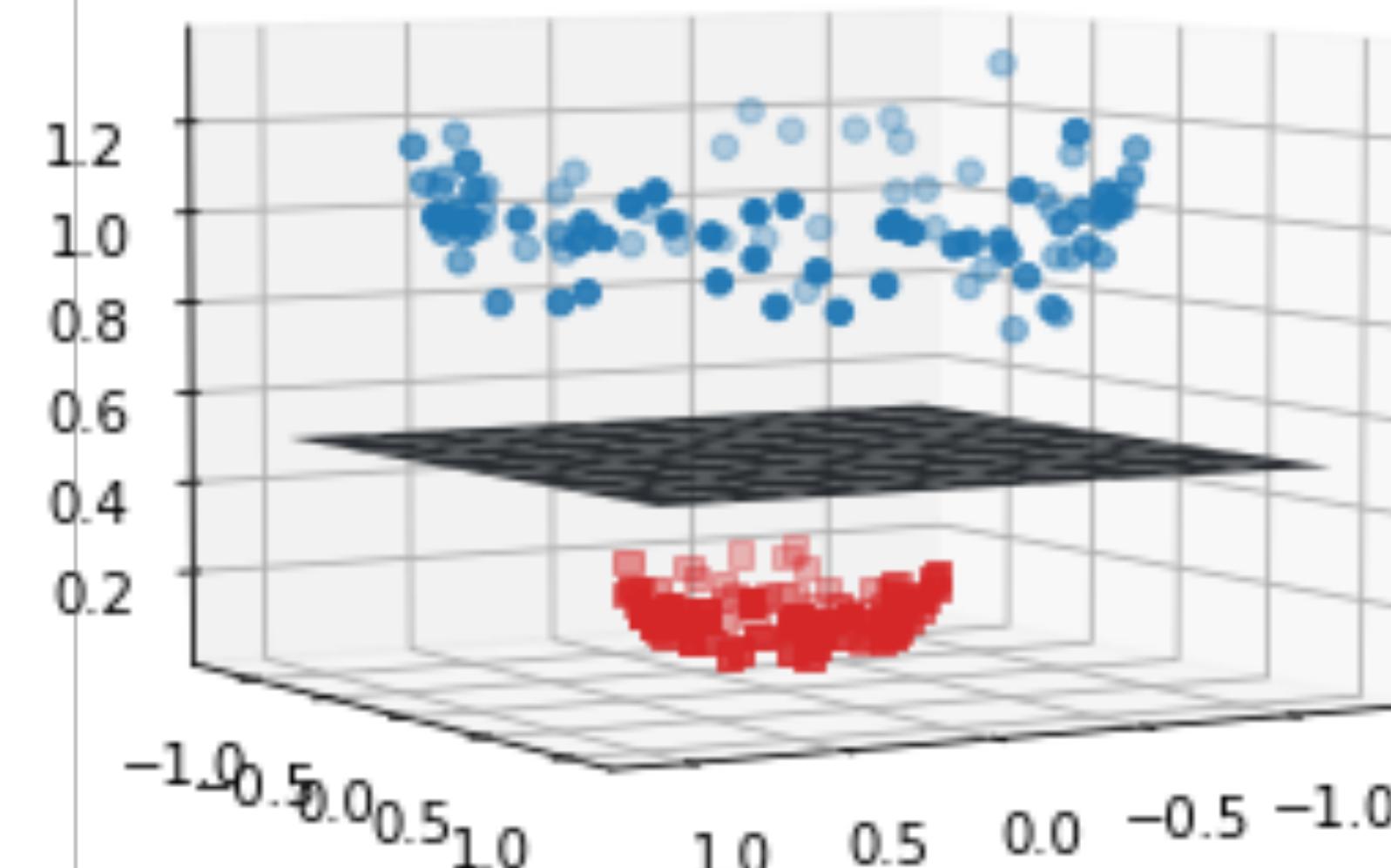


データを3次元に変換

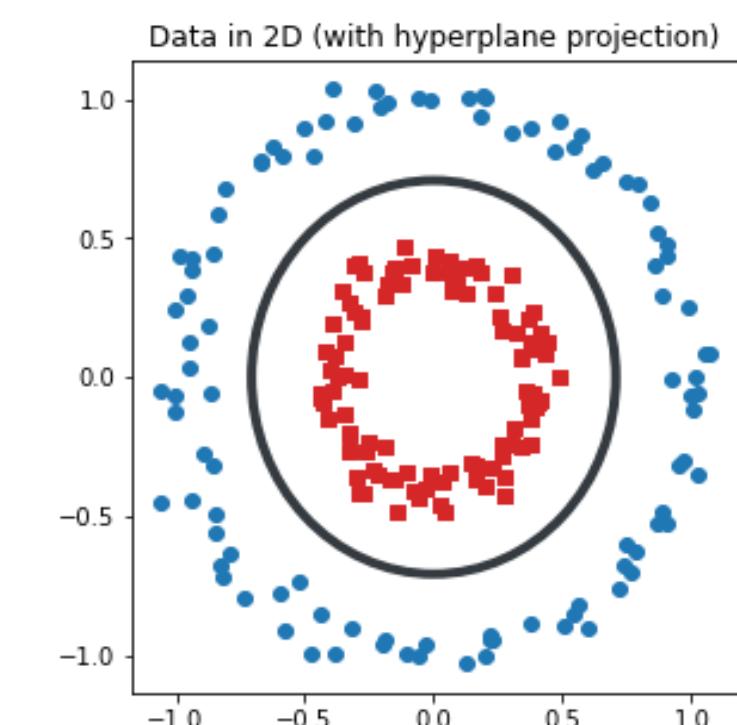
$$z = x^2 + y^2 \text{ を追加}$$



3次元では、データは $z = 0.5$ の超平面で分離できる



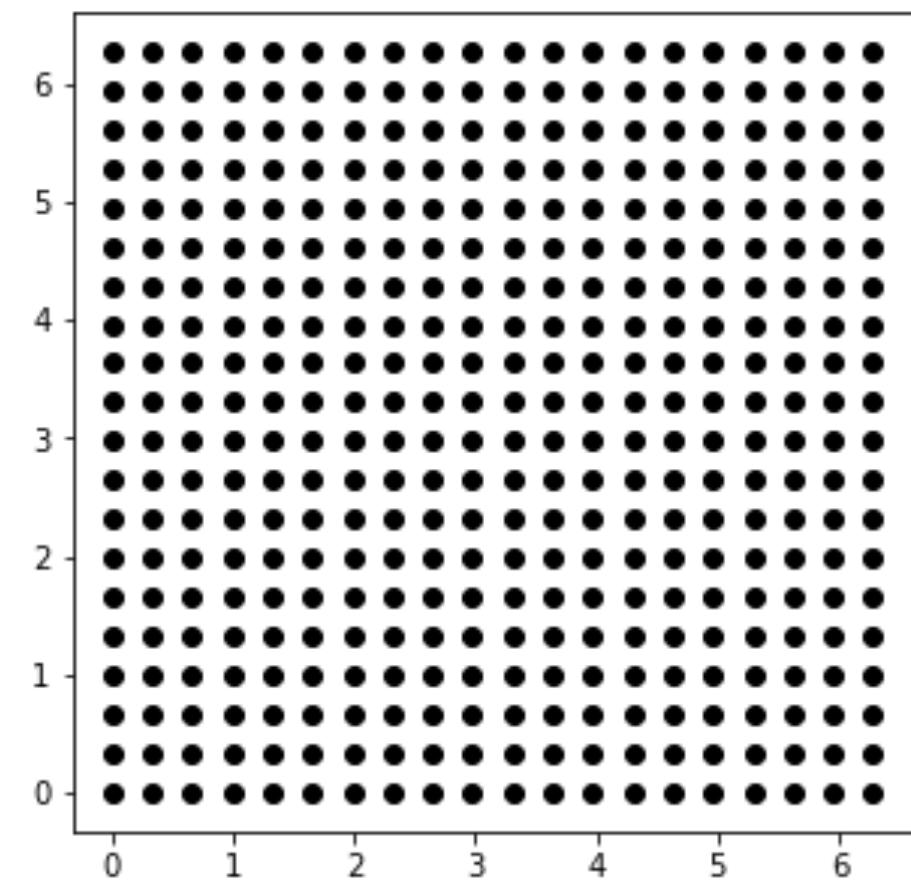
2次元に投影すると、この超平面は非線形



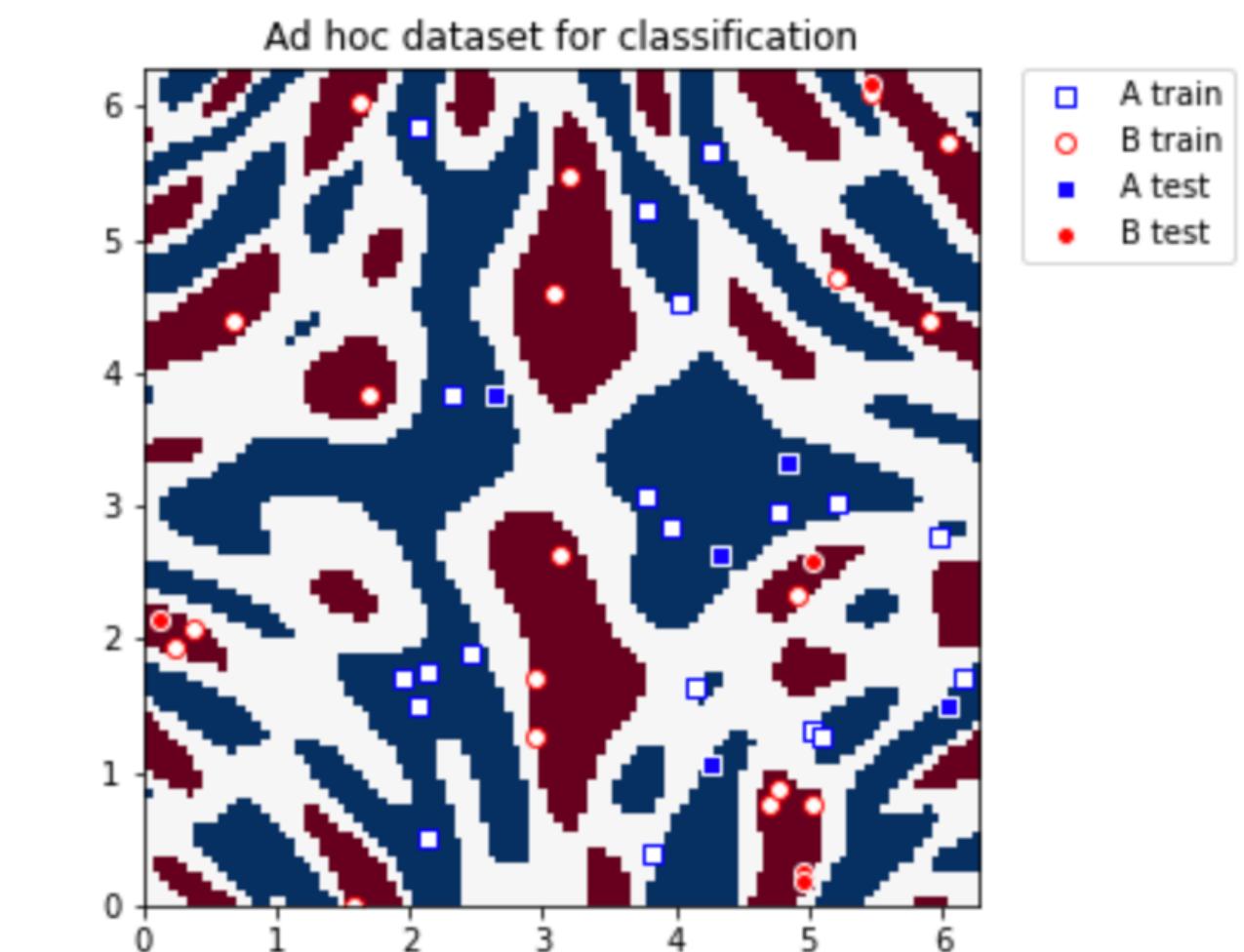
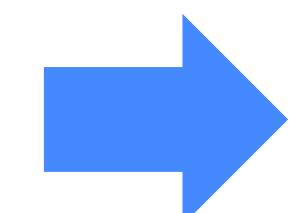
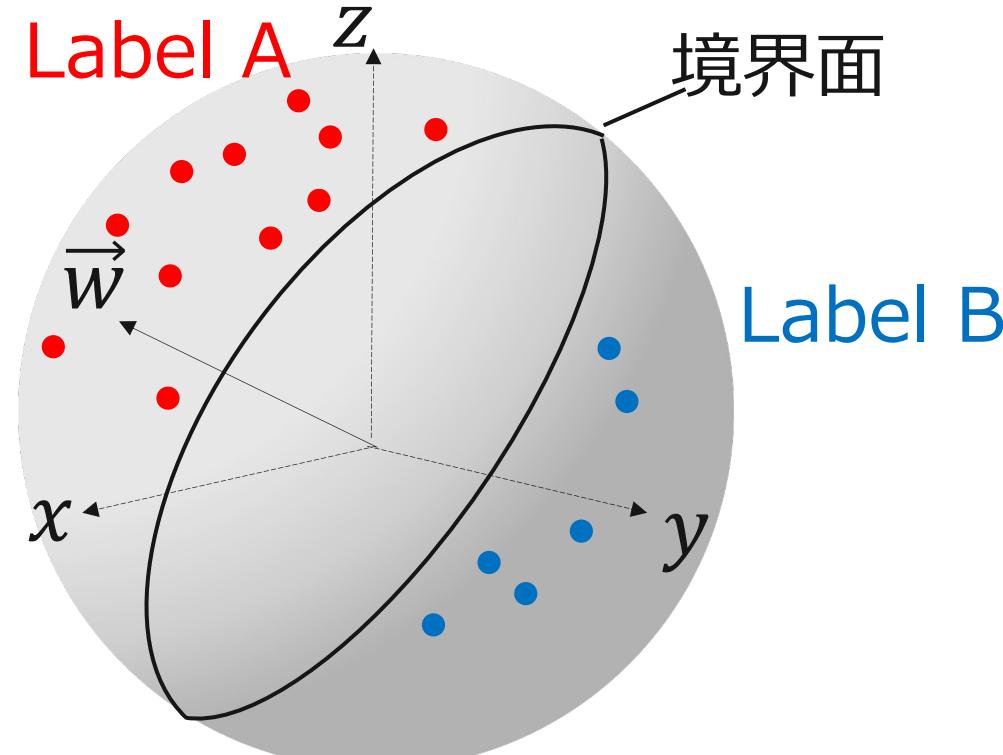
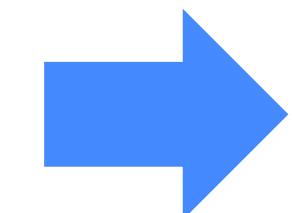
特徴量を高次元化(特徴量マッピング)することで、線形な境界面で切り分けることができます。

量子カーネルSVM

特徴量を量子空間に特徴量マッピングすることで、線形な境界面で切り分けます。



量子状態の球に
マッピング



カーネル計算（量子状態の内積）

$$\langle \Phi(x_i) | \Phi(x_k) \rangle$$

x_i と x_k が近いときにより大きな値となることから、類似性の尺度として見ることができます。

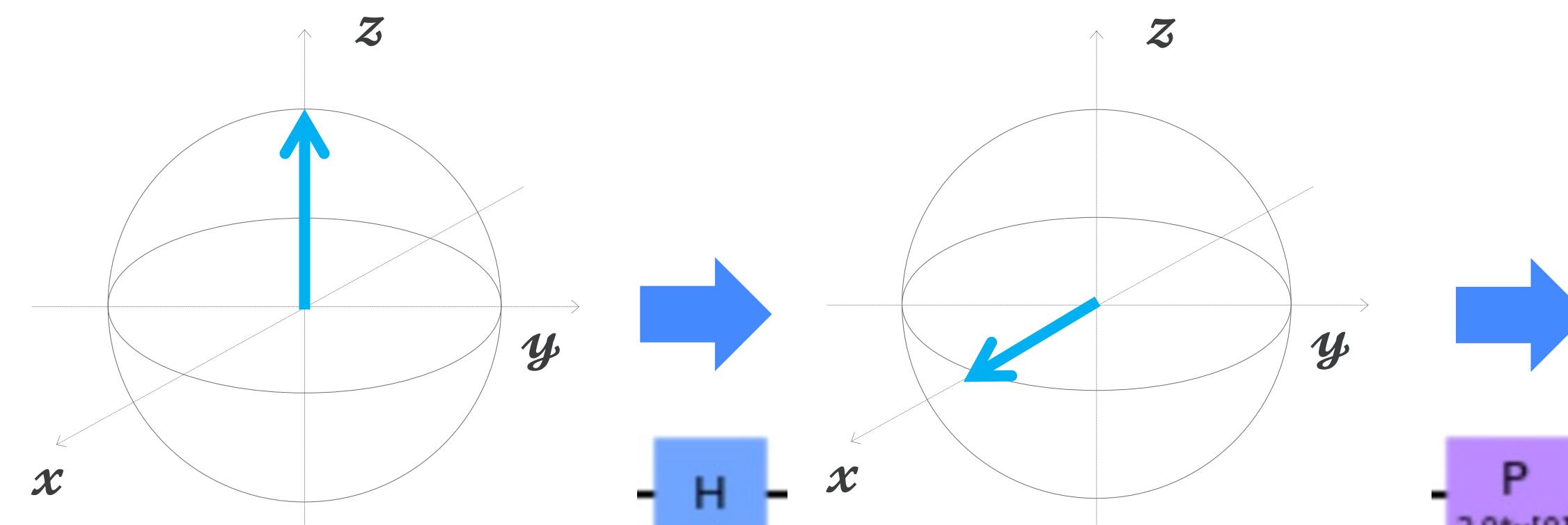
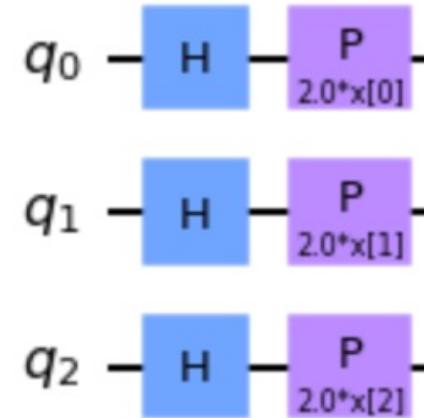
訓練・分類は
古典SVM計算で
行います。

量子特徴量マップの例

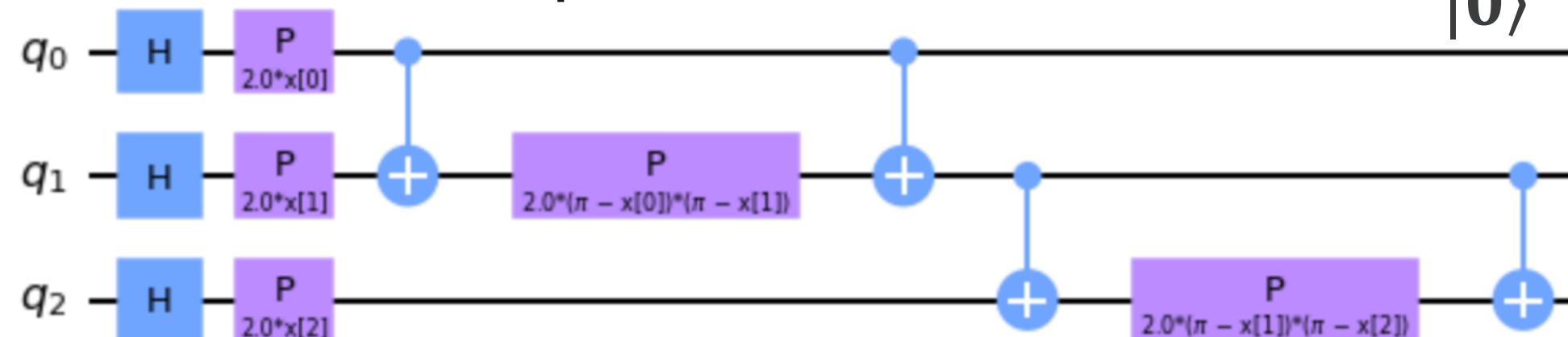
量子回路の回転角にデータを入れて変換します： $x \rightarrow |\Phi(x)\rangle$

データ x が3次元の場合の例：

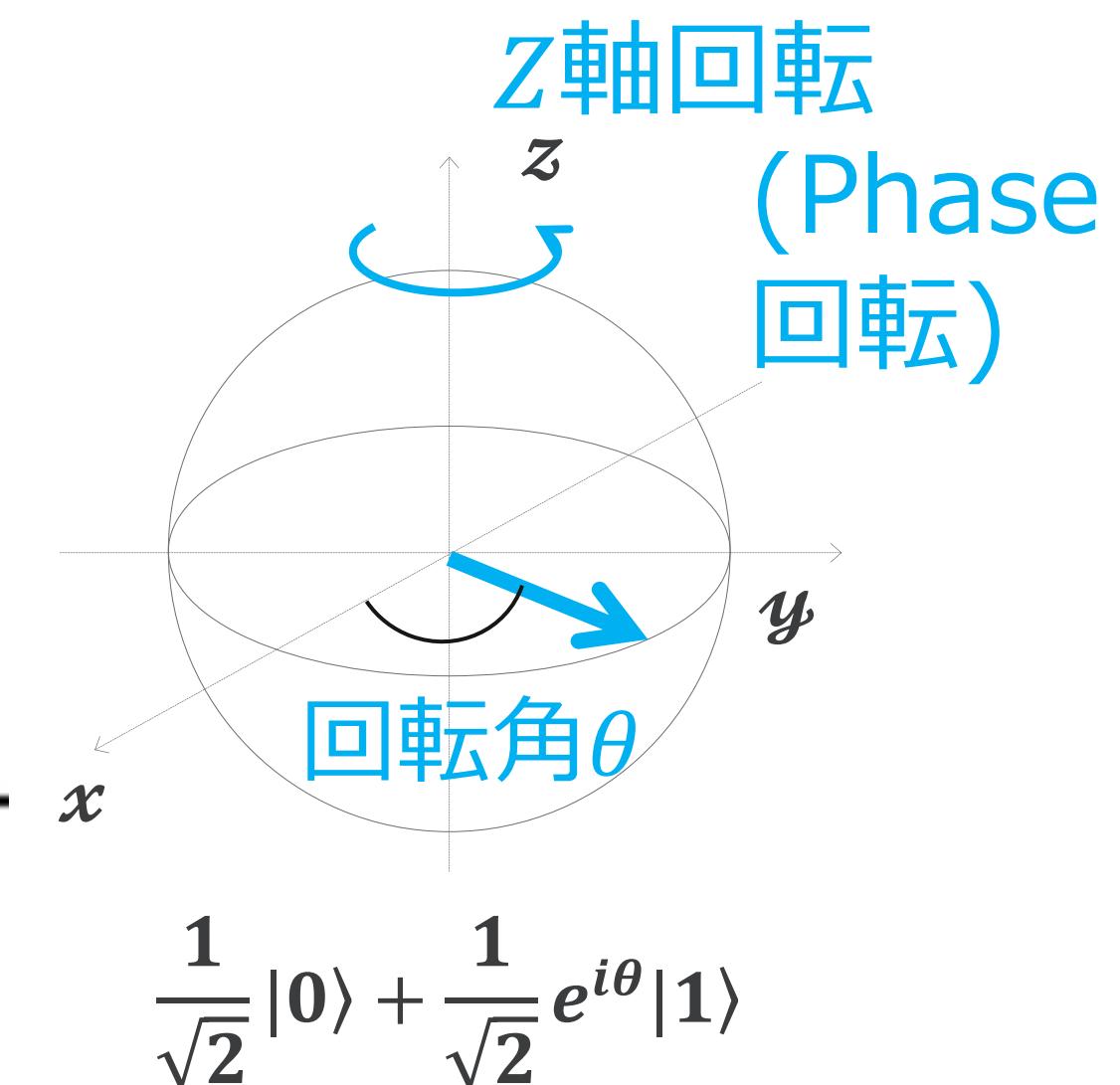
Z feature map



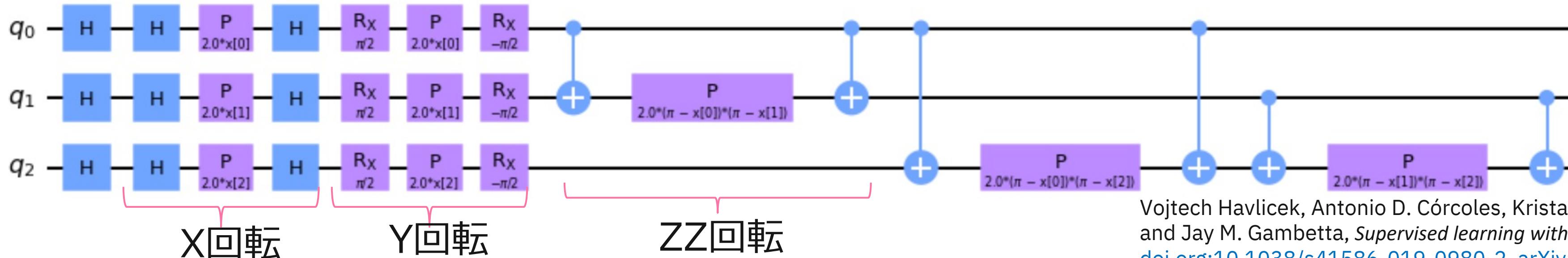
ZZ feature map



$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$



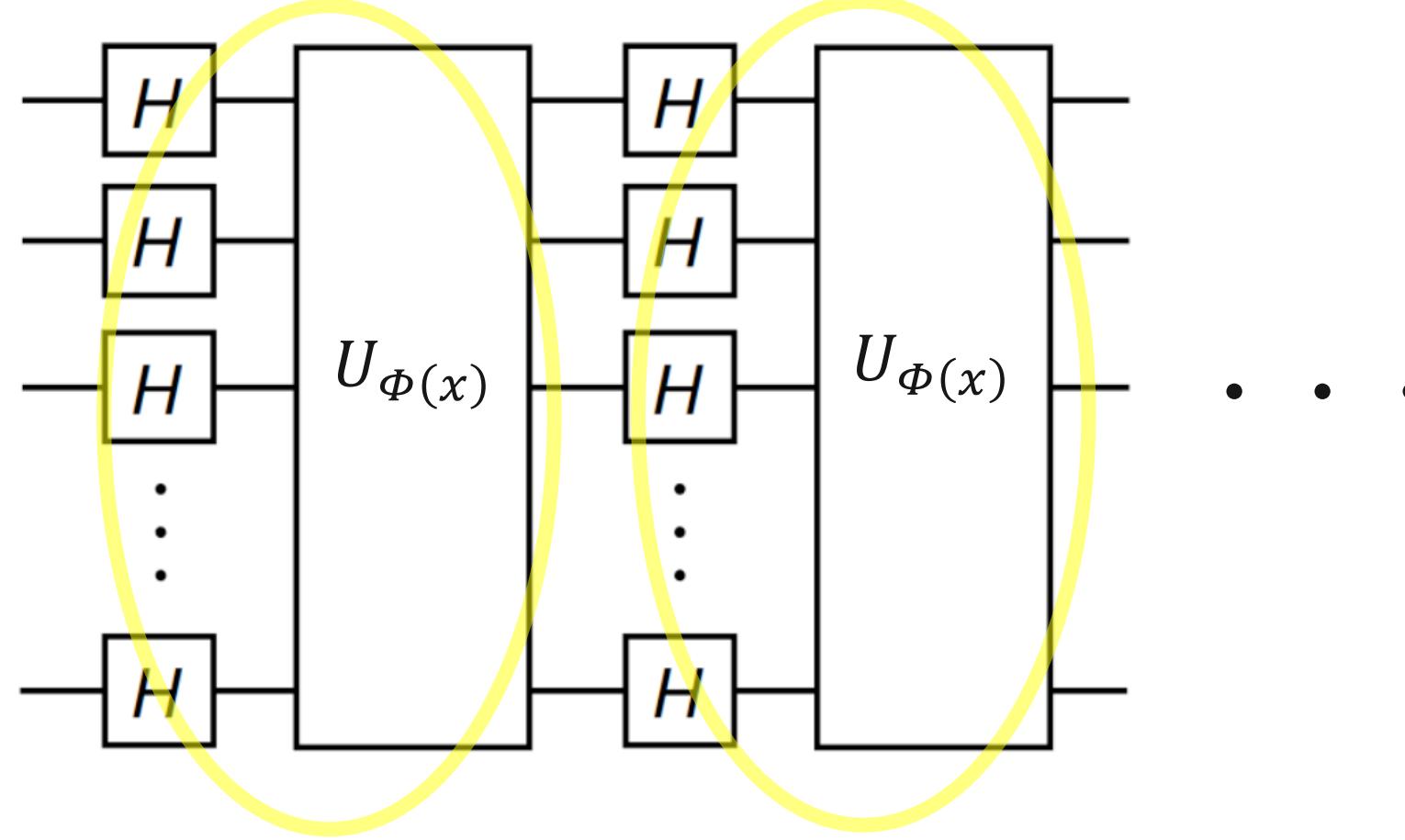
Pauli feature map (X, Y, ZZの場合)



Vojtech Havlicek, Antonio D. Córcoles, Kristan Temme, Aram W. Harrow, Abhinav Kandala, Jerry M. Chow and Jay M. Gambetta, *Supervised learning with quantum enhanced feature spaces*, Nature 567, 209-212 (2019), [doi.org:10.1038/s41586-019-0980-2](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0980-2), arXiv:1804.11326.

量子特徴量マップ

Hゲートとエンタングルメントを生成するブロック $U_{\Phi(x_k)}$ との層を何回か繰り返す。



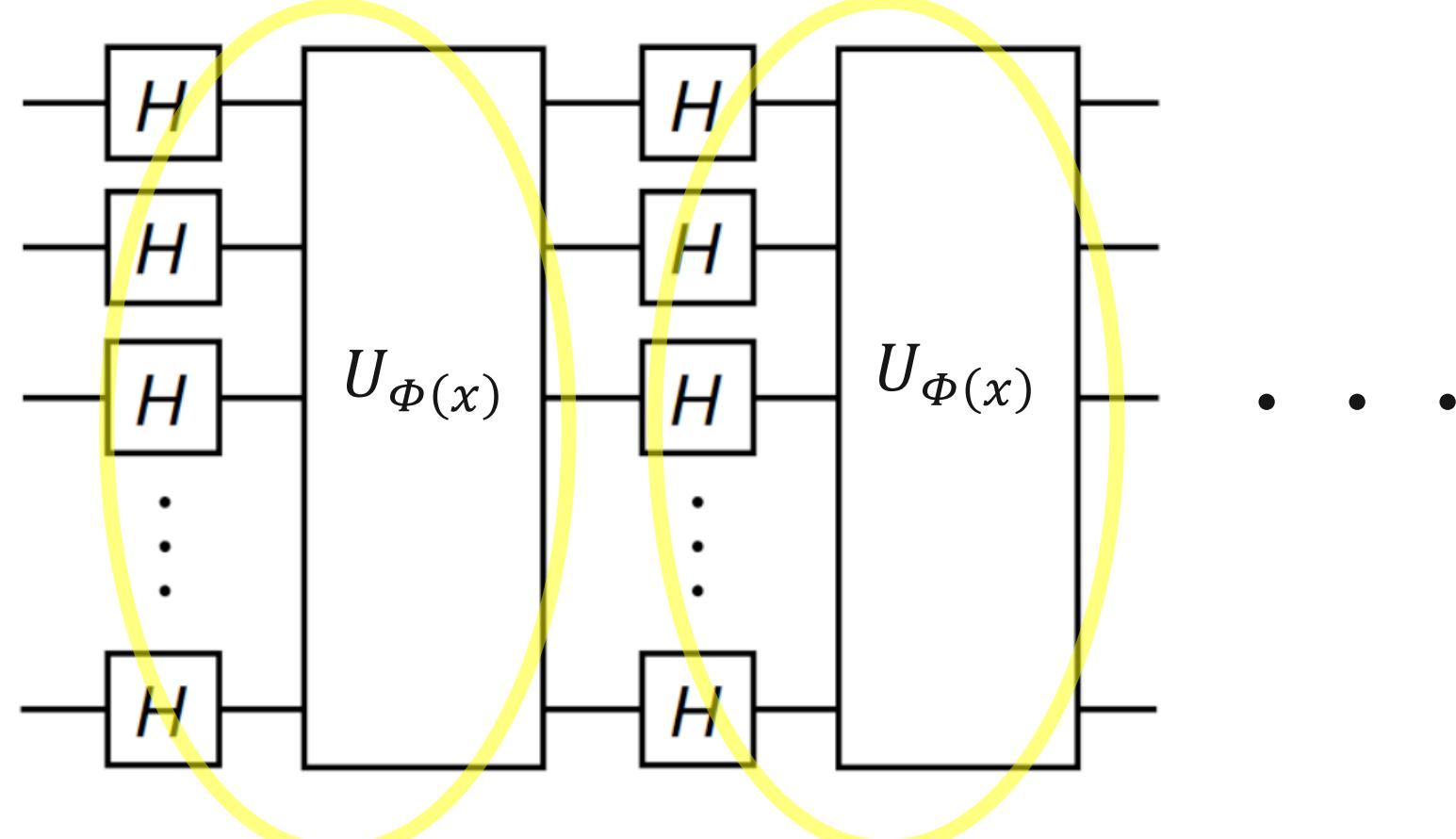
$U_{\Phi(x)}$ の一般形 :

$$U_{\Phi(x)} = \exp \left(i \sum_i \phi_i(x) P_i + i \sum_{i,j} \phi_{ij}(x) P_{ij} + \sum_{i,j,k} \phi_{ijk}(x) P_{ijk} + \dots \right)$$

- $i, j, k \dots$ はエンタングルさせるビットの組み合わせ
- $P_i \in \{I, X, Y, Z\}$:パワリ行列(X, Y, Z演算)
- $\phi_i(x)$ はパワリ行列の係数(位相) : ここにデータエンコードする

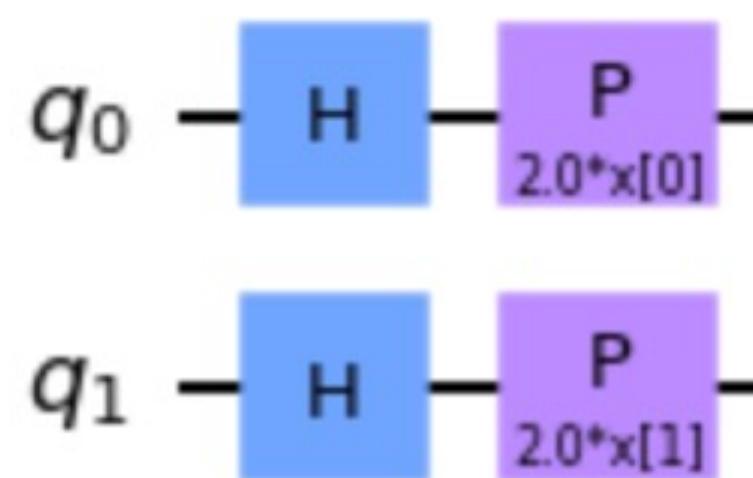
量子特徴量マップ

Hゲートとエンタングルメントを生成するブロック $U_{\Phi(x_k)}$ との層を何回か繰り返す。



$$U_{\Phi(x)} = \exp \left(i \sum_i \phi_i(x) P_i + i \sum_{i,j} \phi_{ij}(x) P_{ij} + \sum_{i,j,k} \phi_{ijk}(x) P_{ijk} + \dots \right)$$

Z feature mapの場合



$$U_{\Phi(x)} = \exp \left(i \sum_i \theta_i Z_i \right)$$

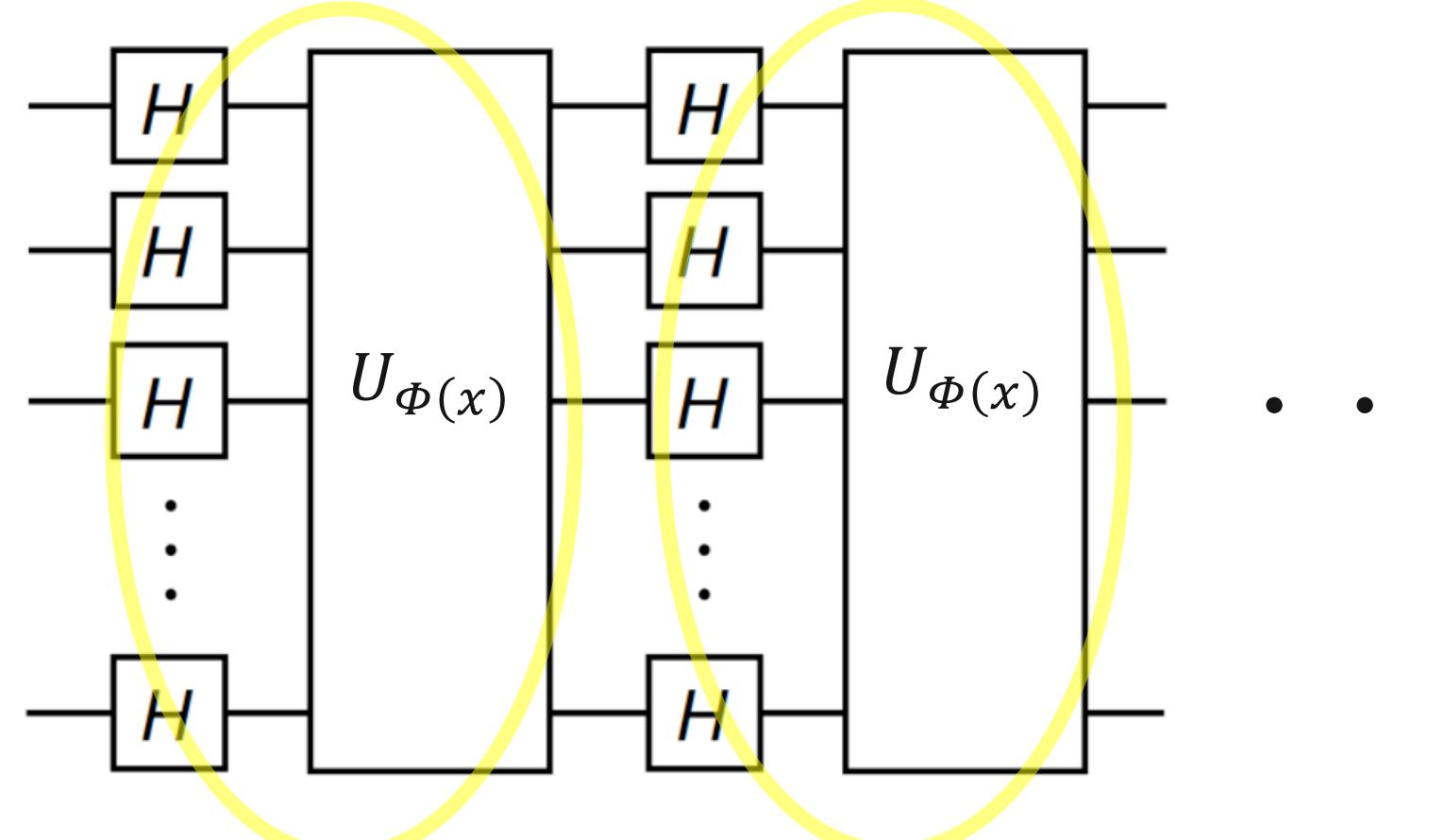
$$\phi_i(x) = \theta_i$$

$$P_K = Z_i \quad \text{より}$$

$$U_{\Phi(x)} = \exp(i\theta_0 Z_0 + i\theta_1 Z_1)$$

量子特徴量マップ

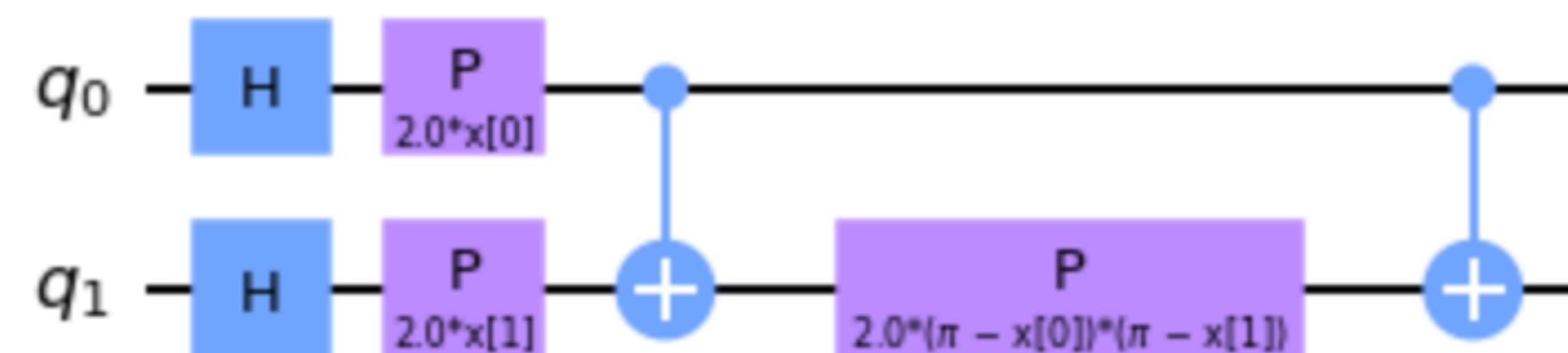
Hゲートとエンタングルメントを生成するブロック $U_{\Phi(x_k)}$ との層を何回か繰り返す。



$$U_{\Phi(x)} = \exp \left(i \sum_i \phi_i(x) P_i + i \sum_{i,j} \phi_{ij}(x) P_{ij} + \sum_{i,j,k} \phi_{ijk}(x) P_{ijk} + \dots \right)$$

ZZ feature mapの場合

$$U_{\Phi(x)} = \exp(i\theta_0 Z_0 + i\theta_1 Z_1 + i(\pi - \theta_0)(\pi - \theta_1)Z_0 Z_1)$$

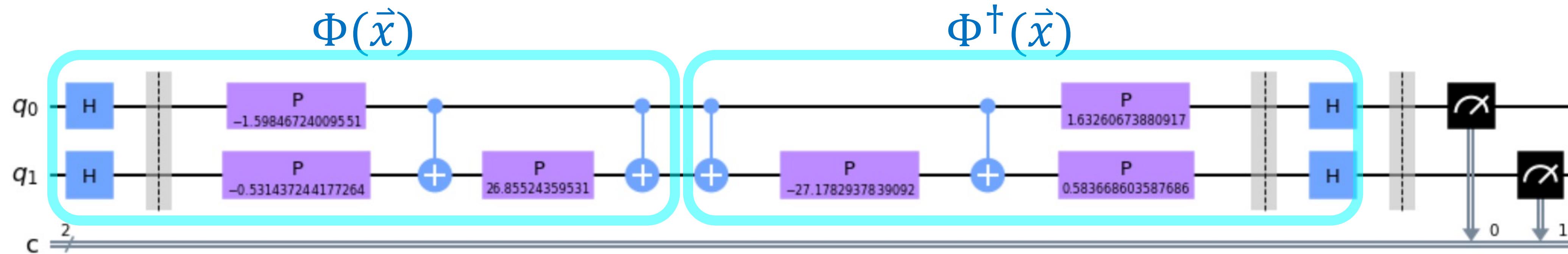


$$\begin{cases} \phi_i(x) = \theta_i \\ \phi_{ij}(x) = (\pi - \theta_i)(\pi - \theta_j) \end{cases}$$

$$\begin{cases} P_i = Z_i \\ P_{ij} = Z_{ij} = Z_i Z_j \end{cases} \text{ より}$$

量子カーネルの実装と測定

各データ対に対して量子カーネル $\langle \Phi(\vec{x}) | \Phi(\vec{x}) \rangle$ を計算、測定してカーネル行列を作っていきます。



カーネル行列の各要素は、各データごとに計算していきます。

$$K(\vec{x}_i, \vec{x}_k) = |\langle \Phi(\vec{x}_i) | \Phi(\vec{x}_k) \rangle|^2$$

今回のMNISTのデモでは、以下を計算します：

- 訓練データ同士（例：100x100の行列）
- 訓練データとテストデータ（例：100x20の行列）

量子カーネルは各データ(ベクトル)の内積

カーネル行列 : $K(\vec{x}_i, \vec{x}_k) = |\langle \Phi(\vec{x}_i) | \Phi(\vec{x}_k) \rangle|^2$

$$\langle \psi | = (|\psi\rangle)^\dagger = (\alpha^* \quad \beta^*)$$

横ベクトル

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

隨伴行列（エルミート共役）：

転置と要素の複素共役を同時に取る。

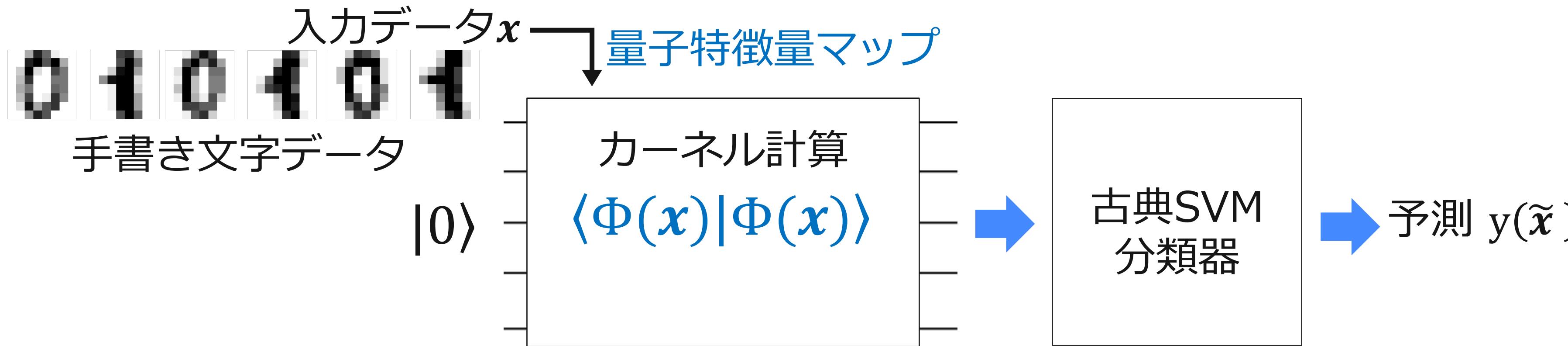
例) $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ のとき、 $A^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix}$ ここで $a = x + iy$
 $a^* = x - iy$

ベクトル $\langle \Phi(\vec{x}_i) |$ と $|\Phi(\vec{x}_k)\rangle$ の内積：

$$\langle \Phi(\vec{x}_i) | \Phi(\vec{x}_k) \rangle = (x_{i1}^* \quad x_{i2}^*) \begin{pmatrix} x_{k1} \\ x_{k2} \end{pmatrix} = x_{i1}^* x_{k1} + x_{i2}^* x_{k2} : \text{数値}$$

カーネル行列の各要素ごとに計算していきます。

量子カーネルSVMでMSNIT分類



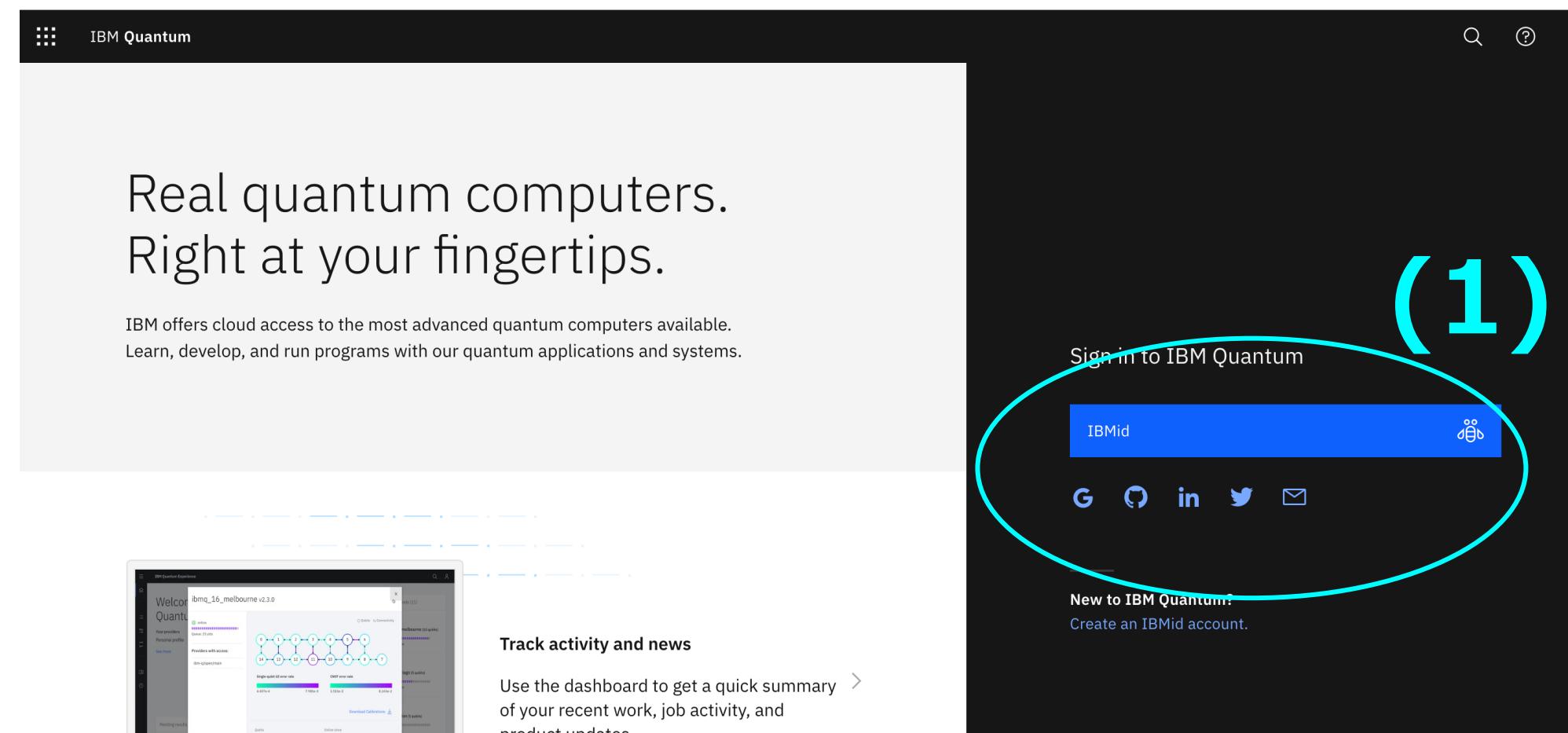
1. 0, 1のラベル付き手書き文字訓練データ x_i を量子特徴量マップ $\Phi(x_i)$ にエンコード（符号化）する。
ZZ-featuremapを使います。
2. 各データ対に対して量子カーネル $\langle\Phi(x_i)|\Phi(x_k)\rangle$ を計算・測定し、
カーネル行列 $K(x_i, x_k) = |\langle\Phi(x_i)|\Phi(x_k)\rangle|^2$ を作る。
 - 訓練データ同士（例：100×100の行列）
 - 訓練データとテストデータ（例：100×20の行列）
3. 古典SVMで学習し、テストデータを分類する。
 - 訓練データのカーネル行列を使って学習。（例：100×100の行列）
 - 訓練データとテストデータの行列（例：100×20の行列）から、テストデータがどちらに分類されるか判別。

デモ：IBM Quantum Labでの実行

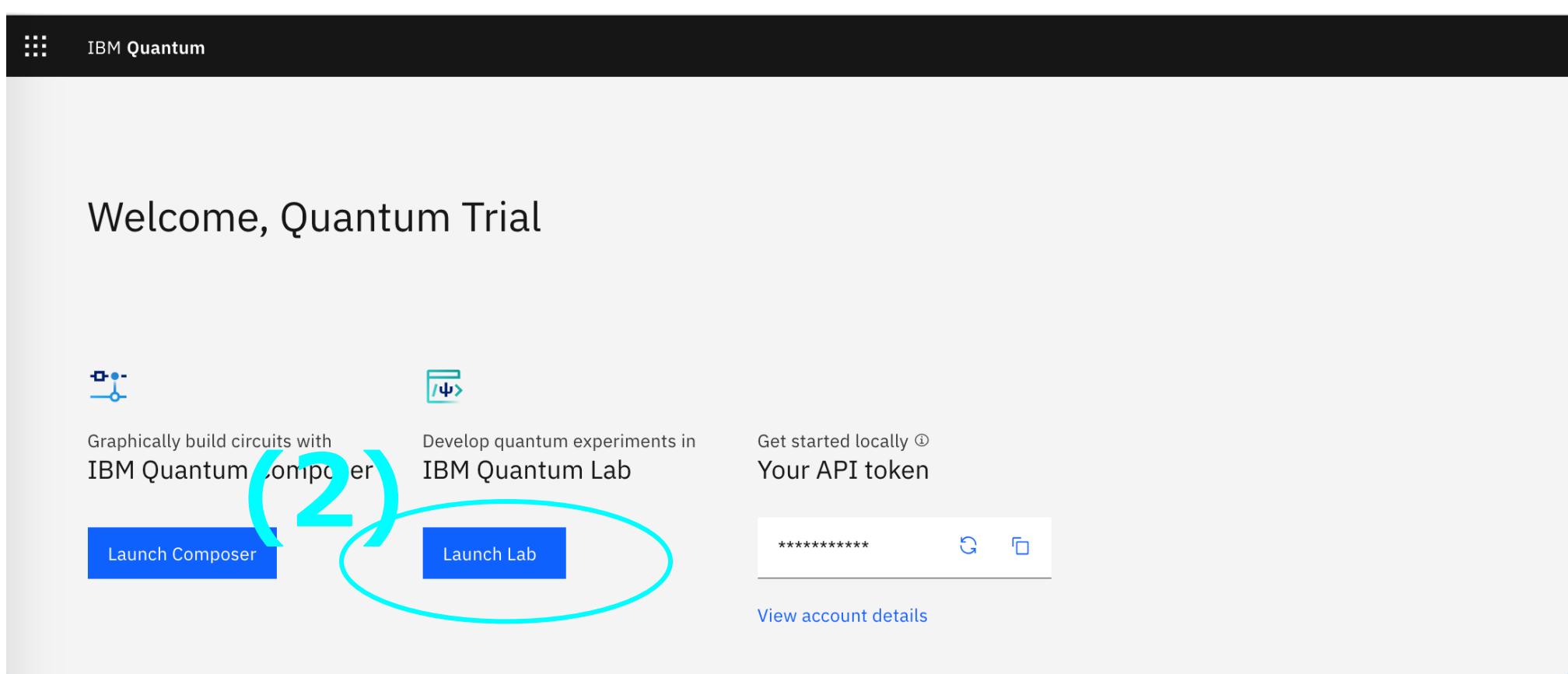
サインインの方法：[『IBM Quantum Composerの登録（くわしいバージョン）』](#)

(1) IBM Quantumにログインします。

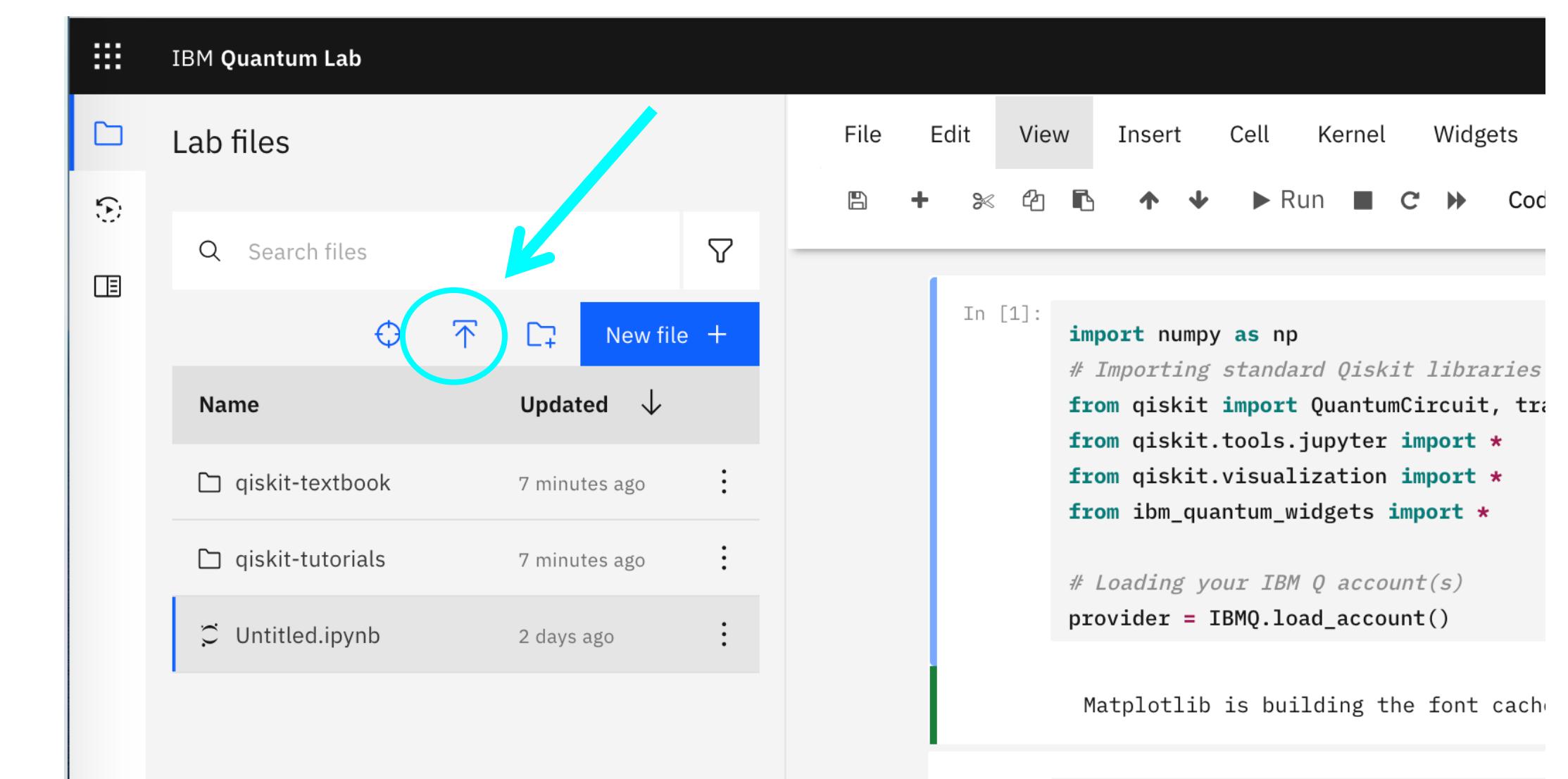
URL: <https://quantum-computing.ibm.com/>



(2) 青の右側「Launch Lab」をクリック。



(3) 左側 の「Upload file」から、ご自分のローカルに保存したハンズオンコンテンツ「20220603_WiDS_QML.ipynb」を探して、アップロードします。



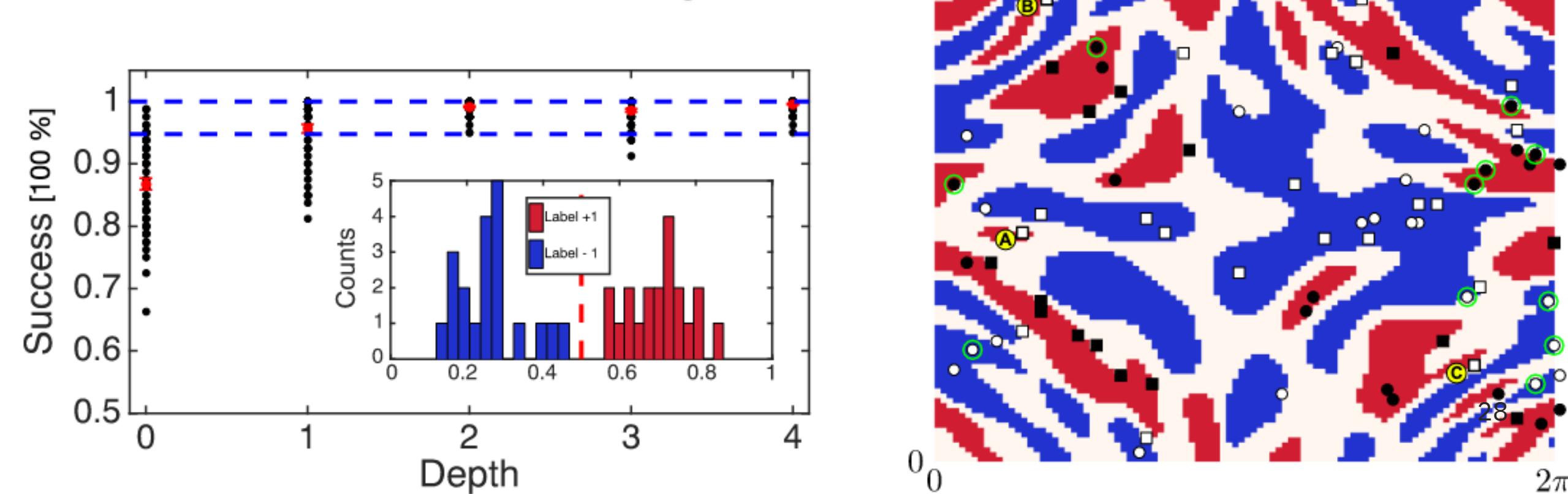
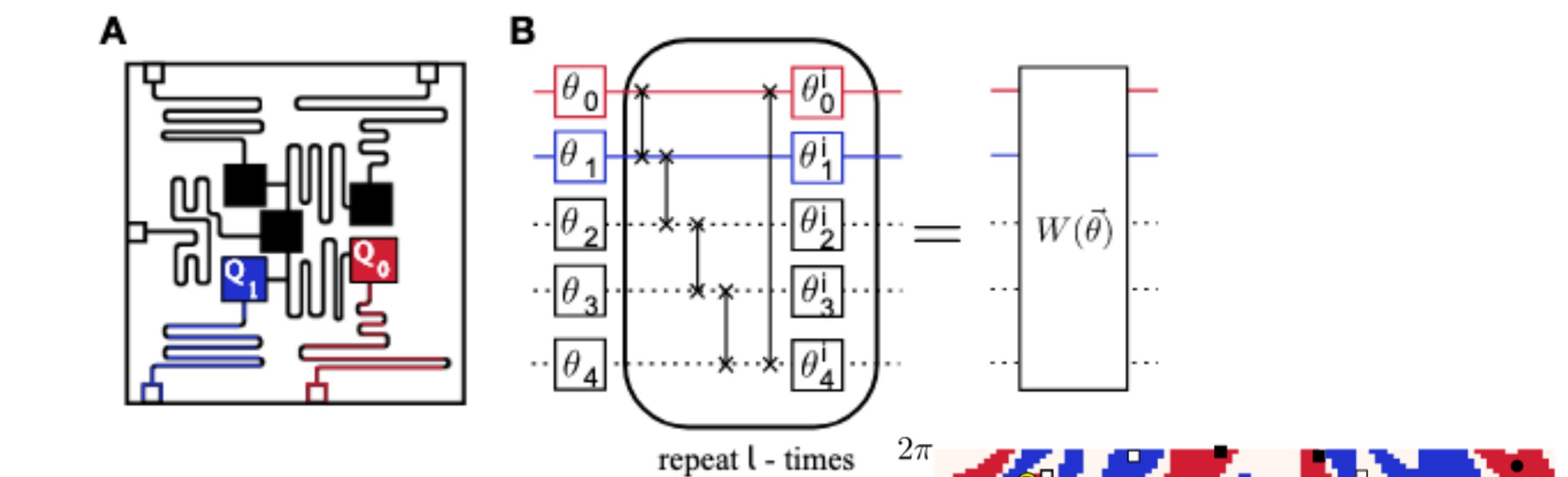
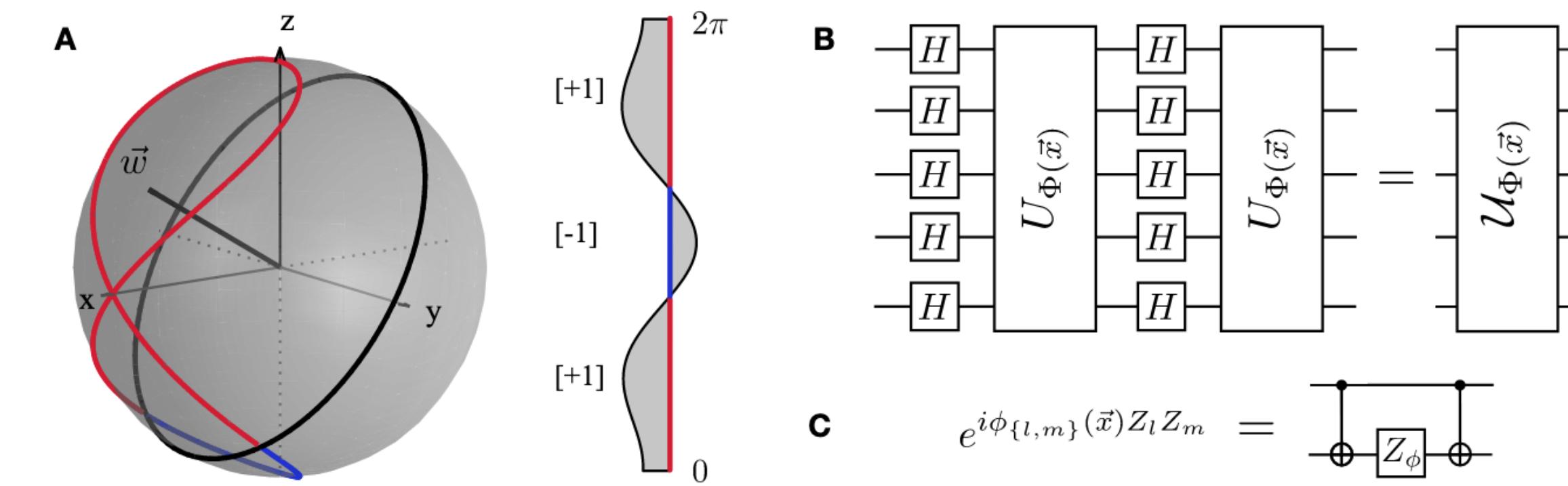
(4) ファイル名「20220603_WiDS_QML.ipynb」をダブルクリックして開きます。



Letter | Published: 13 March 2019

Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces

Vojtěch Havlíček, Antonio D. Cároles Kristan Temme , Aram W. Harrow, Abhinav Kandala, Jerry M. Chow & Jay M. Gambetta



まとめ

- 量子コンピューターの計算
「量子重ね合わせ」と「量子エンタングルメント」による計算
- 量子カーネル計算による量子機械学習
量子特徴量空間にデータをマップ
- MNIST分類のQiskit実装
様々な量子特徴量マップを学び、ZZ Featuremapで実装しました

量子カーネルSVMの参考文献

量子カーネルSVM：最も普及している量子カーネルアルゴリズム。

- Yunchao Liu, Srinivasan Arunachalam and Kristan Temme, *A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning* (2020), [arXiv:2010.02174](https://arxiv.org/abs/2010.02174).
量子カーネルSVMが特定の特定の入力データクラスに対して従来の方法よりも高速化することを証明。
- Hsin-Yuan Huang, Michael Broughton, Masoud Mohseni, Ryan Babbush, Sergio Boixo, Hartmut Neven and Jarrod R. McClean, *Power of data in quantum machine learning* (2020), [arXiv:2011.01938](https://arxiv.org/abs/2011.01938).
量子カーネルSVMを使用して、量子機械学習アルゴリズムのデータの計算能力を定量化し、量子モデルが従来のモデルを上回ることができる条件を提示。
- Lloyd, Seth, Maria Schuld, Aroosa Ijaz, Josh Izaac, and Nathan Killoran, *Quantum embeddings for machine learning* (2020), [arXiv preprint arXiv:2001.03622](https://arxiv.org/abs/2001.03622)
量子カーネルアラインメント(最適化できるパラメーターを持つ構造)を可能にする量子メトリック学習と呼ばれる手法を提示。

さらに量子プログラミングを学びたい方へ

Qiskitチュートリアル

The screenshot shows the Qiskit documentation homepage in Japanese. The top navigation bar includes links for 'Getting started', 'Tutorials', 'Providers', 'Applications', 'Resources', and 'Github'. A dropdown menu for language selection is open, showing 'Japanese' as the current choice. Below the navigation, a search bar is present. The main content area is titled 'Qiskit 入門' (Qiskit Tutorial) and discusses the workflow: Build, Compile, Run, and Analyze. It includes a code snippet for creating a quantum circuit:

```
import numpy as np
from qiskit import QuantumCircuit, transpile
from qiskit.providers.aer import QasmSimulator
from qiskit.visualization import plot_histogram

# Use Aer's qasm_simulator
simulator = QasmSimulator()

# Create a Quantum Circuit acting on the q register
circuit = QuantumCircuit(2, 2)

# Add a H gate on qubit 0
circuit.h(0)

# Add a CX (CNOT) gate on control qubit 0 and target qubit 1
circuit.cx(0, 1)
```

Qiskitテキストブック

The screenshot shows the preface page of the 'Qiskitを使った量子計算の学習' (Learning Quantum Computing with Qiskit) textbook. The page features a large title and a diagram of two people working on a large quantum computer setup. The text below the diagram states: 'Qiskit Communityチームからのご挨拶です！Qiskitをベースとした大学の量子アルゴリズム/計算コースの補足教材となるよう、このテキストブックを作り始めました：' (A greeting from the Qiskit Community team! This textbook is being created as a supplement for university quantum algorithm/computation courses based on Qiskit.)

The main content area is organized into three sections:

- 1. 量子状態と量子ビット**
 - 1.1 はじめに
 - 1.2 計算の原子
 - 1.3 量子ビット状態を表現する
 - 1.4 単一量子ビットゲート
 - 1.5 量子コンピューターの場合
- 2. 複数量子ビットともつれ状態**
 - 2.1 はじめに
 - 2.2 複数量子ビットともつれ状態
 - 2.3 位相キックバック
 - 2.4 さらなる回路の等価性
 - 2.5 普遍性の証明
 - 2.6 量子コンピューター上の古典計算
- 3. 量子プロトコルと量子アルゴリズム**
 - 3.1 量子回路
 - 3.2 ドイチ-ジョサのアルゴリズム
 - 3.3 ベルンシュタイン・ヴァジラニ アルゴリズム
 - 3.4 サイモンのアルゴリズム

https://qiskit.org/documentation/locale/ja_JP/tutorials.html

<https://qiskit.org/textbook/ja/preface.html>

量子コンピューター夏の学校

～今年は量子シミュレーションです！

開催期間：7/18(月)～7/29(金)

第2段申し込み：6/3(金)朝7:00(日本時間) Open

Qiskit Global Summer School 2022: Quantum Simulations

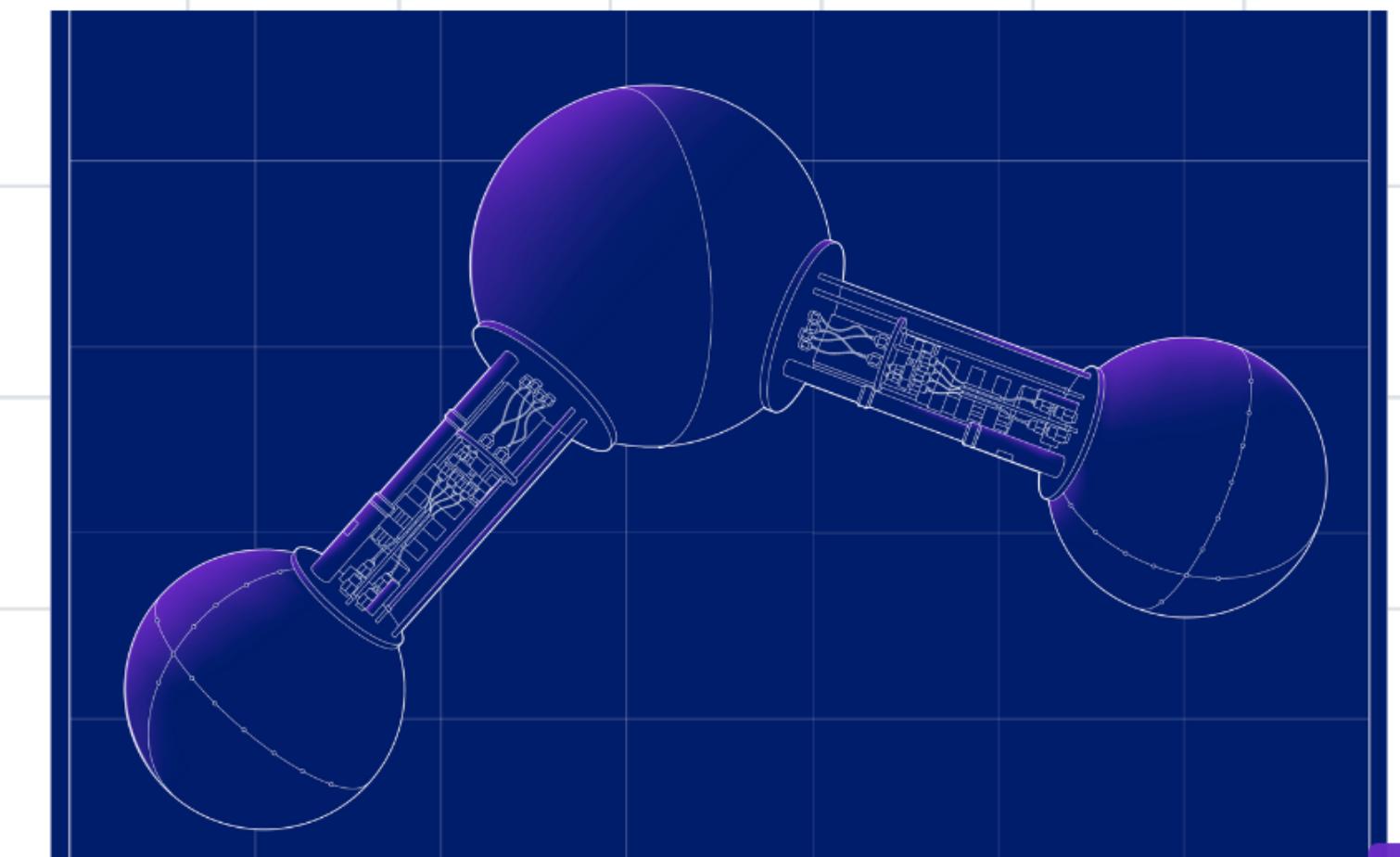
The Qiskit Global Summer School 2022 is a two-week intensive summer program designed to empower the quantum researchers and developers of tomorrow with the skills and know-how to explore the world of quantum computing and its applications. This third-annual summer school will provide a focused introduction to quantum computing and its applications to quantum simulation, with a specific focus on quantum chemistry.

Please follow [Qiskit Twitter](#) for more details and updates. For any questions, please check out our FAQ below!

Early Bird Registration will open at 12:00 PM EST on May 26, 2022.

<https://qiskit.org/events/summer-school/>

Register now!



Qiskit Global Summer School 2022: Quantum Simulations

The Qiskit Global Summer School returns as a two-week intensive course focused on Quantum Simulations and more!

Online

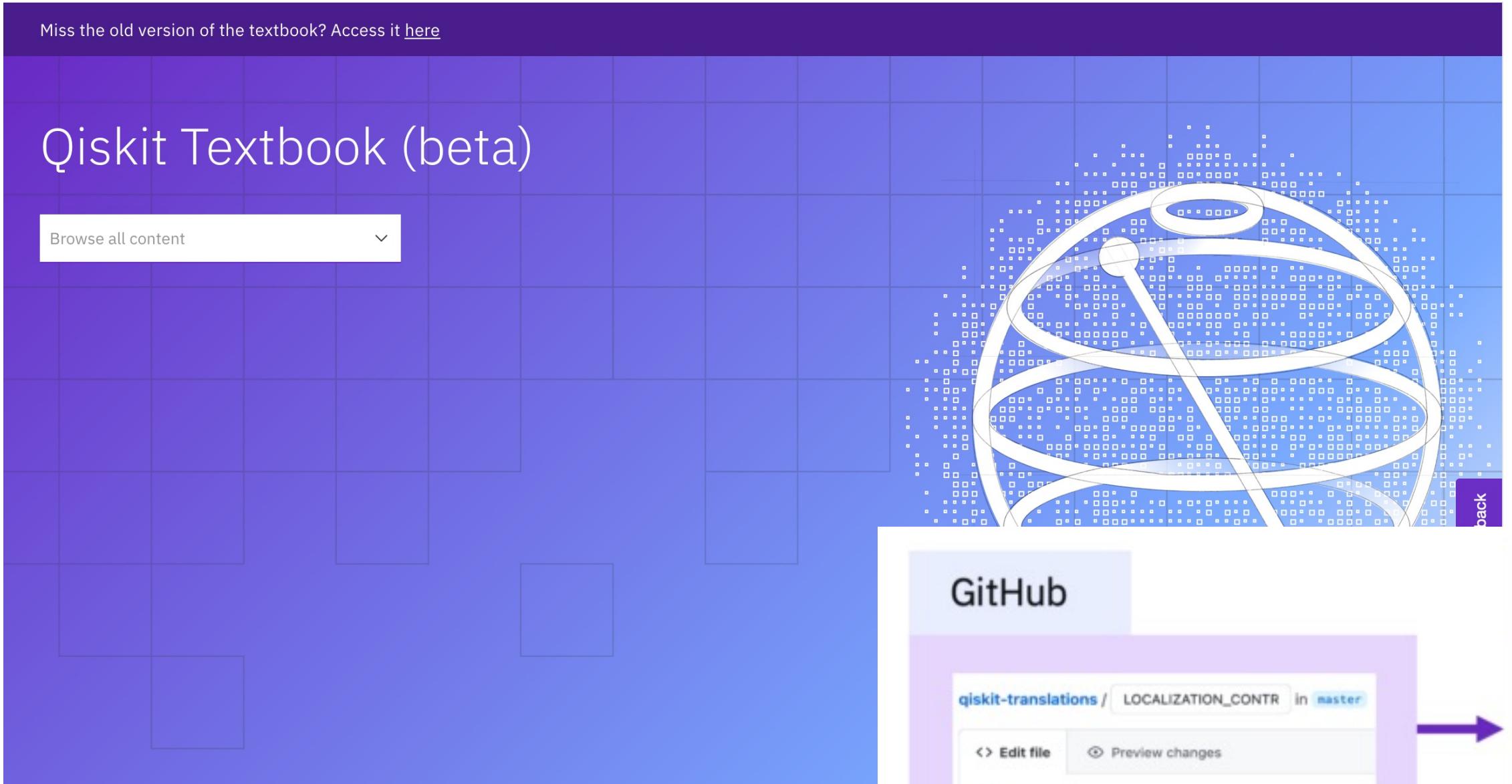
July 18 - 29, 2022

[Learn more](#)

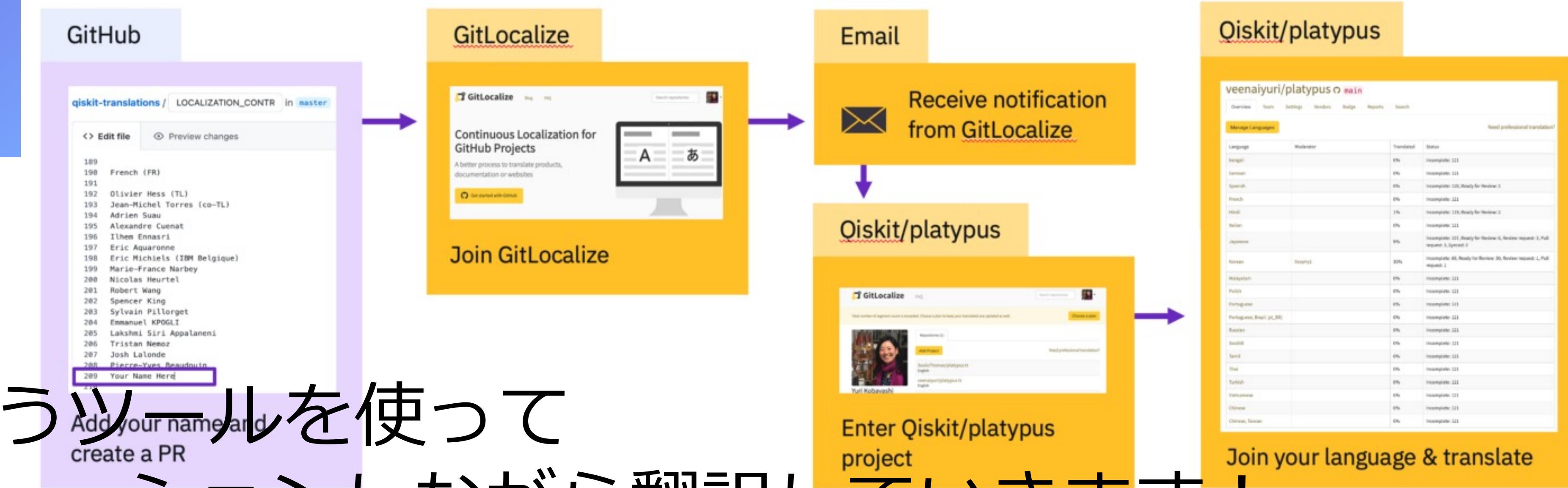
Feedback

新版Qiskit Textbookの翻訳協力者募集中！

<https://github.com/Qiskit/platypus/blob/main/TRANSLATING.md>



Help make Qiskit accessible to non-English speaking communities



GitLocalizeというツールを使って
複数人でコラボレーションしながら翻訳していきます！



コメント&アンケート
参加お願いします

< Webブラウザから >

slido.com
#wids2022

Q&Aに隨時質問OK !
Q&AにはコメントをいれてもOKです

会議室の選択 →



14:50-15:40
QUANTUM COMPUTING TALK #2

< Webexアプリから >
Slidoパネルから回答お願いします

会議室の選択

会議室を選択

- 10:00-10:10 OPENING TALK
- 10:10-11:00 KEYNOTE
- 11:10-12:00 DATA SCIENTIST TALK#1
- 12:10-12:50 NETWORKING LUNCH
- 13:00-13:40 DATA SCIENCE x HEALTH...
- 13:50-14:40 QUANTUM COMPUTING T...
- 14:50-15:40 QUANTUM COMPUTING T...

会議室の変更

会議室を選択

10:10-11:00 KEYNOTE

Q&A 投票

上部の会議室名をクリック



WOMEN IN DATA SCIENCE