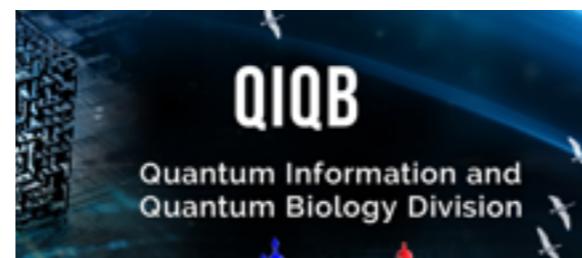


NISQ時代の量子コンピューティングと機械学習・ 量子化学への応用

藤井 啓祐

大阪大学 基礎工学研究科 システム創成専攻 教授
JSTさきがけ



自己紹介：藤井 啓祐

工

基礎工

情報

理学・物理

物理工学

理学・物理

基礎工

2002年4月～2008年3月

京都大学工学部・物理工学科、大学院工学研究科原子核工学専攻
修士課程

2008年4月～2011年3月

京都大学 工学研究科 原子核工学専攻 博士課程
日本学術振興会特別研究員 DC1



2011年4月～2013年3月

大阪大学 基礎工学研究科 物質創成専攻 井元研 特任研究員



2013年4月～2015年3月

京都大学 白眉センター
(情報学研究科 通信情報システム専攻 岩間研 特定助教)



2015年4月～2016年3月

京都大学 白眉センター
(理学研究科 物理学宇宙物理学専攻 高橋研 特定助教)



2016年4月～

東京大学 工学系研究科 光量子科学研究中心 小芦研 助教
(物理工学専攻 兼担)



2017年10月～

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 特定准教授



2019年4月～

大阪大学 基礎工学研究科 システム創成専攻 教授



2016年10月～

JSTさきがけ 「量子の状態制御と機能化」 さきがけ研究员兼任



IPA未踏プロジェクト 量子コンピュータ PM

採択課題例

- ・ web開発向けオープンソース量子計算ライブラリの開発
- ・ 量子コンピュータによる公平な抽選システムの開発
- ・ ゲート式量子コンピュータと機械学習による高速モンテカルロ計算
- ・ 変分量子回路の高速自動最適化ツールの開発



IPA未踏プロジェクト 量子コンピュータ PM

採択課題例

- ・ web開発向けオープンソース量子計算ライブラリの開発
- ・ 量子コンピュータによる公平な抽選システムの開発
- ・ ゲート式量子コンピュータと機械学習による高速モンテカルロ計算
- ・ 変分量子回路の高速自動最適化ツールの開発



QunaSys:量子コンピュータソフトウェアベンチャ

QunaSys

HOME ABOUT TECHNOLOGY SERVICES NEWS CAREER ENGLISH CONTACT

MAXIMIZE THE POWER OF QUANTUM COMPUTING

QunaSysは、量子コンピュータの潜在能力を最大限に引き出す技術やソフトウェアを開発し、社会に革新をもたらします。

Quantum Native Systems

QunaSys

TEAM

橋 天任 CEO
御手洗 光祐 CTO
中川 勝也 Chief Engineer
山本貴博 Engineer

ADVISORS

藤井 啓祐
相馬 誠
水上 涼

- ・ 高速シミュレータ
- ・ 材料メーカー等と協業
- ・ 国際学会等で採択
- ・ 論文を発表
- ・ 実機の利用(Rigetti)
- ・ 教育環境の整備

エンジニア・
リサーチャー
絶賛募集中

目次

- 量子コンピュータの歴史
- 量子とは？ 量子コンピュータの仕組み
- NISQ時代
- 最近の研究から(量子機械学習・量子化学)

量子コンピュータの歴史

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

約50年の熟成



ランダウア ファインマン

'81 '85

量子チューリング機械

量子コンピュータ



ドイッチュ

量子コンピュータの歴史

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける

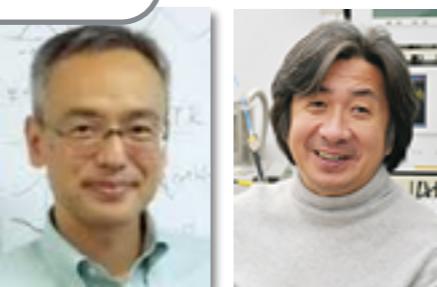
約50年の熟成



ランダウア フайнマン



ショア
素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)



NEC 中村・蔡先生
固体素子で量子ビット



西森先生
(東工大)

'81 '85

'94 '95

'98 '99

量子チューリング機械
量子コンピュータ
量子コンピュータはデジタル
精度保証できる



ディッヂ

量子コンピュータの歴史

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム



藤井啓祐
量子コンピュータの研究を開始する ('06)

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける

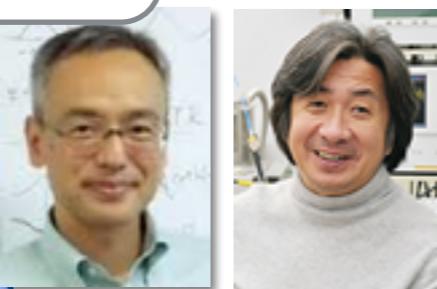
約50年の熟成



ランダウア フайнマン



ショア
素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)



NEC 中村・蔡先生
固体素子で量子ビット



西森先生
(東工大)

停滞期

'81 '85

'94 '95

'98 '99

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子コンピュータの歴史

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

約50年の熟成



ランダウア フайнマン

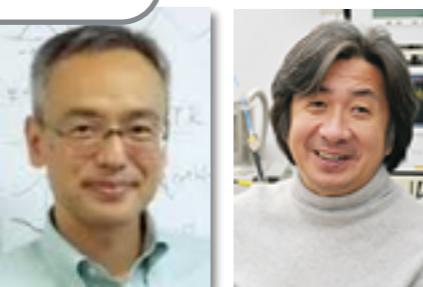
量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける



素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)

量子誤り訂正

'81 '85 '94 '95 '98 '99



固体素子で量子ビット



西森先生
(東工大)

量子アニーリング

藤井啓祐

量子コンピュータの
研究を開始する ('06)

量子アニーラ



D-wave(カナダ)

Googleが
D-wave マシンを
購入して研究を開始

停滞期

'11

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

量子チューリング機械

量子コンピュータ



デイッヂ

量子コンピュータの歴史

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

約50年の熟成



ランダウア フайнマン

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける

'81 '85

素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)

量子誤り訂正

'94 '95

固体素子で量子ビット

西森先生
(東工大)

量子アニーリング

'98 '99

藤井啓祐

量子コンピュータの
研究を開始する ('06)

量子アニーラ



Googleが
D-wave マシンを
購入して研究を開始



D-wave(カナダ)

5-量子ビット

超高忠実度を実現

Googleゲート型量子コ
ンピュータに参戦



マルチネス

停滞期

'11 '14

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる



ドイツ

量子コンピュータの歴史

第二期ブーム

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

約50年の熟成



ランダウア フайнマン

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける



藤井啓祐

量子コンピュータの
研究を開始する ('06)

量子アニーラ

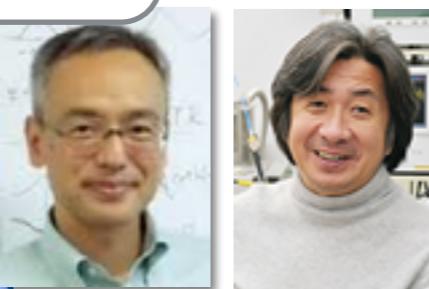


D-wave(カナダ)

Googleが
D-wave マシンを
購入して研究を開始



素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)



NEC 中村・蔡先生
固体素子で量子ビット

西森先生
(東工大)

量子誤り訂正

量子アニーリング

'81

'85

'94 '95

'98 '99

停滞期

'11 '14

'16 '17

2019年

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子超越性
(量子加速の実証)

ディッヂュ

量子コンピュータの歴史

第二期ブーム

量子力学の誕生 1920~



第一期ブーム



藤井啓祐

量子コンピュータの
研究を開始する ('06)

量子アニーラ



D-wave(カナダ)

Googleが
D-wave マシンを
購入して研究を開始



2014.8.25

'81

'85

量子誤り訂正

'94 '95

量子アニーリング

'98 '99

停滞期

'11 '14

'16 '17

20-50量子ビット

2019年

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子超越性
(量子加速の実証)



ドイツ

量子コンピュータの歴史

第二期ブーム

量子力学の誕生 1920~



第一期ブーム



藤井啓祐

Google Hires Quantum Computing Expert John Martinis to Build New Hardware

By Jeremy Hsu
Posted 8 Sep 2014 | 21:00 GMT

[Share](#) | [Email](#) | [Print](#)



Google

<http://spectrum.ieee.org/tech-talk/computing/hardware/google-hires-quantum-computing-expert-john-martinis-to-build-new-hardware>

'81

量子誤り訂正

'85

'94 '95

量子アニーリング

'98 '99

2014.8.25

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

2019年

量子超越性
(量子加速の実証)



デイッヂ

量子コンピュータの歴史

第二期ブーム

量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

約50年の熟成



ランダウア フайнマン

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける



藤井啓祐

量子コンピュータの
研究を開始する ('06)

量子アニーラ

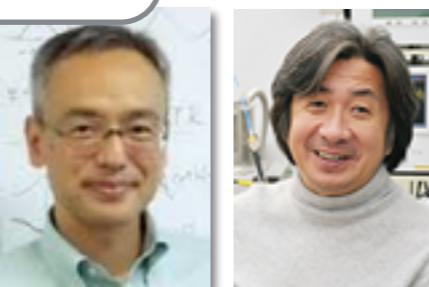


D-wave(カナダ)

Googleが
D-wave マシンを
購入して研究を開始



素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)



NEC 中村・蔡先生
固体素子で量子ビット

西森先生
(東工大)

量子誤り訂正

量子アニーリング

'81

'85

'94 '95

'98 '99

停滞期

'11 '14

'16 '17

2019年

量子チューリング機械

量子コンピュータ

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる

簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

量子超越性
(量子加速の実証)

ディッヂュ

量子コンピュータの歴史

第二期ブーム



量子力学の誕生 1920~



ハイゼンベルグ シュレーディンガー

第一期ブーム

量子コンピュータは
ある種の重要な計算を
指数的に高速に解ける

約50年の熟成



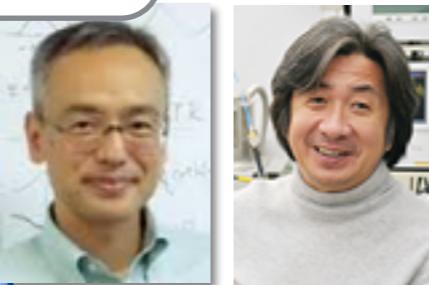
ランダウア フайнマン



素因数分解アルゴリズム
(RSA暗号)

量子誤り訂正

量子コンピュータはデジタル
精度保証できる



NEC 中村・蔡先生
固体素子で量子ビット

西森先生
(東工大)

量子アニーリング



停滞期

5-量子ビット

超高忠実度を実現

Googleゲート型量子コンピュータに参戦



IBMがIBMQ
をクラウドで公開

20-50量子ビット

2019年

量子超越性

(量子加速の実証)



ディッヂ

量子チューリング機械

量子コンピュータ

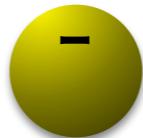
簡単な理論はやり
尽くされる
量子ビットの数が
なかなか増えない

目次

- 量子コンピュータの歴史
- 量子とは？ 量子コンピュータの仕組み
- NISQ時代
- 最近の研究から(量子機械学習・量子化学)

量子の世界の不思議

電子

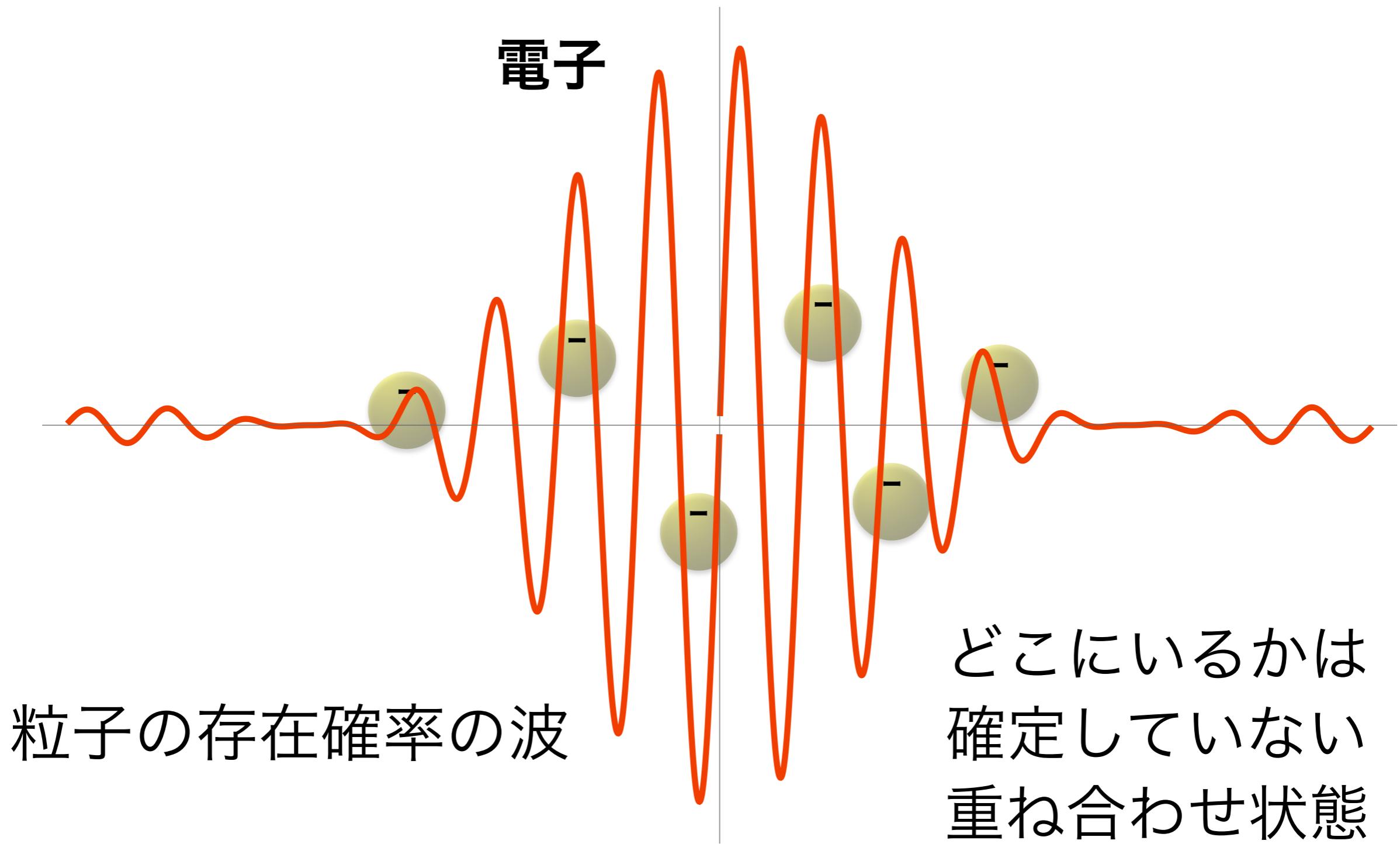


ここに電子がいる!
(我々の日常の直感)

量子の世界の不思議

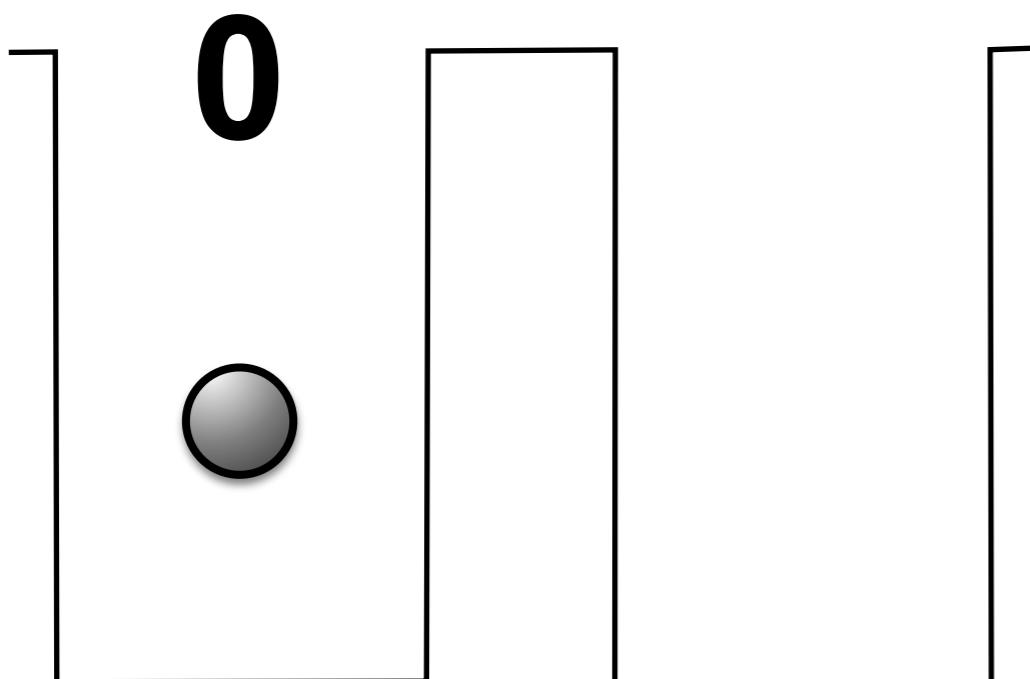


量子の世界の不思議



量子ビット :究極の物理法則を情報の単位にする

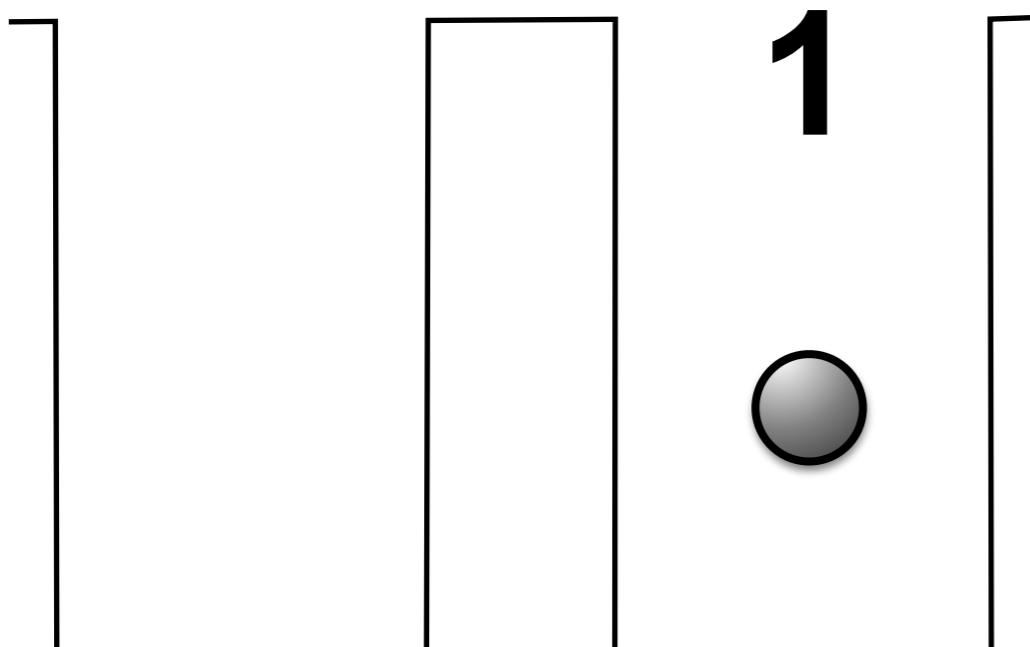
従来のビット :



左の箱に電子がいる

量子ビット : 究極の物理法則を情報の単位にする

従来のビット :



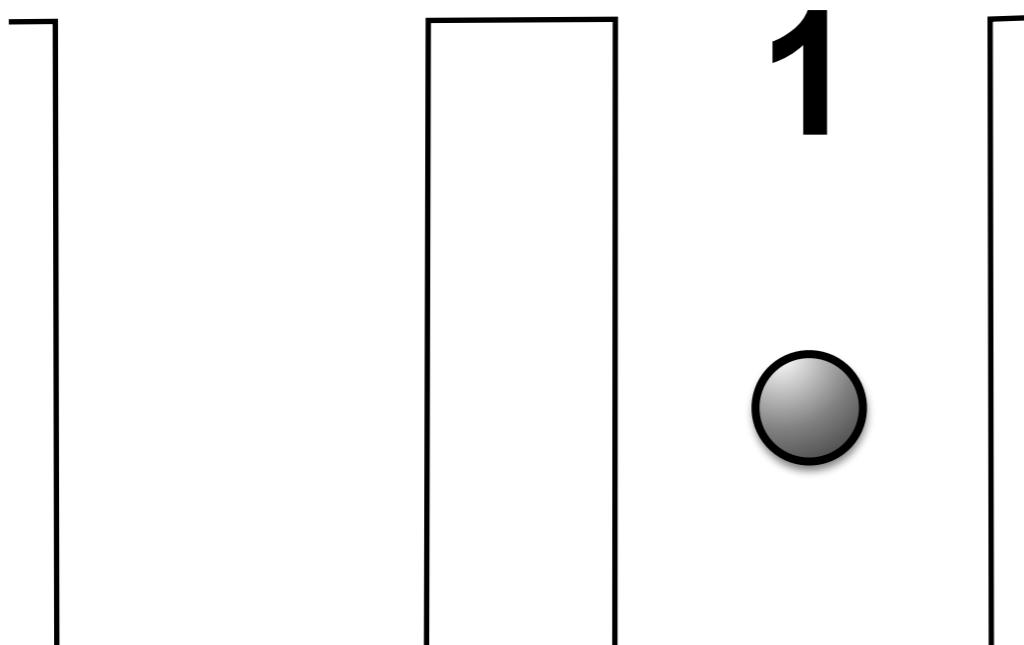
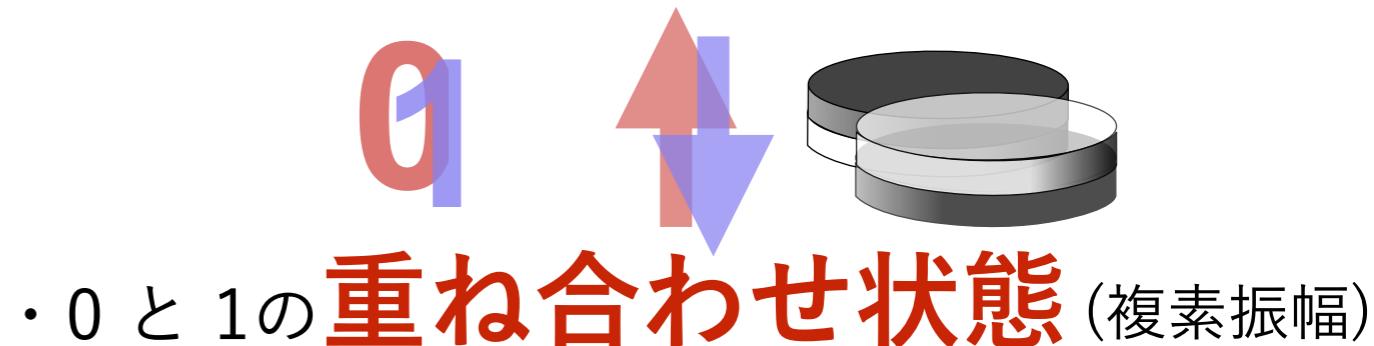
右の箱に電子がいる

量子ビット : 究極の物理法則を情報の単位にする

従来のビット :



量子ビット :



右の箱に電子がいる

0もしくは1のどちらをとったかは確定していない!!

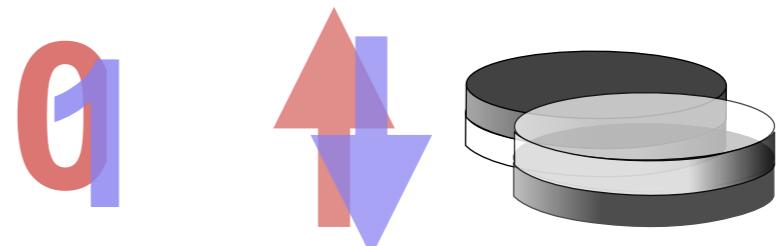
量子ビット：究極の物理法則を情報の単位にする

従来のビット：

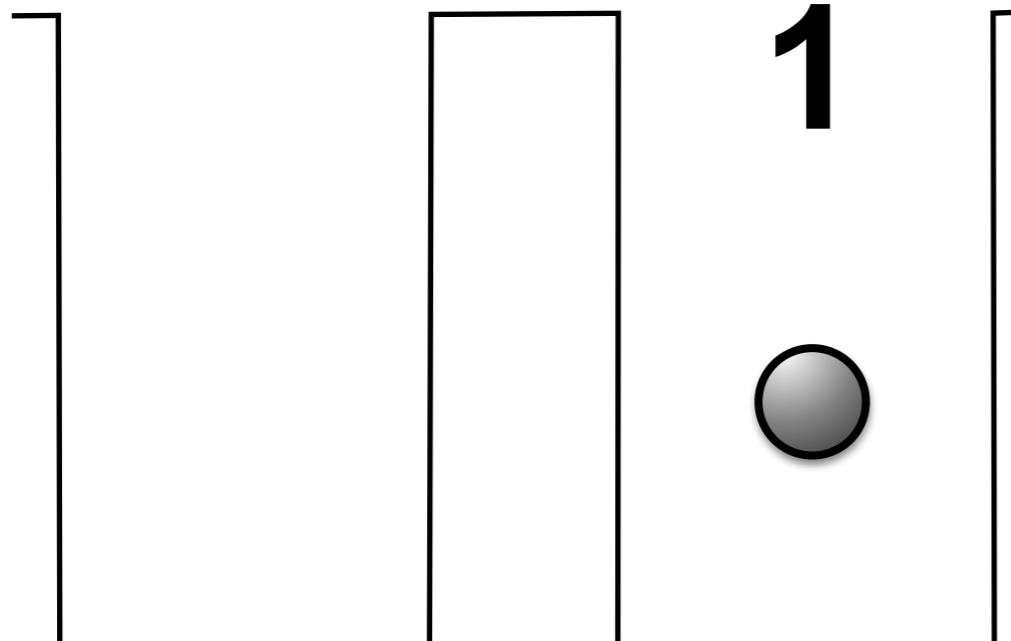


・0 もしくは 1

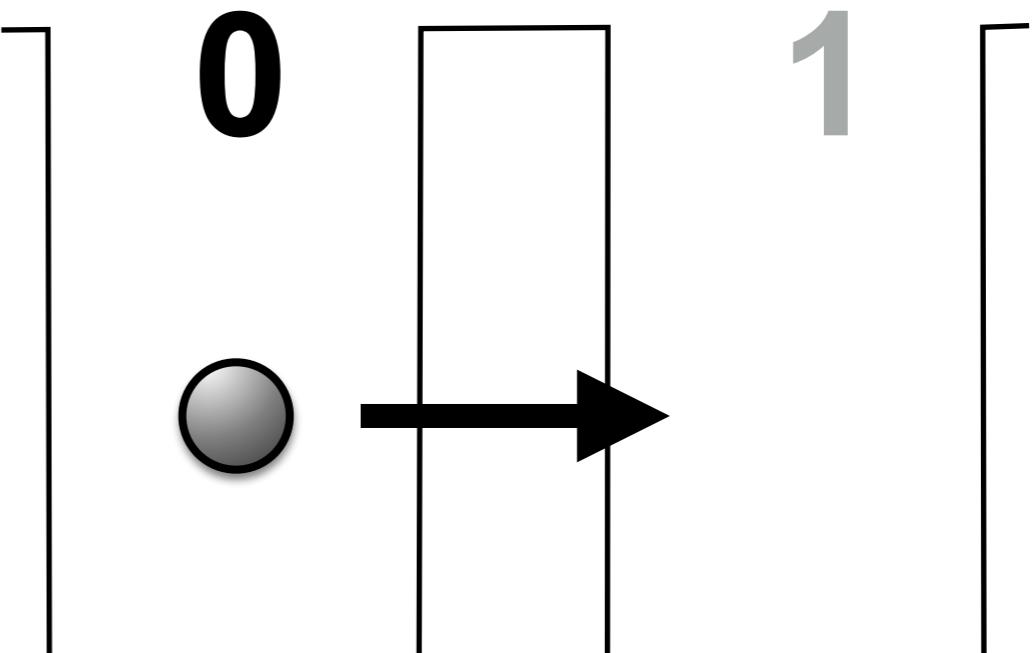
量子ビット：



・0 と 1 の **重ね合わせ状態** (複素振幅)



右の箱に電子がいる



電子を左から右へと移動させると
途中で操作を止めると

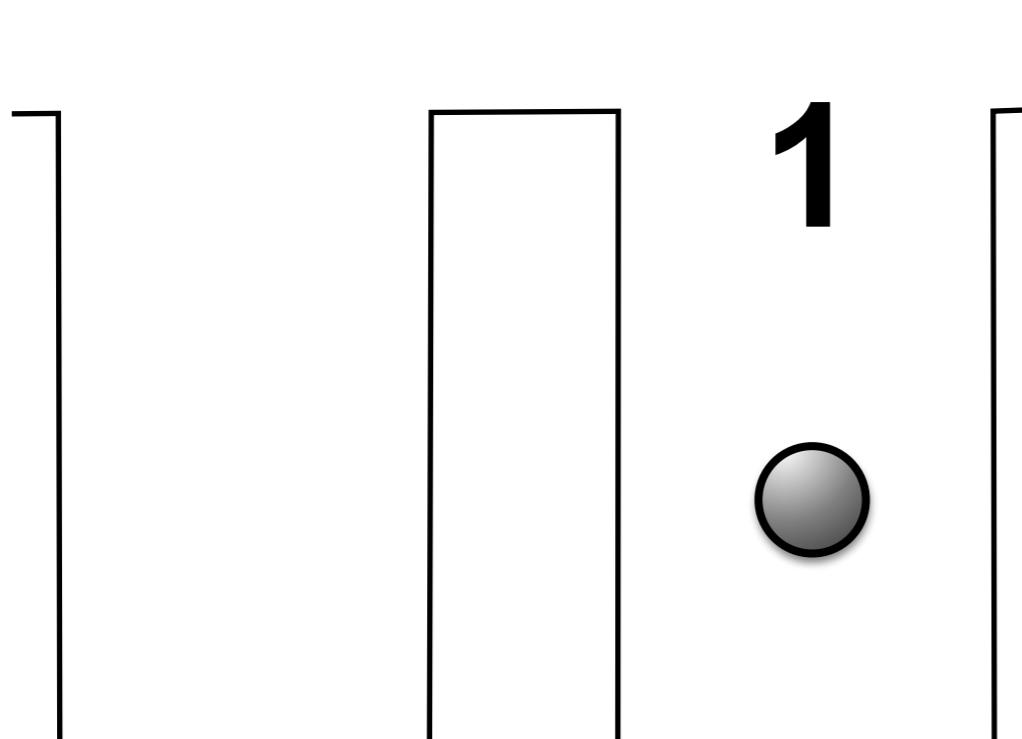
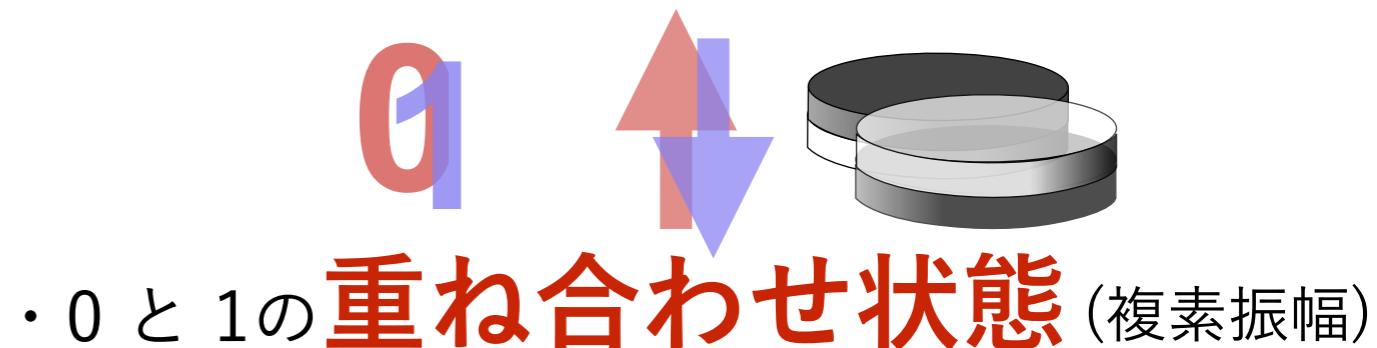
0もしくは1のどちらをとったかは確定していない!!

量子ビット：究極の物理法則を情報の単位にする

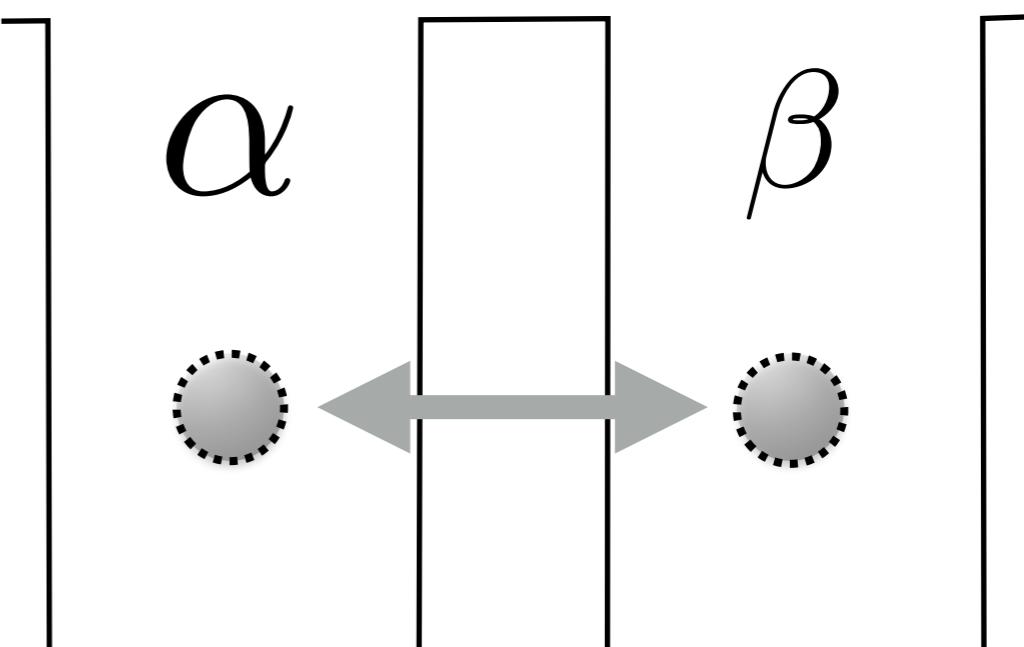
従来のビット：



量子ビット：



右の箱に電子がいる



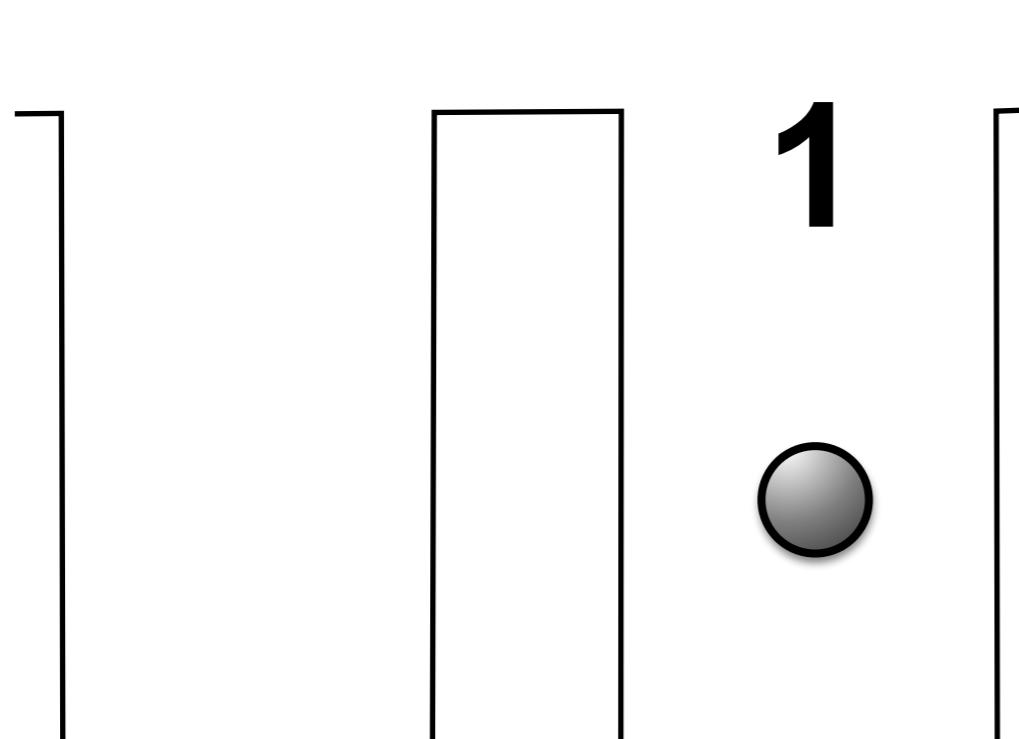
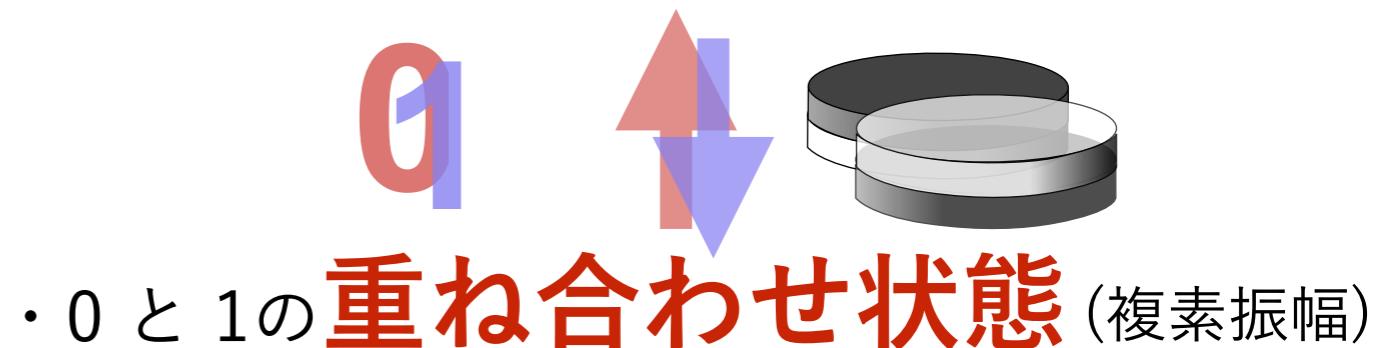
0もしくは1のどちらをとったかは確定していない!!

量子ビット : 究極の物理法則を情報の単位にする

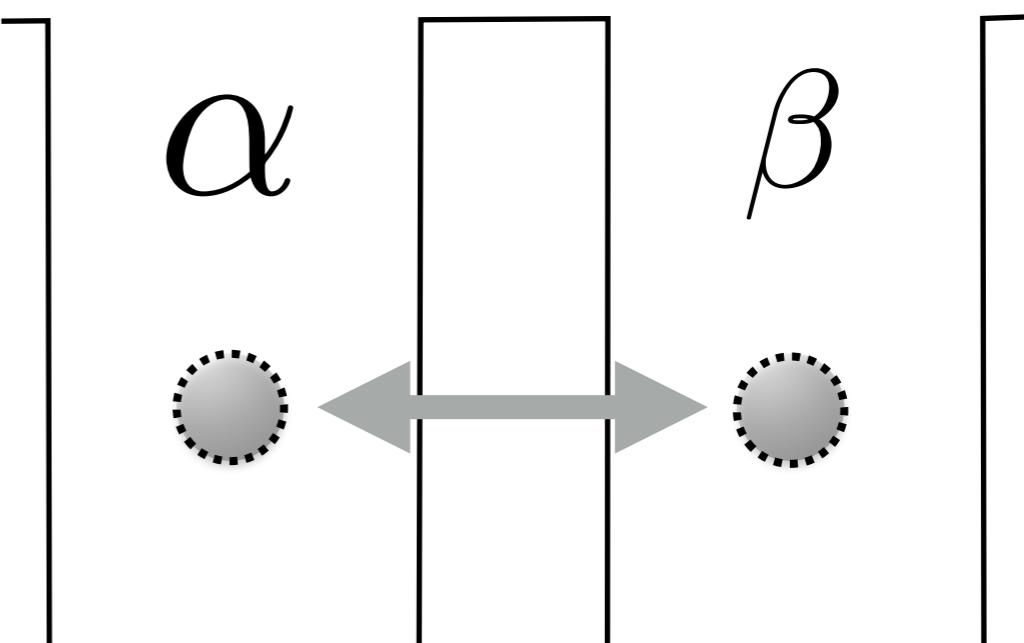
従来のビット :



量子ビット :



右の箱に電子がいる

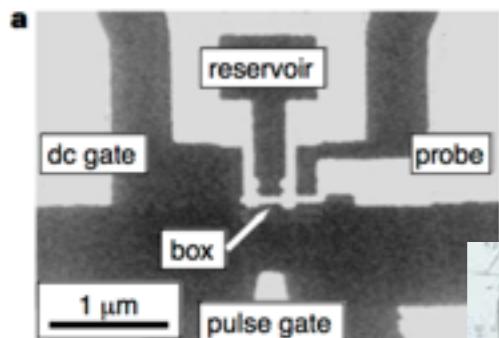


複素ベクトル

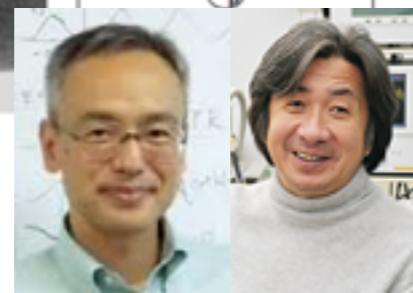
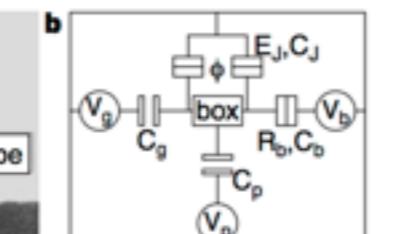
0もしくは1のどちらをとったかは確定していない!!

さまざまな量子ビット

超伝導量子ビット

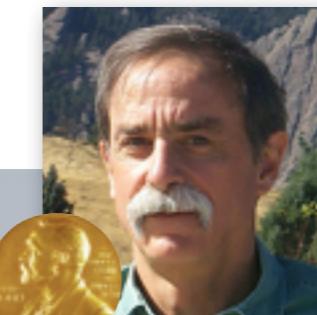
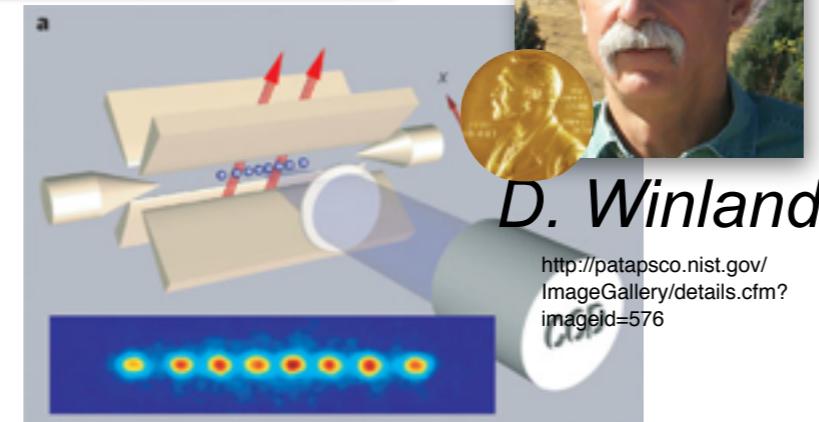


Nakamura *et al.*, Nature 398, 786 (1999)



中村・蔡先生

イオントラップ



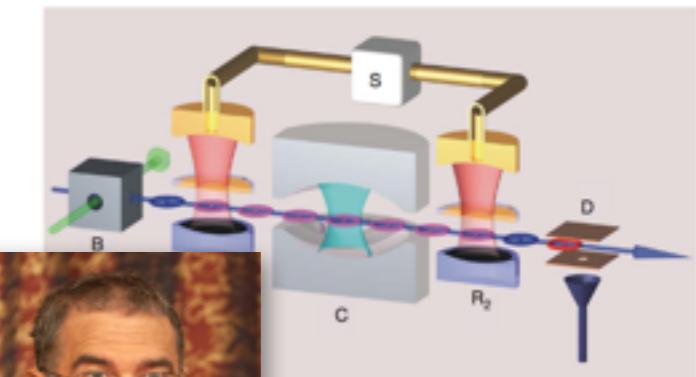
D. Winland

http://patapsco.nist.gov/
ImageGallery/details.cfm?
imageId=576

量子化した電気回路

原子(イオン)の内部状
態&振動状態

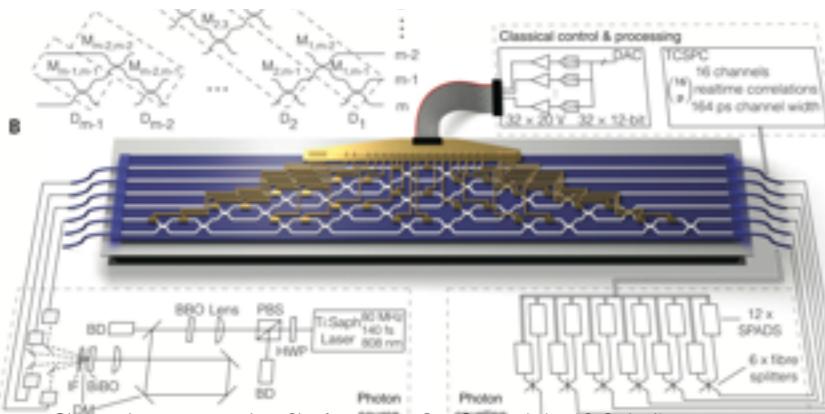
キャビティQED



S. Haroche

原子の内部状態&光

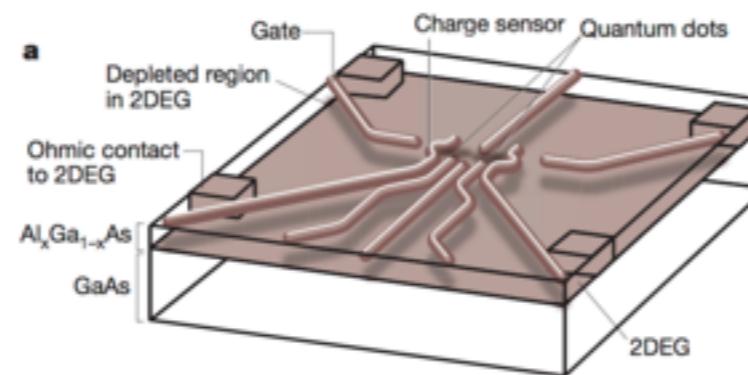
光量子ビット



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

単一光子(空間モード, 偏光モード)

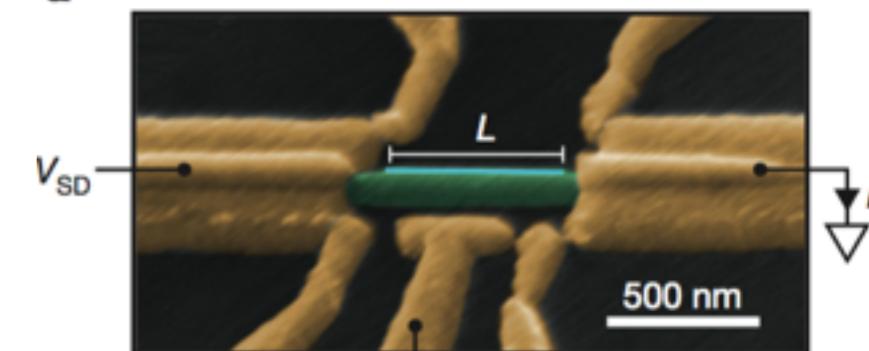
量子ドット



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)

さまざまな量子ビット

超伝導量子ビット



IBM Google Alibaba.com[®]
Global trade starts here.[™]
rigetti intel

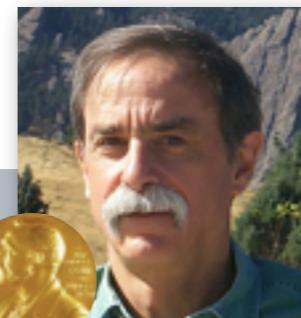
Inakura et al., Nature
398, 786 (1999)

量子化した電気回路



中村・蔡先生

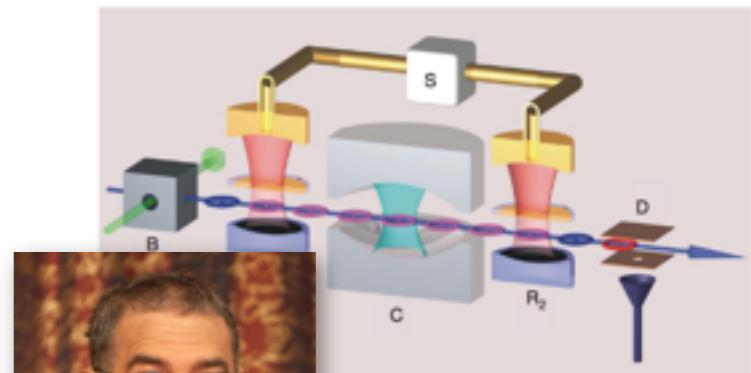
イオントラップ



D. Winland

[http://patapsco.nist.gov/
ImageGallery/details.cfm?
imageId=576](http://patapsco.nist.gov/ImageGallery/details.cfm?imageId=576)

キャビティQED

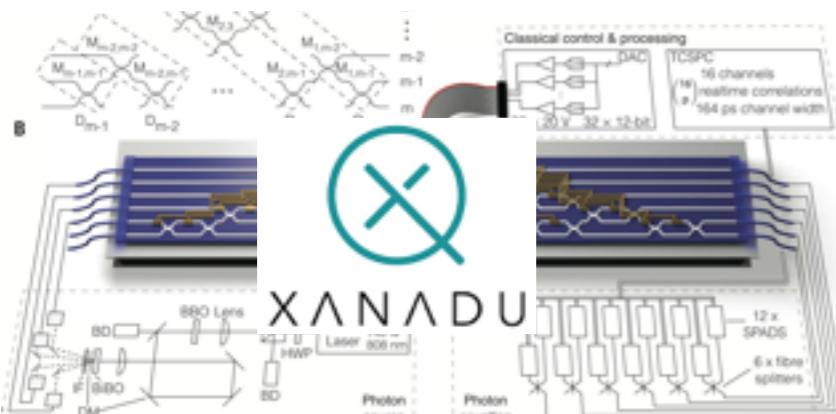


S. Haroche

原子の内部状態&光

原子(イオン)の内部状
態&振動状態

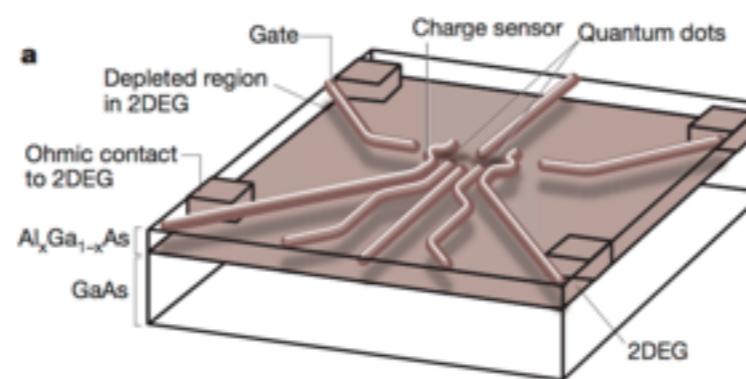
光量子ビット



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

单一光子(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

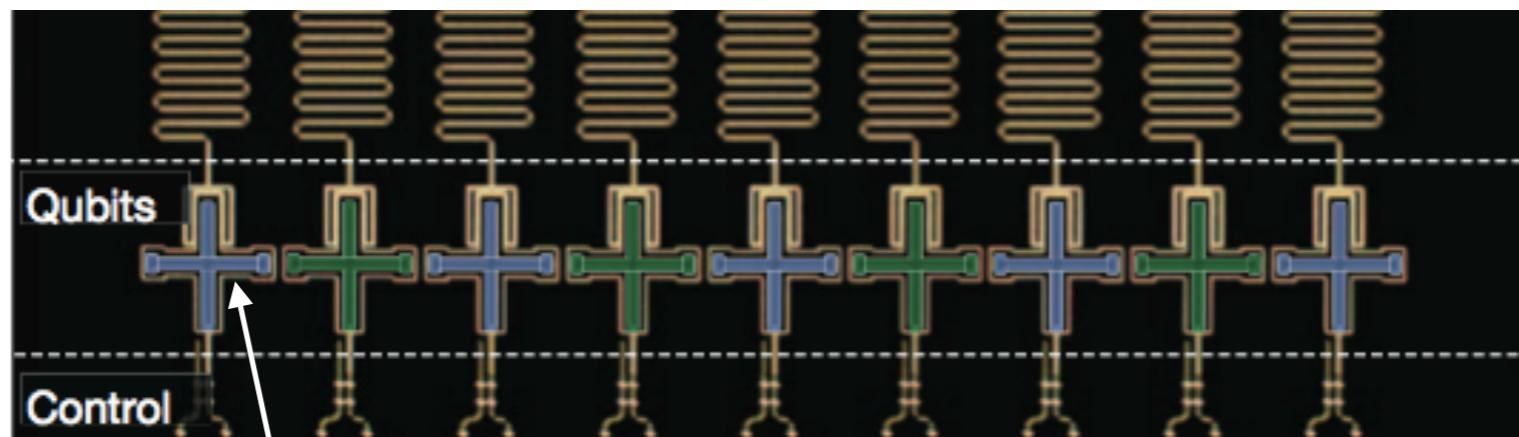


S. M. Albrecht et al., Nature 531, 206 (2016)

マヨラナゼロモード
(半導体ナノワイヤ+超伝導)

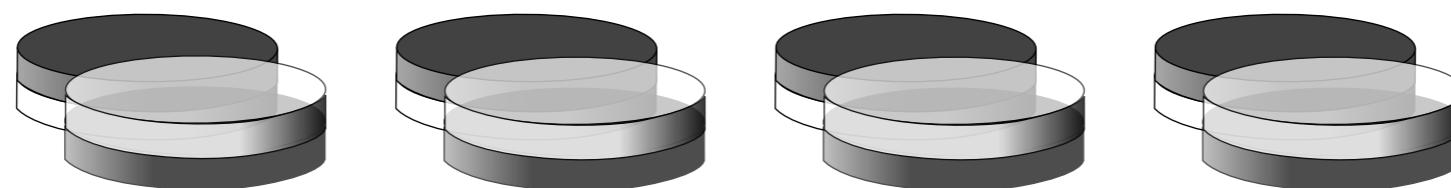
量子コンピュータ

=最も基本的な物理法則を計算原理に用いたコンピュータ



量子ビット

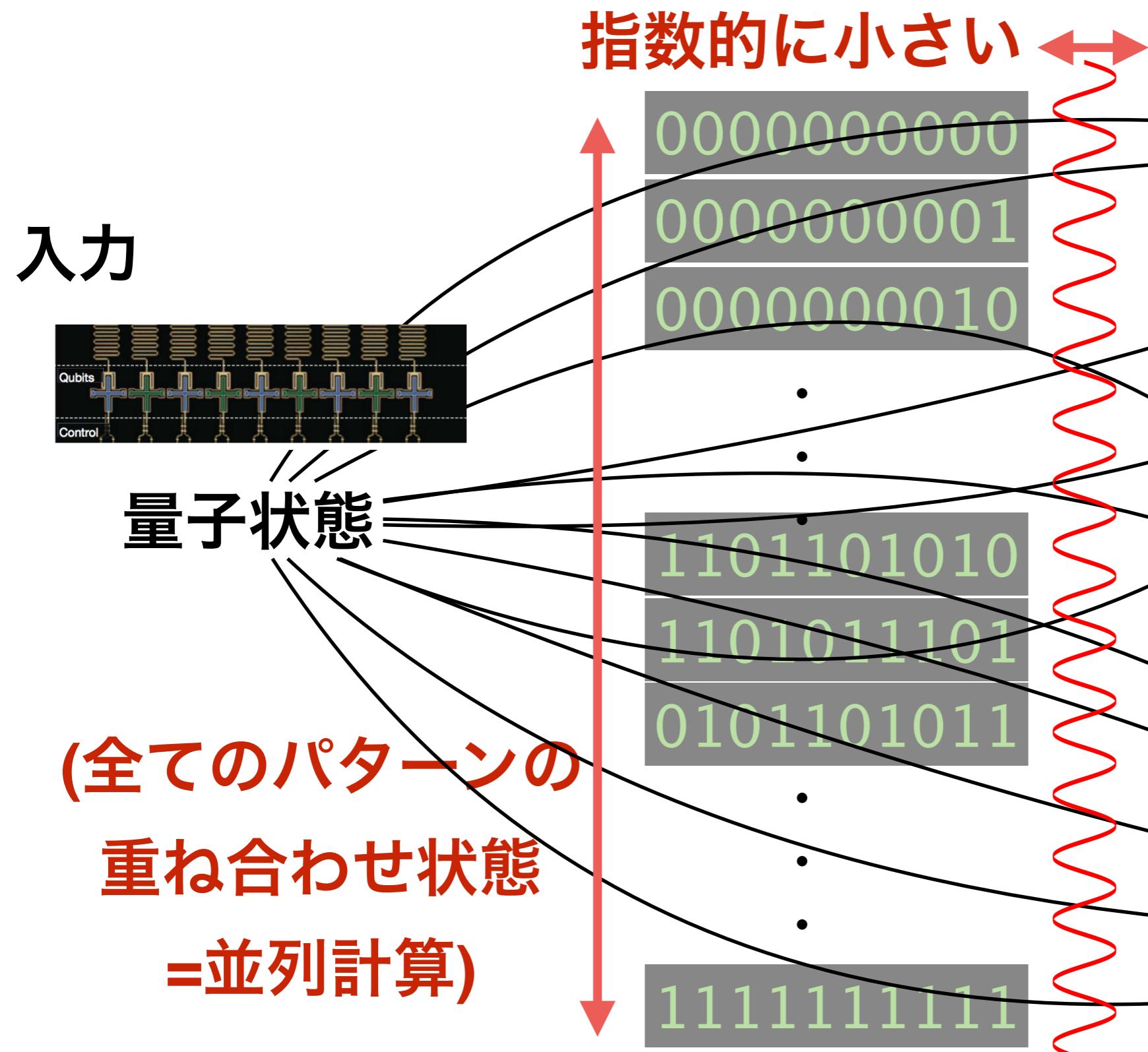
Kelly et al., Nature 519, 66 (2015)



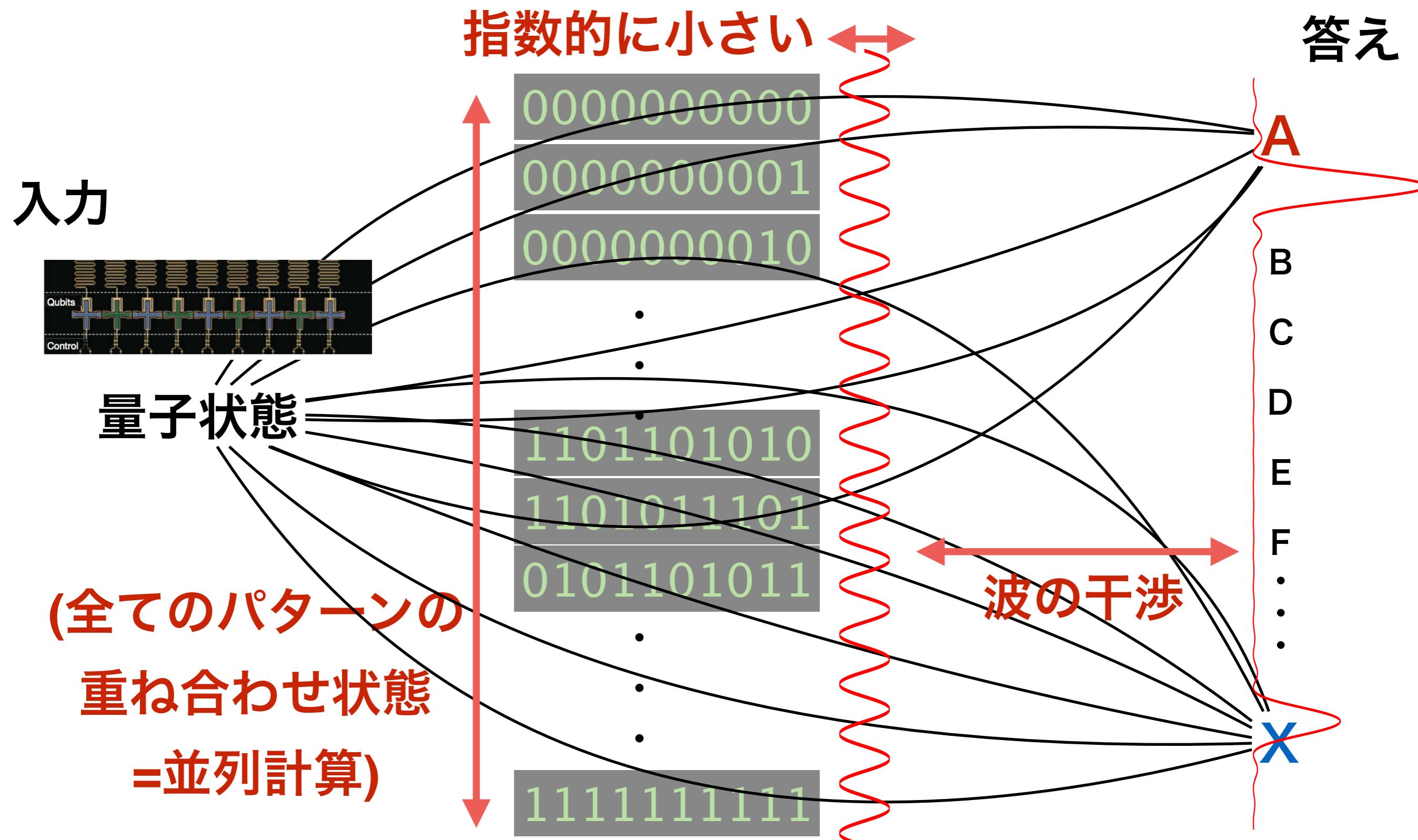
ありとあらゆる組み合わせ 2^N パターンの重ね合わせ

- ・指数的に多くのパターンの重ね合わせ
- ・波(複素確率)の干渉(強め合い)による確率の増幅

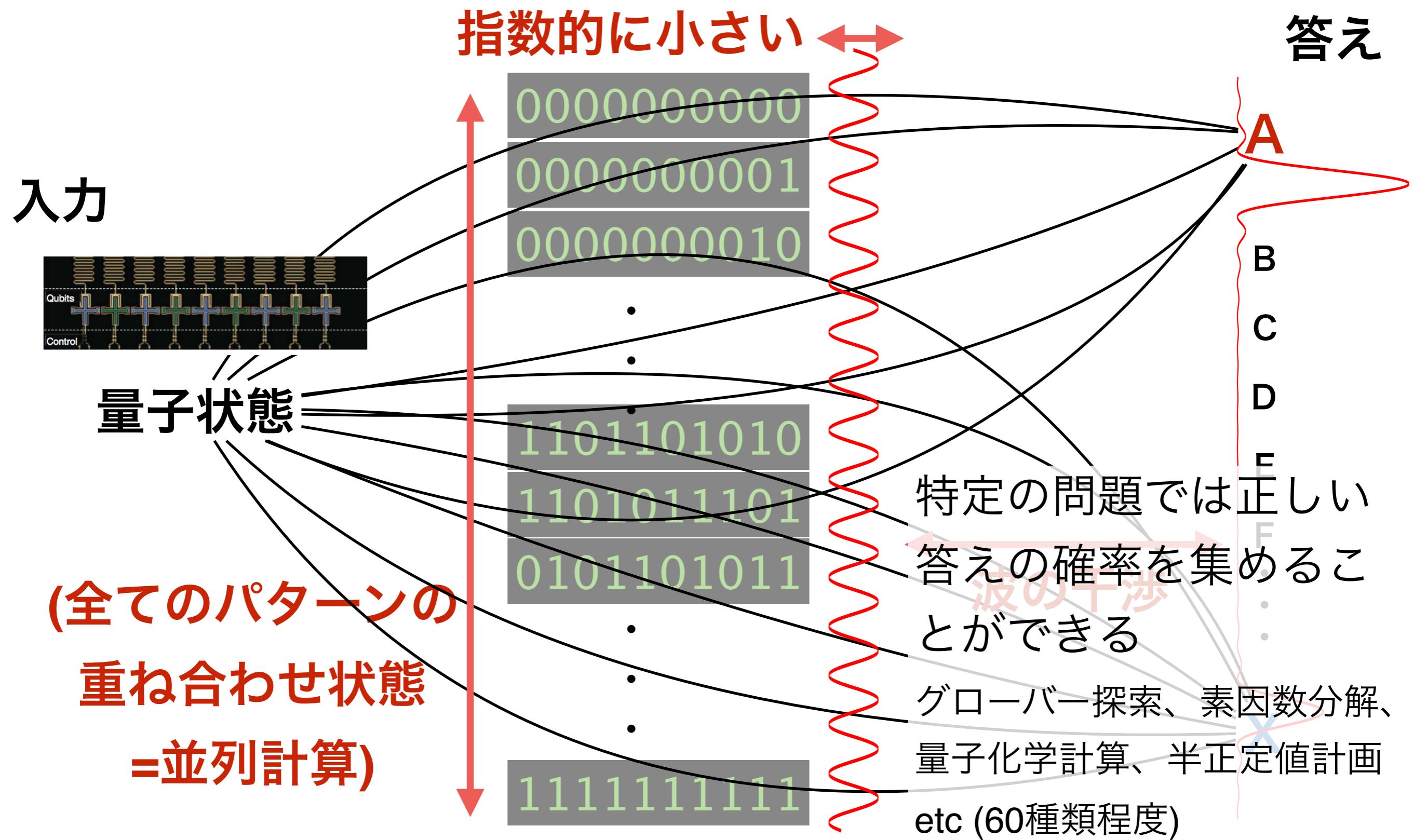
量子コンピュータの高速性



量子コンピュータの高速性



量子コンピュータの高速性

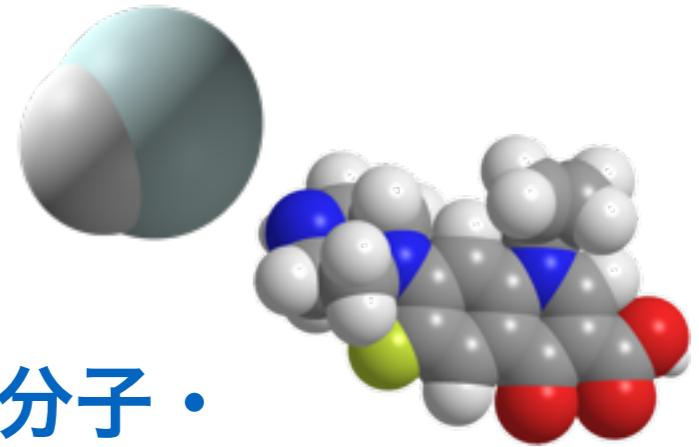


量子コンピュータが得意な問題

- 問題がそもそも量子に関係するもの。

物質系のシミュレーション・量子化学計算

→ 量子加速が明確。応用先は量子化学計算・分子・材料設計。

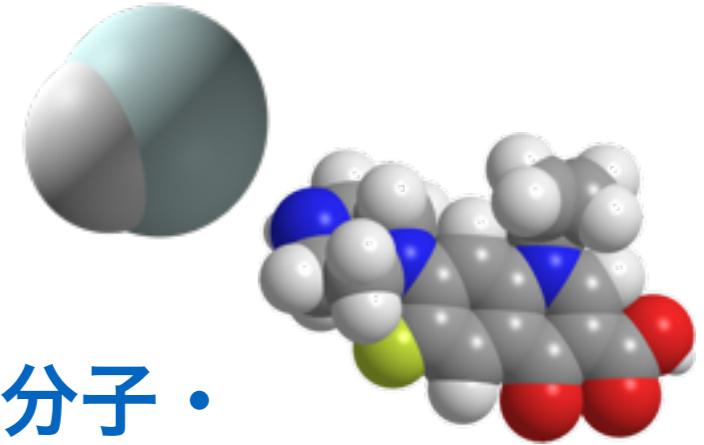


量子コンピュータが得意な問題

- 問題がそもそも量子に関係するもの.

物質系のシミュレーション・量子化学計算

→ 量子加速が明確. 応用先は量子化学計算・分子・材料設計.



- 量子とは関係ないけど都合のよい構造があるもの.

素因数分解・PCA・SVM・Clustering・
(スパース、特殊なデータ構造)

レコメンダシステム(Amazon, Netflix)

→ 量子力学の線型代数構造(ベクトルと行列)を
うまく利用して巨大行列の固有値・特異値を
求める.



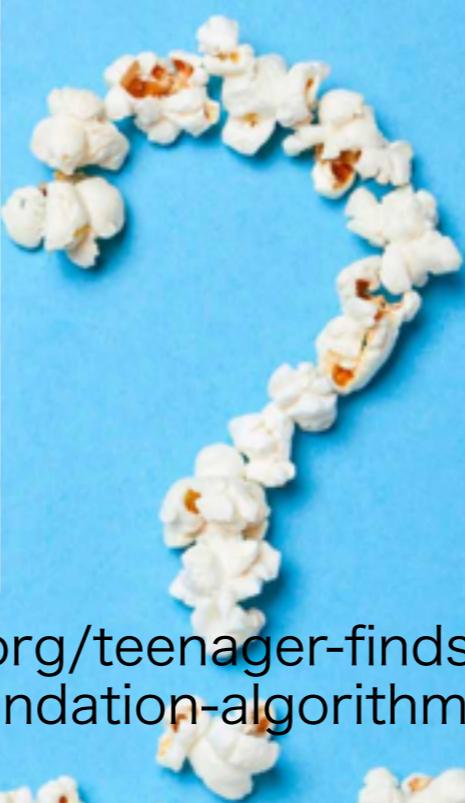
量子コンピュータが得意な問題

QUANTUM COMPUTING

Major Quantum Computing Advance Made Obsolete by Teenager

48 | □

18-year-old Ewin Tang has proven that classical computers can solve the “recommendation problem” nearly as fast as quantum computers. The result eliminates one of the best examples of quantum speedup.



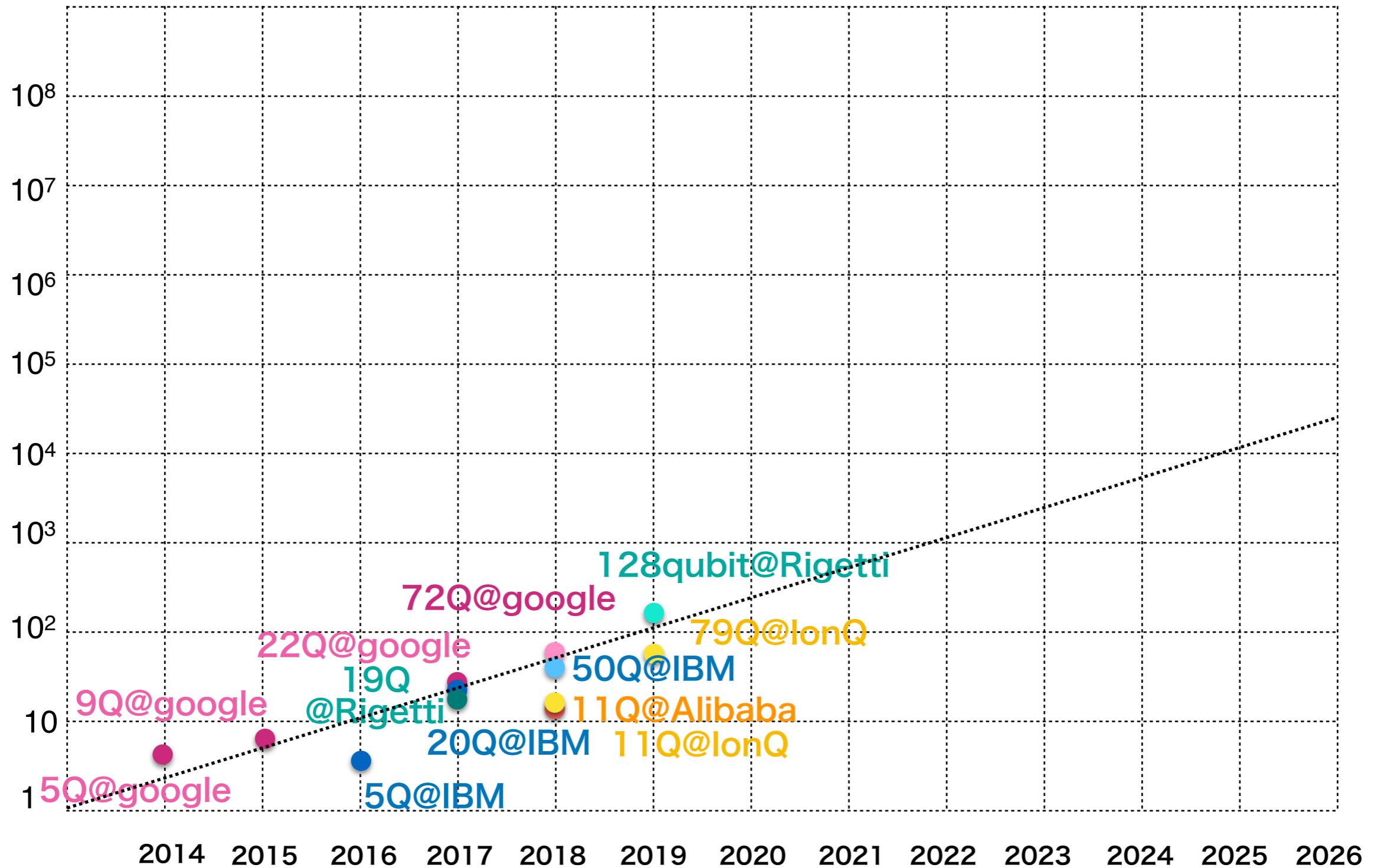
量子アルゴリズムは
従来アルゴリズムを
考え方直す新たな視点

<https://www.quantamagazine.org/teenager-finds-classical-alternative-to-quantum-recommendation-algorithm-20180731/>

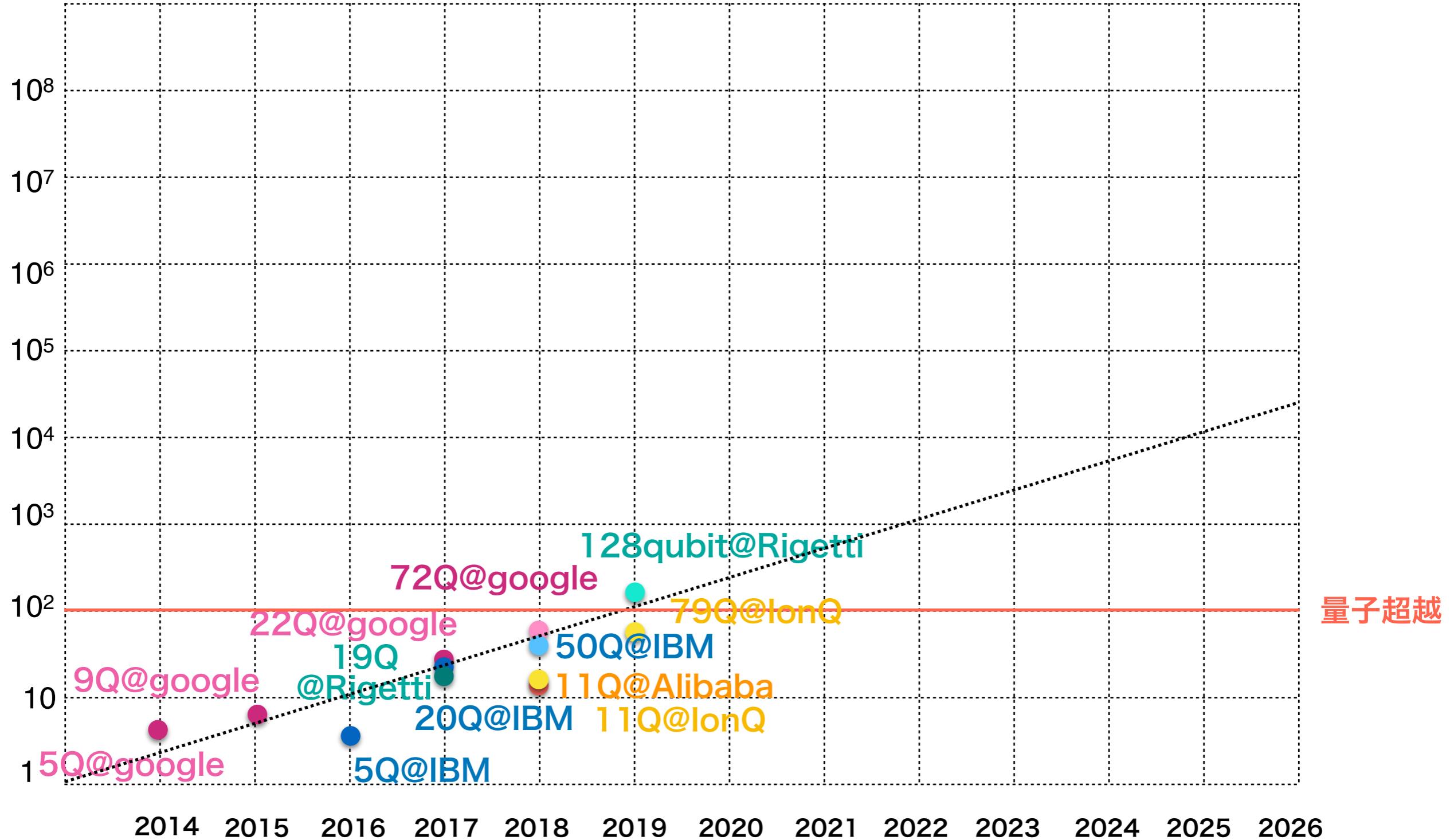
目次

- 量子コンピュータの歴史
- 量子とは？ 量子コンピュータの仕組み
- NISQ時代
- 最近の研究から(量子機械学習・量子化学)

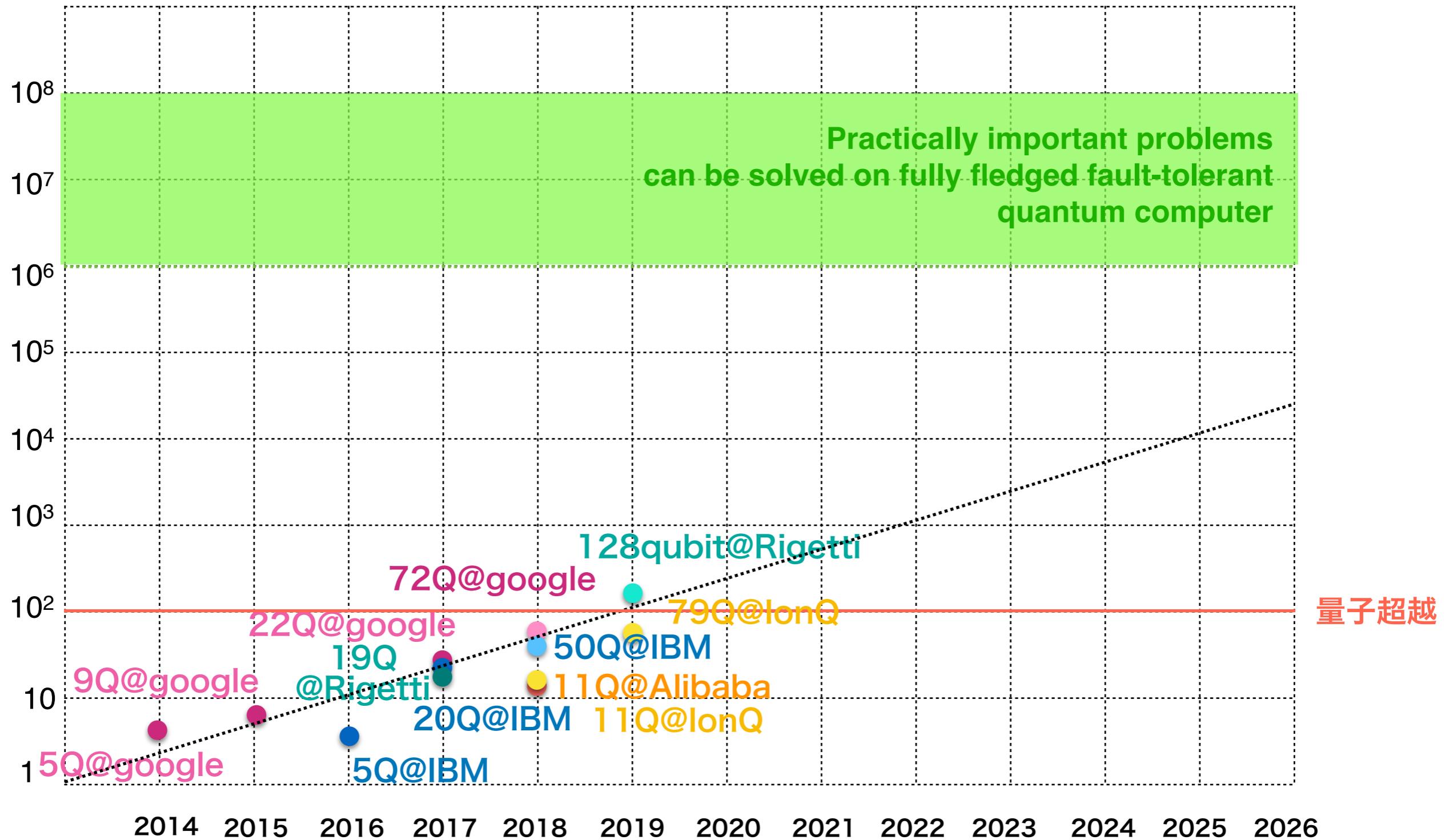
“量子版”ムーアの法則?



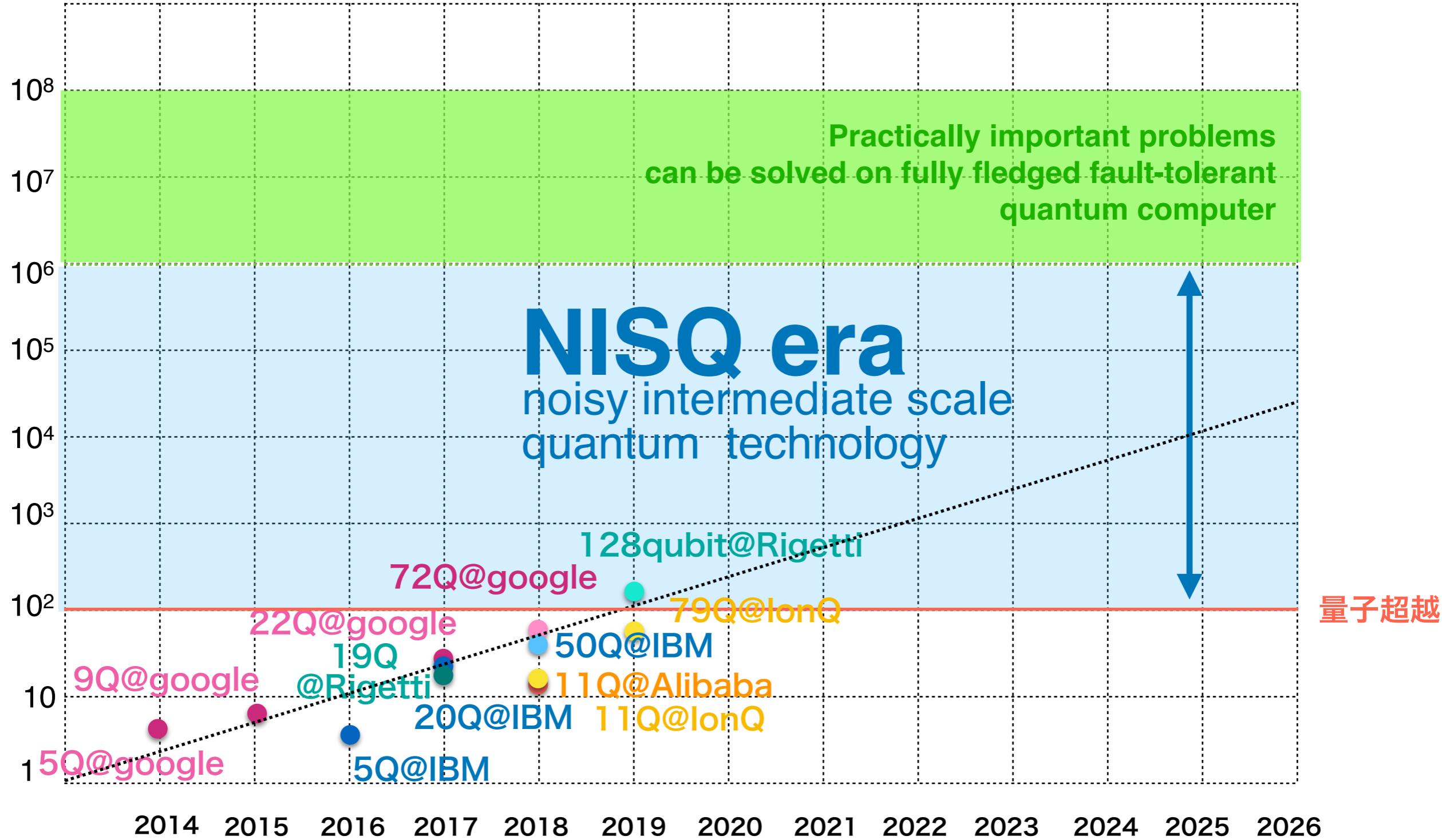
“量子版”ムーアの法則?



“量子版”ムーアの法則?



“量子版”ムーアの法則?



“量子版”ムーアの法則?

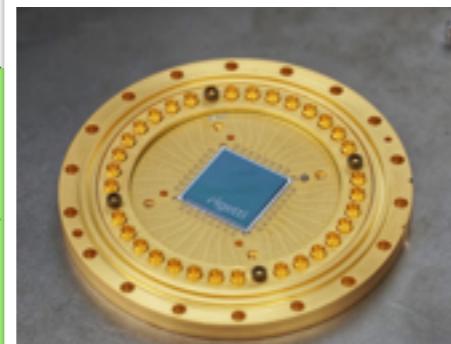
Google



gemon18Q
1Q:99.9% 2Q:99.2% M:97%

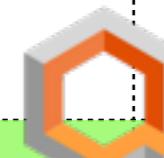
bristolcone 72Q
1Q 99.9%

rigetti



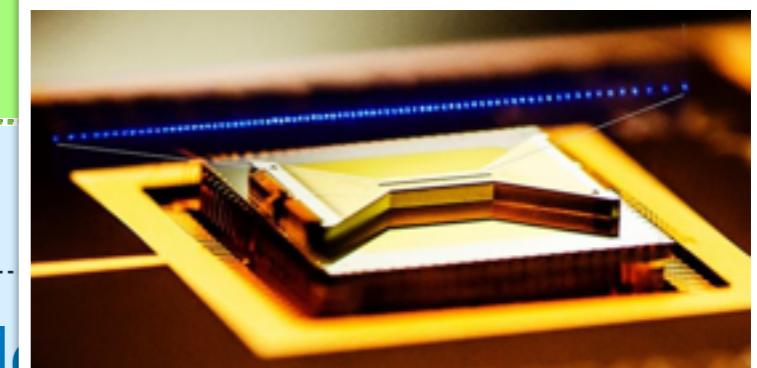
NISQ era
noisy intermediate scale quantum technology

Practically
solved on fully fi



ION Q

IonQ 79Q (11Q)
1Q:99.9% 2Q:98%



10³

10²

1

2014 2015 2016 2017 2018 2019 2020 2021 2022

9Q@google

5Q@google

22Q@google

19Q @Rigetti

5Q@IBM

72Q@google

20Q@IBM

11Q@Alibaba

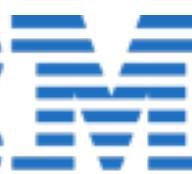
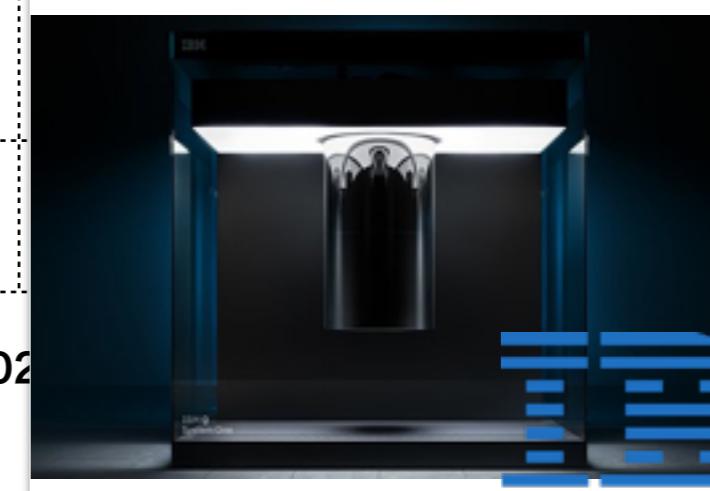
128qubit@Rigetti

50Q@IBM

11Q@IonQ

IBMQ SystemOne 20Q
1Q 99.9, 2Q 98%

量子超越



NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill)
<https://arxiv.org/abs/1801.00862>

NISQ “*Noisy Intermediate-scale Quantum technology*”

50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか？

John Preskill (Caltech)
<https://www.q2b.us/>

NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill)
<https://arxiv.org/abs/1801.00862>

NISQ “*Noisy Intermediate-scale Quantum technology*”

50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか？

John Preskill (Caltech)
<https://www.q2b.us/>

- ・量子による計算の加速という現象の実証
→量子超越(quantum comp. supremacy)
- ・大規模化への接続（量子誤り訂正の実証）
- ・NISQマシンの利用（変分量子回路：最適化、量子シミュレーション、量子化学計算、機械学習）

NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill)
<https://arxiv.org/abs/1801.00862>

NISQ “*Noisy Intermediate-scale Quantum technology*”

50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか？

John Preskill (Caltech)
<https://www.q2b.us/>

- 量子による計算の加速という現象の実証
→量子超越(quantum comp. supremacy)
- 大規模化への接続（量子誤り訂正の実証）
- NISQマシンの利用（変分量子回路：最適化、量子シミュレーション、量子化学計算、機械学習）

複数の量子ビットがあったとき

8bit = 1byte

5量子ビット $2^5=32$: $32*64*2/8=512$ byte

10量子ビット $2^{10}=1024$: $1024*64*2/8=16$ Kbyte

20量子ビット $2^{20}=10^6$: $10^6*64*2/8=16$ Mbyte

30量子ビット $2^{30}=10^6$: $10^9*64*2/8=16$ Gbyte

1ノードのメモリの限界

40量子ビット $2^{40}=10^6$: $10^{12}*64*2/8=16$ Tera byte

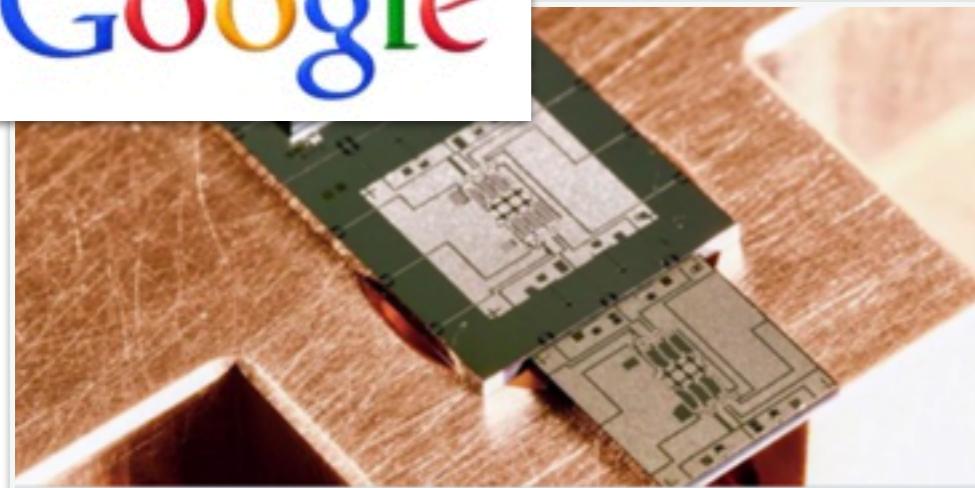
50量子ビット $2^{50}=10^6$: $10^{15}*64*2/8=16$ Peta byte

京コンピュータのメモリ総容量：1.26PB

たった50個の量子ビットの量子コンピュータでも京コンピュータ(スパコン)をもってしてもシミュレーションが厳しくなる

量子コンピュータ v.s. 従来コンピュータ

Google



Googleが49個の量子ビット(Qubit)を持つ量子コンピュータを2017年内に実演する。
現在、実用化されている古典的なコンピュータを凌駕する性能が期待される「量子コンピュータ」を開発中のGoogleは、2017年内にQubit(量子ビット)数が49のチップ...
gigazine.net

<http://gigazine.net/news/20170612-google-49-qubit-quantum-computing/>

2017.5. Googleが
49量子ビットを実演しスパコンを超えることを予言。

Intelligent Machines

IBM Raises the Bar with a 50-Qubit Quantum Computer



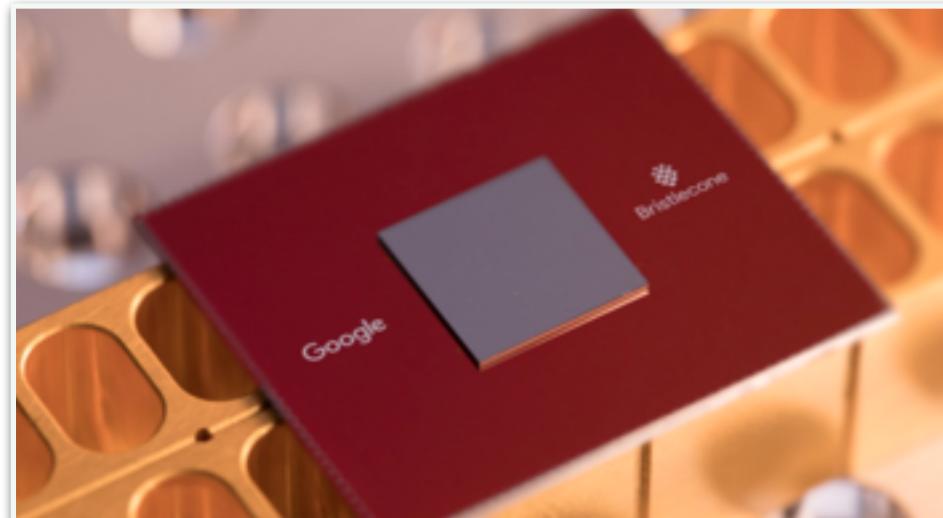
Researchers have built the most sophisticated quantum computer yet, signaling progress toward a powerful new way of processing information.

by Will Knight November 10, 2017

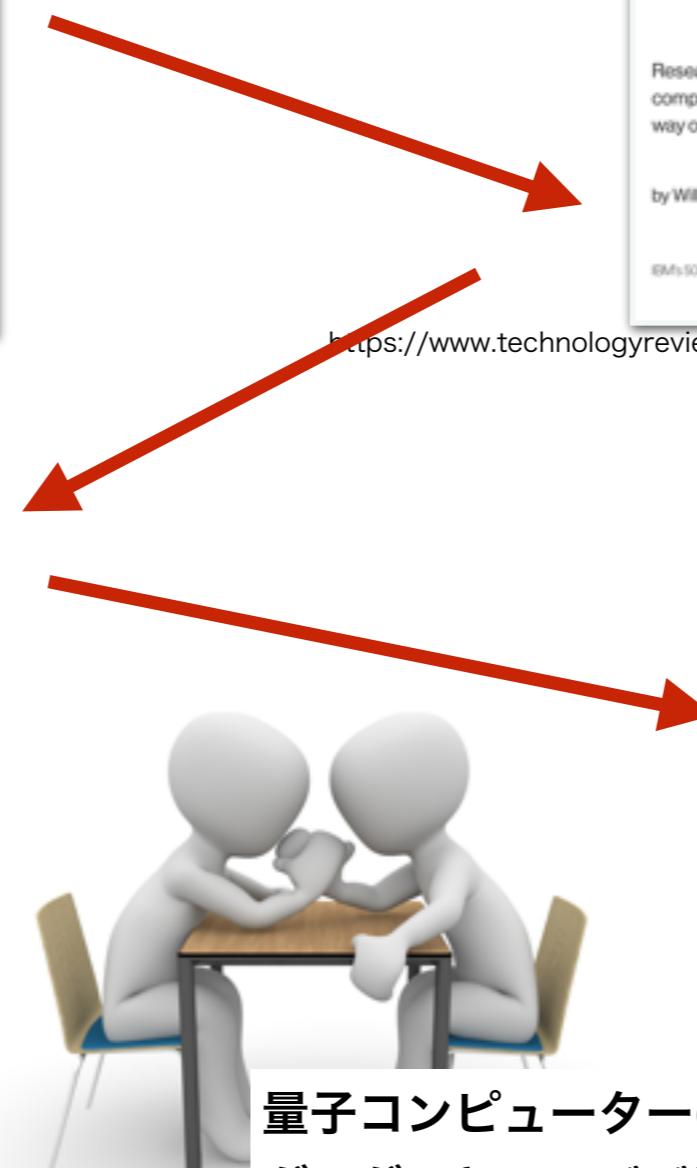
IBM's 50-qubit machine



2017.11. IBMがハードルを上げる。



2018.3 72量子ビットを目指す



量子コンピューターの「米中競争」が過熱——競り合う
グーグルとアリババは、量子超越性を達成できるか



<https://www.technologyreview.com/s/610274/google-thinks-its-close-to-quantum-supremacy-heres-what-that-really-means/>

<https://wired.jp/2018/06/05/google-alibaba-quantum-supremacy/>

NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill)
<https://arxiv.org/abs/1801.00862>

NISQ “*Noisy Intermediate-scale Quantum technology*”

50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか？

John Preskill (Caltech)
<https://www.q2b.us/>

- ・量子による計算の加速という現象の実証
→量子超越(quantum comp. supremacy)
- ・大規模化への接続（量子誤り訂正の実証）
- ・NISQマシンの利用（変分量子回路：最適化、量子シミュレーション、量子化学計算、機械学習）

NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill)
<https://arxiv.org/abs/1801.00862>

NISQ “*Noisy Intermediate-scale Quantum technology*”

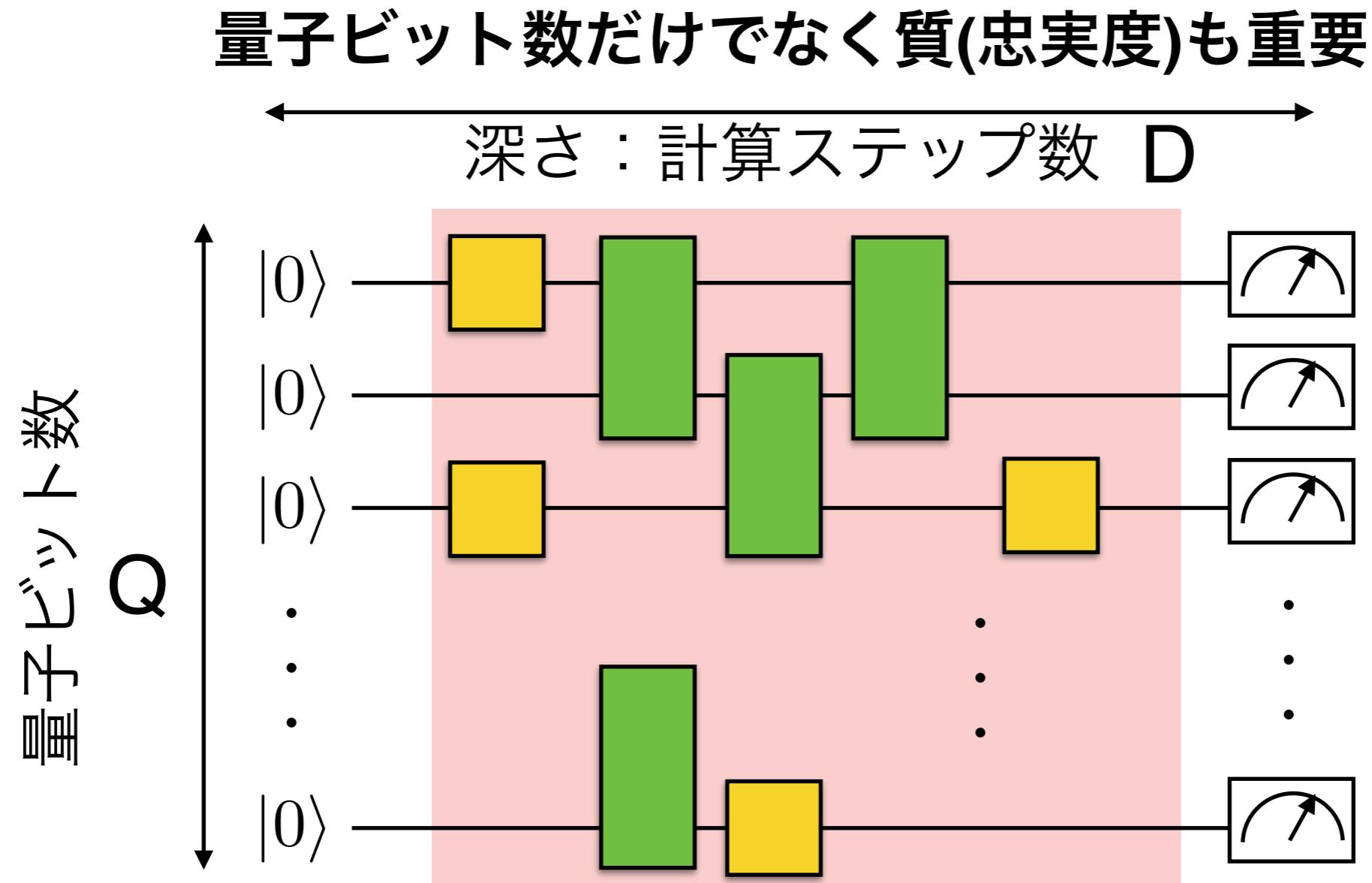
50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか？

John Preskill (Caltech)
<https://www.q2b.us/>

- ・量子による計算の加速という現象の実証
→量子超越(quantum comp. supremacy)
- ・大規模化への接続（量子誤り訂正の実証）
- ・NISQマシンの利用（変分量子回路：最適化、量子シミュレーション、量子化学計算、機械学習）

NISQ領域=ノイズとの戦い



(忠実度)^(QD)=全体の忠実度

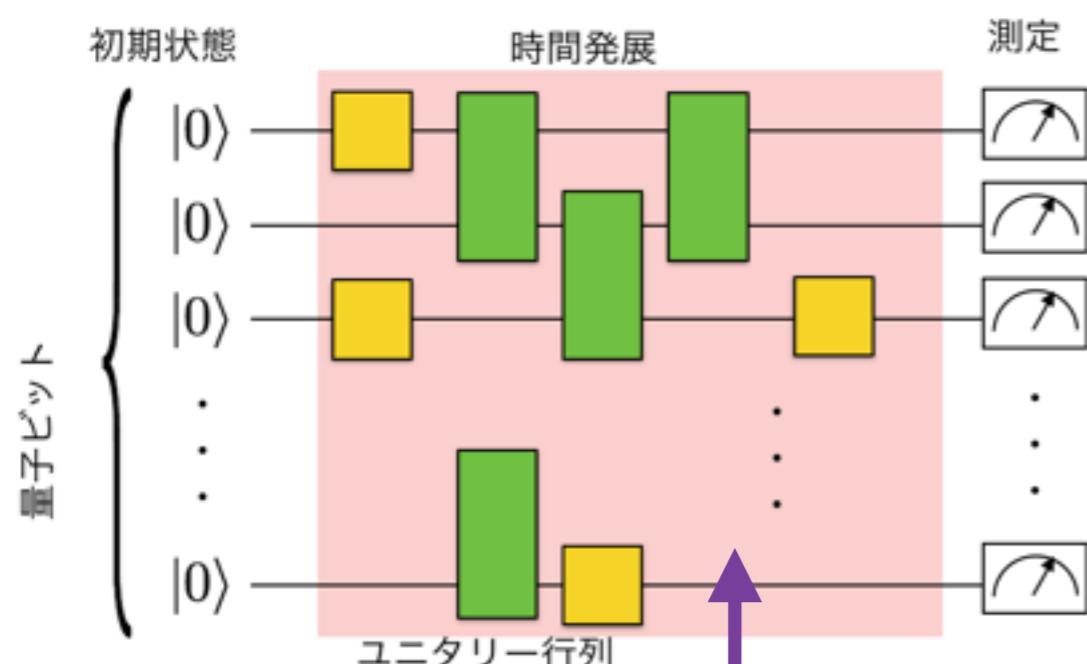
$$(0.999)^{(50\text{qubit} \times 20\text{depth})} = 0.368$$

アナログエラー
を抑え込む必要あり
(究極的には誤り訂正が必要)

量子古典ハイブリッドアルゴリズム

量子コンピュータ

量子にしかできないタスク

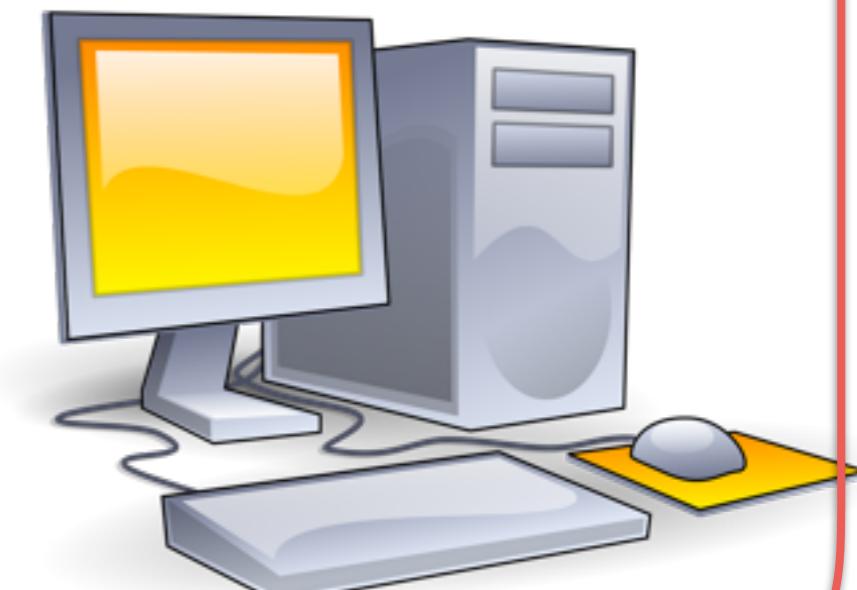


用途

古典コンピュータ

古典でもできるタスク

期待値

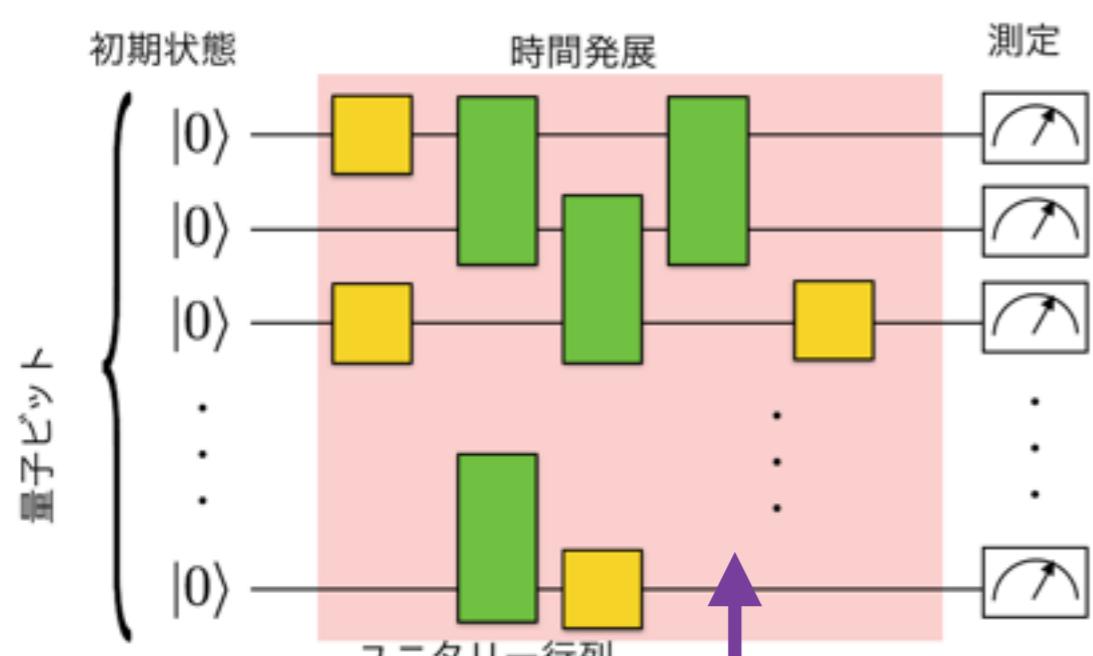


パラメータの更新

量子古典ハイブリッドアルゴリズム

量子コンピュータ

量子にしかできないタスク



古典コンピュータ

古典でもできるタスク



期待値

パラメータの更新

用途

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).

機械学習：QCL (quantum circuit learning)

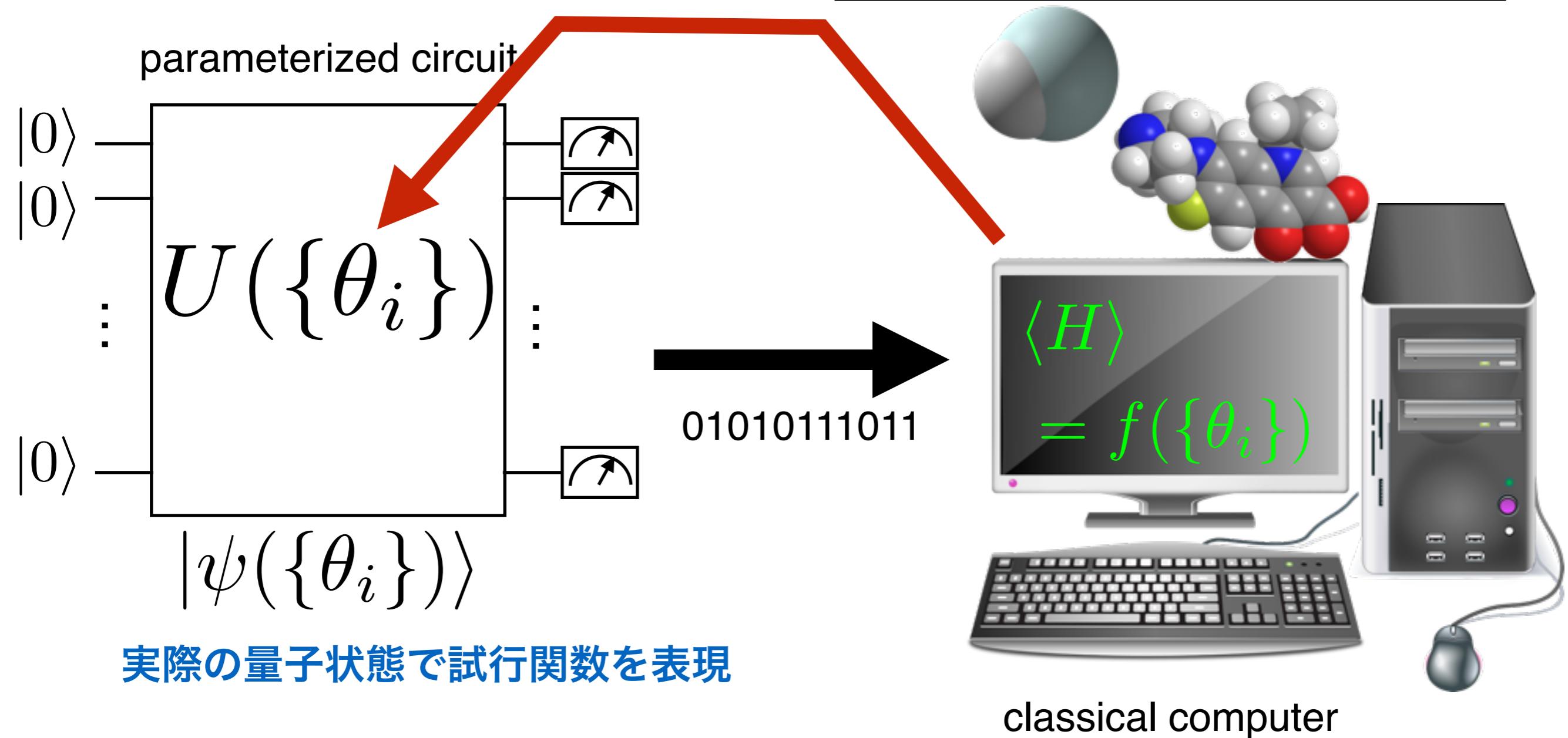
- K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)

量子古典ハイブリッドアルゴリズム

Variational Quantum Eigensolver, Peruzzo Jarrod et al Nature Comm. '14

エネルギーが最小に
なるようにパラメータを更新
(e.g. Nelder-Mead etc)

Gradient-based optimization:
Mitarai-Negoro-Kitagawa-KF PRA '18
Sequential minimal optimization:
Nakanishi-KF-Todo arXiv:1903.12166



目次

- 量子コンピュータの歴史
- 量子とは？ 量子コンピュータの仕組み
- NISQ時代
- 最近の研究から(量子機械学習・量子化学)

最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

“Quantum Circuit Learning”,
K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)

- ・変分量子回路を用いた教師あり学習
- ・テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換

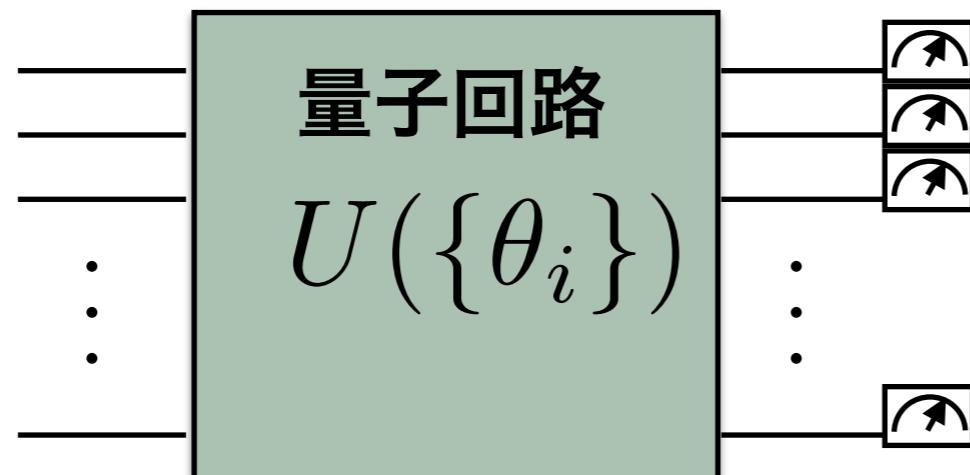
最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

“Quantum Circuit Learning”,

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

- ・変分量子回路を用いた教師あり学習
- ・テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



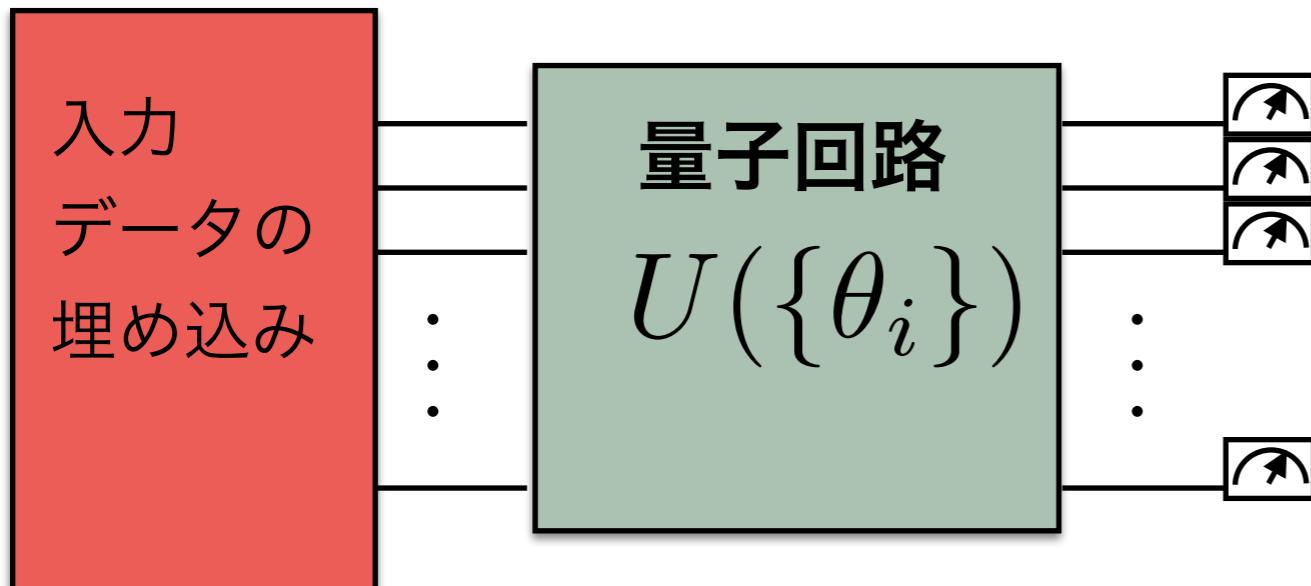
最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

“Quantum Circuit Learning”,

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

- ・変分量子回路を用いた教師あり学習
- ・テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



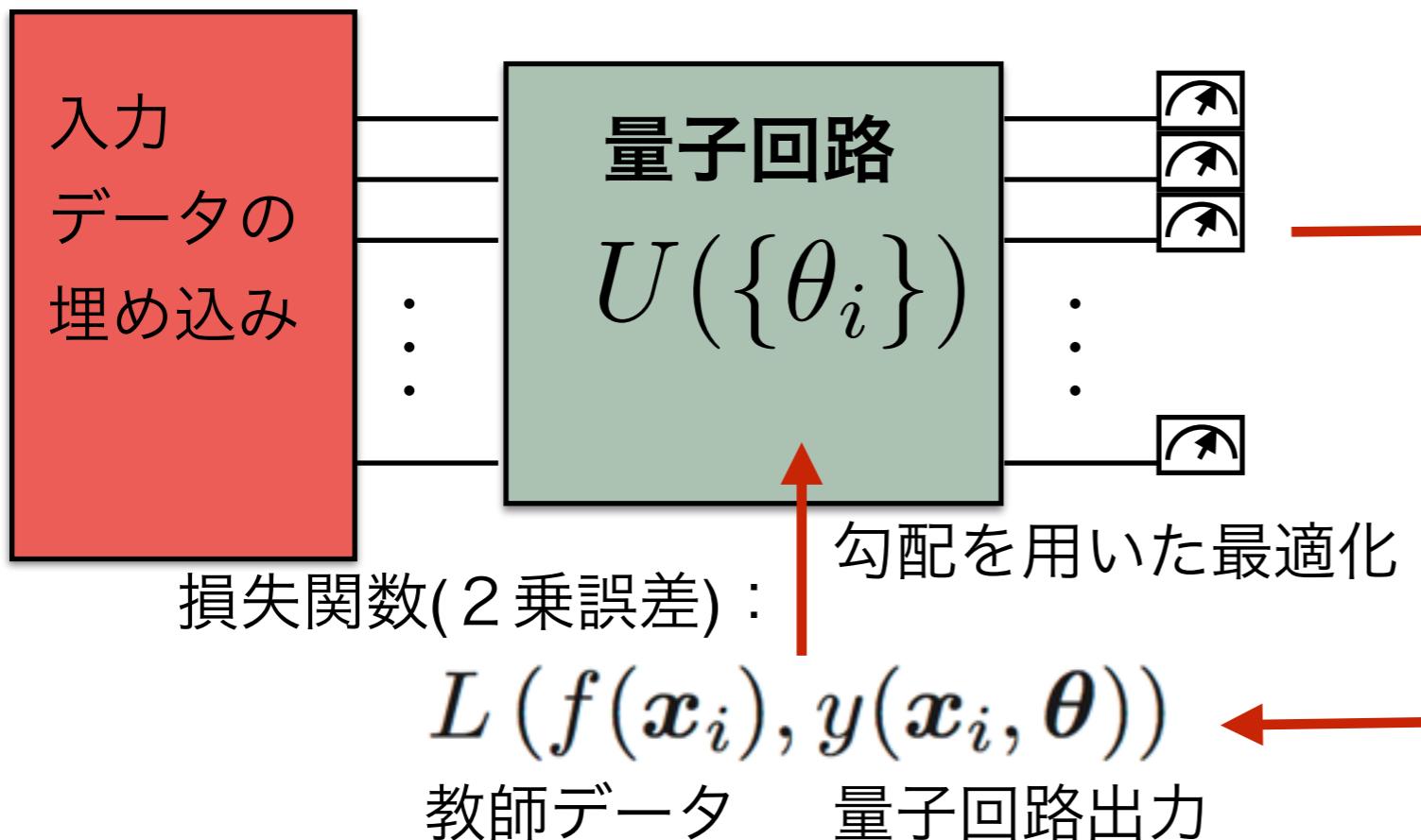
最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

“Quantum Circuit Learning”,

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

- ・変分量子回路を用いた教師あり学習
- ・テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



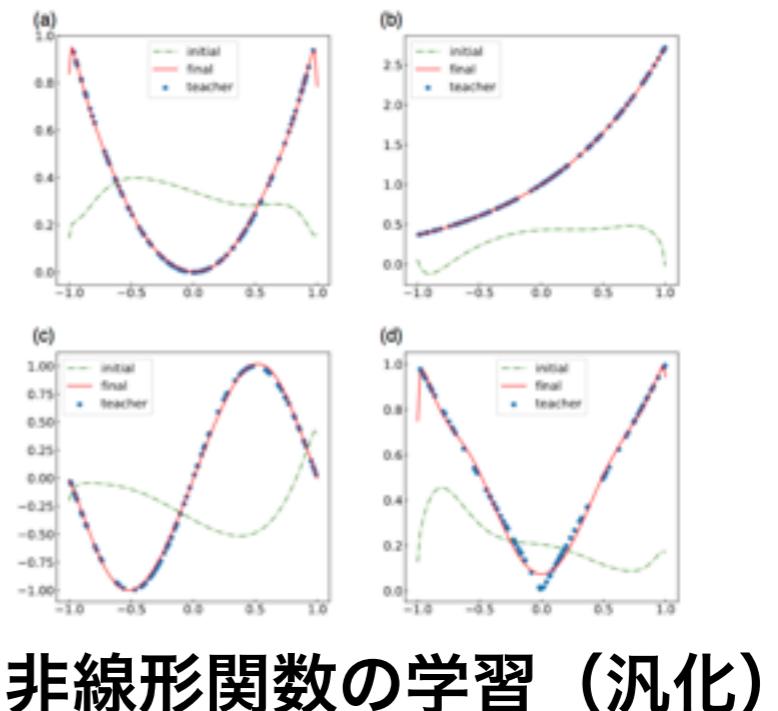
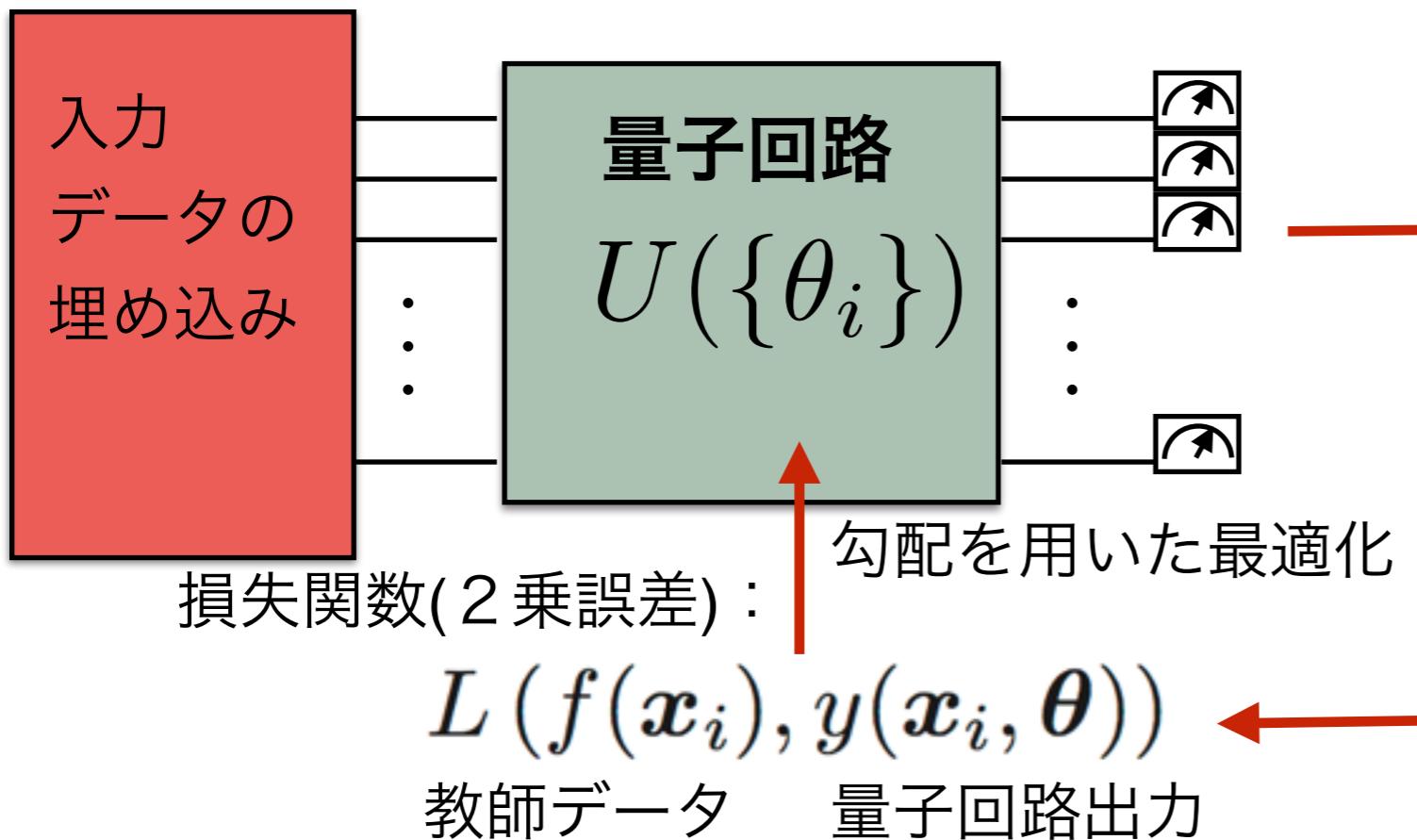
最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

“Quantum Circuit Learning”,

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

- 変分量子回路を用いた教師あり学習
- テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



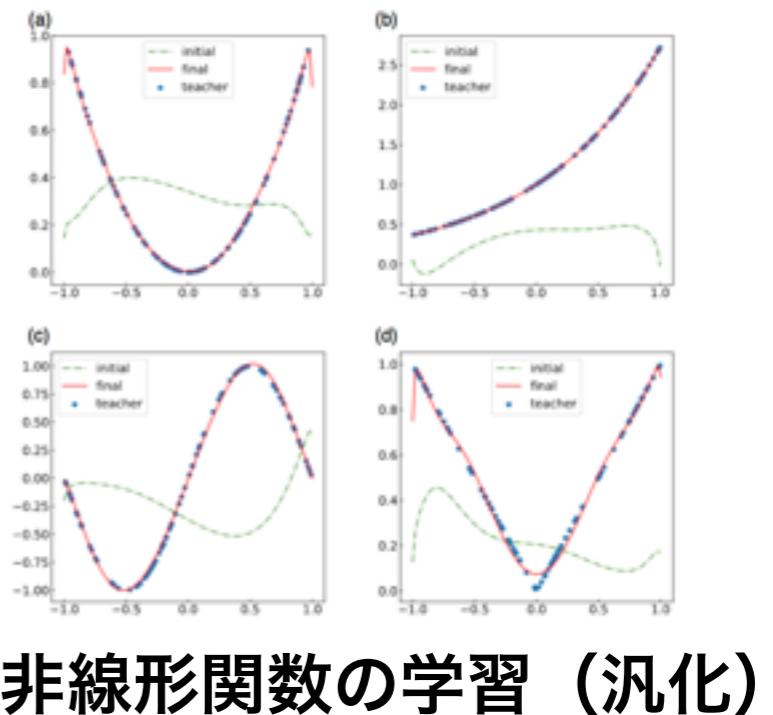
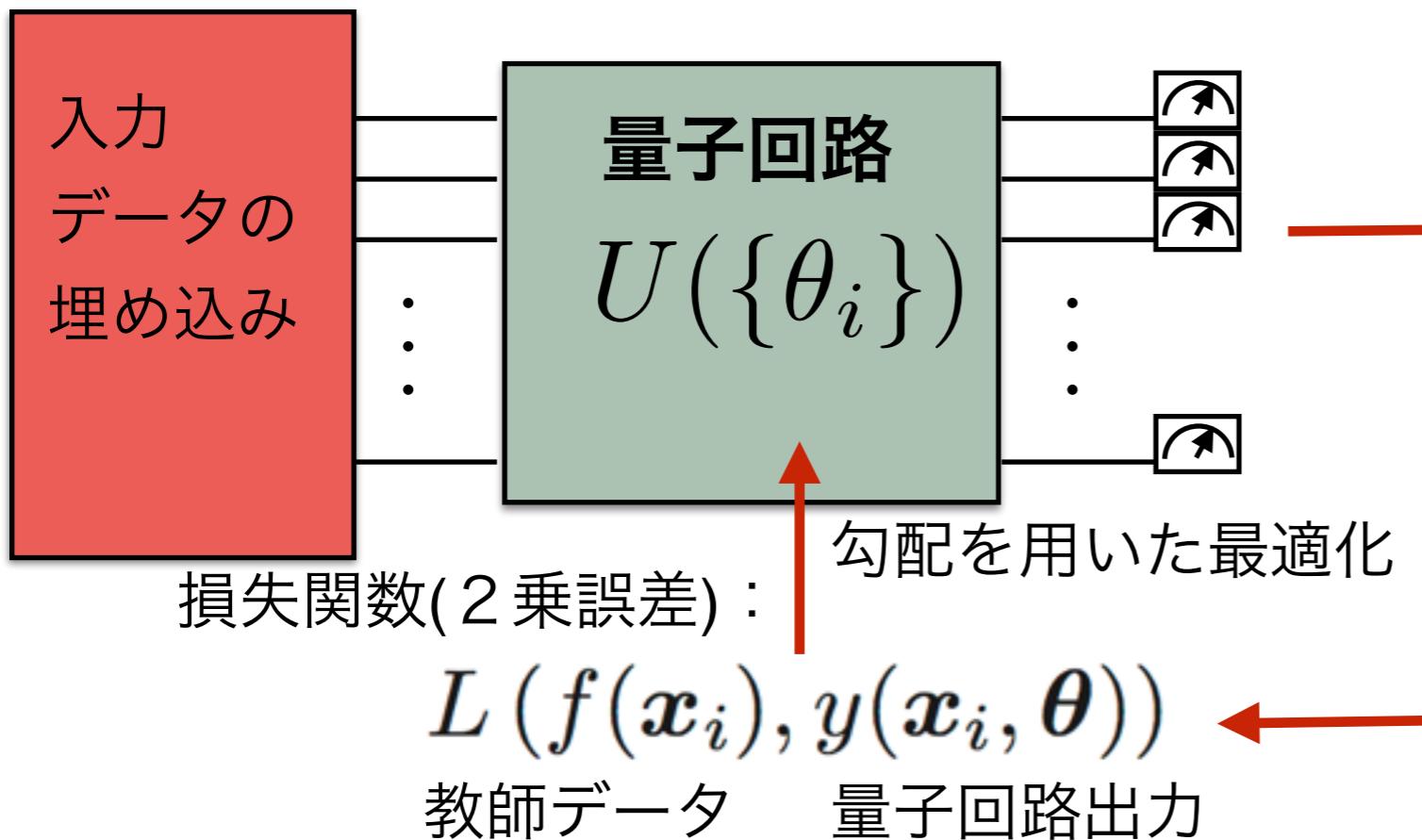
最近の研究から:量子回路学習

問題点 : 機械学習など重要な問題へのアプリ
: 小規模な量子コンピュータでも動くアルゴリズム

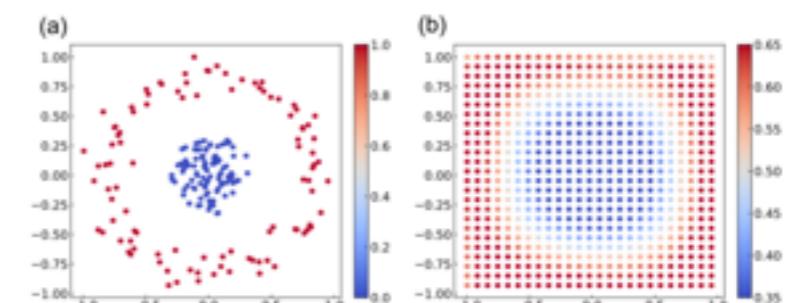
“Quantum Circuit Learning”,

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

- 変分量子回路を用いた教師あり学習
- テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



非線形関数の学習 (汎化)



2値分類問題の学習

最近の研究から・量子回路学習

LETTER

nature
International journal of science

<https://doi.org/10.1038/s41586-019-0980-2>

Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces

Vojtěch Havlíček^{1,2}, Antonio D. Córcoles^{1*}, Kristan Temme^{1*}, Aram W. Harrow³, Abhinav Kandala¹, Jerry M. Chow¹ & Jay M. Gambetta¹

Machine learning and quantum computing are two technologies that each have the potential to alter how computation is performed to address previously untenable problems. Kernel methods for machine learning are ubiquitous in pattern recognition, with support vector machines (SVMs) being the best known method for classification problems. However, there are limitations to the successful solution to such classification problems when the feature space becomes large, and the kernel functions become computationally expensive to estimate. A core element in the computational speed-ups enabled by quantum algorithms is the exploitation of an exponentially large quantum state space through controllable entanglement and interference. Here we propose and experimentally implement two quantum algorithms on a superconducting processor. A key component in both methods is the use of the quantum state space as feature space. The use of a quantum-enhanced feature space that is only efficiently accessible on a quantum computer provides a possible path to quantum advantage. The algorithms solve a problem of supervised learning: the construction of a classifier. One method, the quantum variational classifier, uses a variational quantum circuit^{1,2} to classify the data in a way similar to the method of conventional SVMs. The other method, a quantum kernel estimator, estimates the kernel function on the quantum computer and optimizes a classical SVM. The two methods provide tools for exploring the applications of early intermediate-scale quantum computers³ to machine learning.

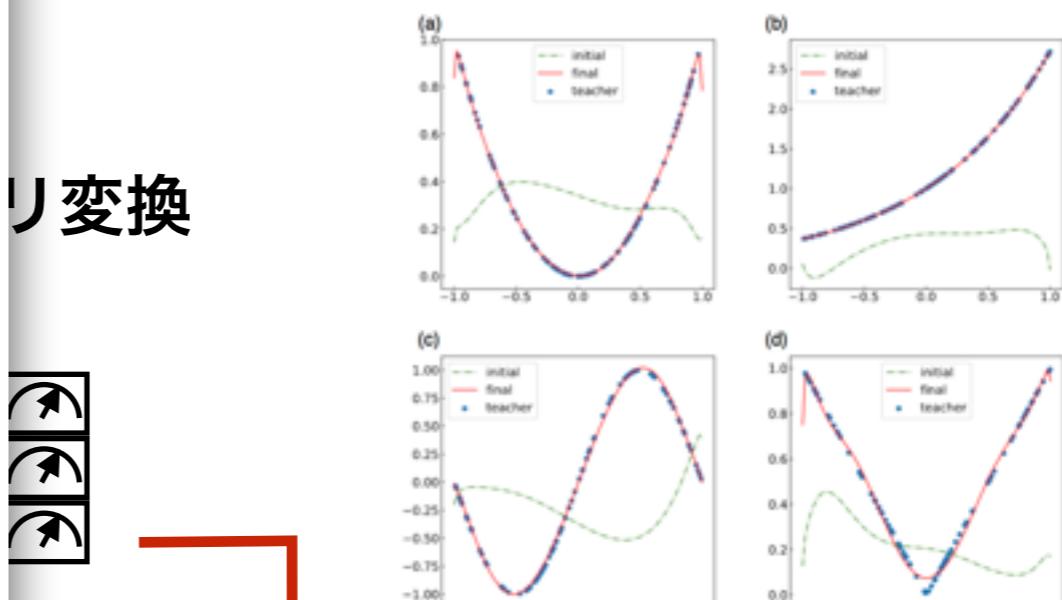
The intersection between machine learning and quantum computing has attracted considerable attention in recent years^{4–6}. This has led to a number of recently proposed quantum algorithms^{1,2,7–9}. Here we present two quantum algorithms that have the potential to run on near-term quantum devices. A suitable class of algorithms for such devices employs short-depth circuits, because they are amenable to

space. The data is mapped non-linearly to a quantum state $\Phi: x \in \Omega \rightarrow |\Phi(x)\rangle\langle\Phi(x)|$; see Fig. 1a. In the first approach we use a variational circuit as given in refs^{1,2,16,17} followed by a binary measurement. Any binary measurement that classifies the data based on the probability of observing one outcome over the other implements a separating hyperplane in state space. Like an SVM, this approach constructs a linear decision function in feature space. The second approach builds on this observation and constructs the hyperplane using a classical SVM, only using the quantum computer to estimate the kernel function. This second approach inherits the performance guarantees from the classical SVM. We implement both classifiers on a superconducting quantum processor with five coupled superconducting transmons, only two of which are used in this work, as shown in Fig. 2a. In the experiment, we want to separate the question of whether the classifier can be implemented in hardware from the problem of choosing a suitable feature map for a practical dataset. The data that are classified here are chosen so that they can be classified with 100% success to verify the method. We experimentally demonstrate that this success ratio is achieved.

Training and classification with conventional SVMs is efficient when inner products between feature vectors can be evaluated efficiently^{14,18,19}. Classifiers based on quantum circuits, such as the one presented in Fig. 2c, cannot provide a quantum advantage over a conventional SVM if the feature vector kernel $K(x, z) = |\langle\Phi(x)|\Phi(z)\rangle|^2$ can be computed efficiently on a classical computer. For example, a classifier that uses a feature map that generates only product states can be evaluated in time $\mathcal{O}(n)$ for n qubits. To obtain an advantage over classical approaches we need to implement a map based on circuits that are hard to simulate classically. Since quantum computers are not expected to be classically simulable, there exists a long list of (universal) circuit families we can choose from. Here we use a circuit that works

のアプリ
アでも動くアルゴリズム

Fujii Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)



リ変換

1. Mitarai, K., Negoro, M., Kitagawa, M. & Fujii, K. Quantum circuit learning. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1803.00745> (2018).

1年足らずで33件の引用

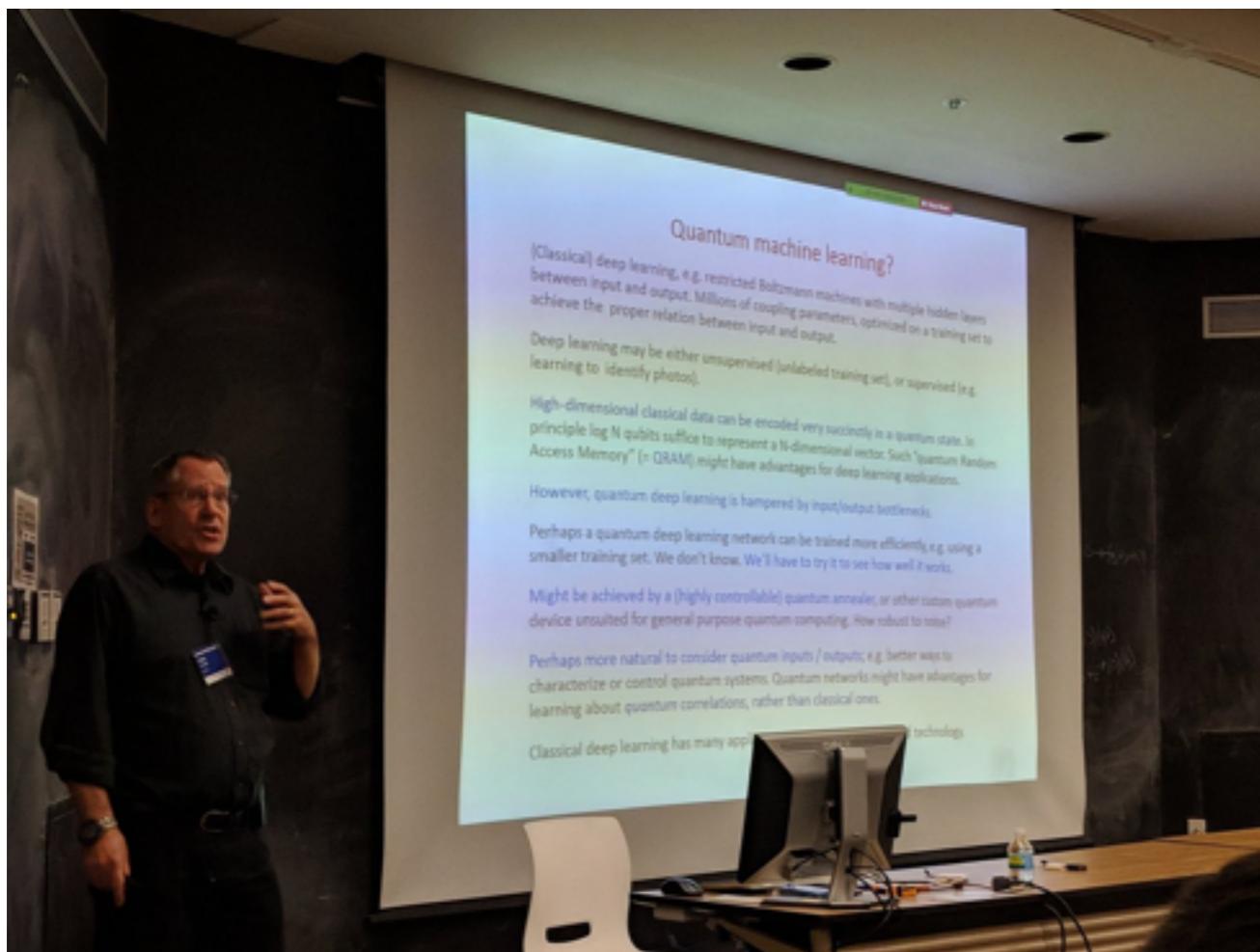
(IBM, Rigetti, Xanadu, 本源量子, QxBranch, Zapata 含む)

provided classically and use the quantum state space as feature space. Supplementary Information for a discussion.

IBM T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY, USA. ²Department of Computer Science, University of Oxford, Wolfson Building, Parks Road, Oxford, UK. ³Center for Theoretical Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, USA. *e-mail: adcoroles@us.ibm.com; kptemme@ibm.com

Where does quantum machine learning have the most advantage?

Preskill: "Perhaps the most natural use case for quantum machine learning is to learn patterns in quantum data."



→ **Quantum chemistry**

NSQHEP Sep 2018

<https://twitter.com/quantumVerd/status/1040693705026531329>

Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz

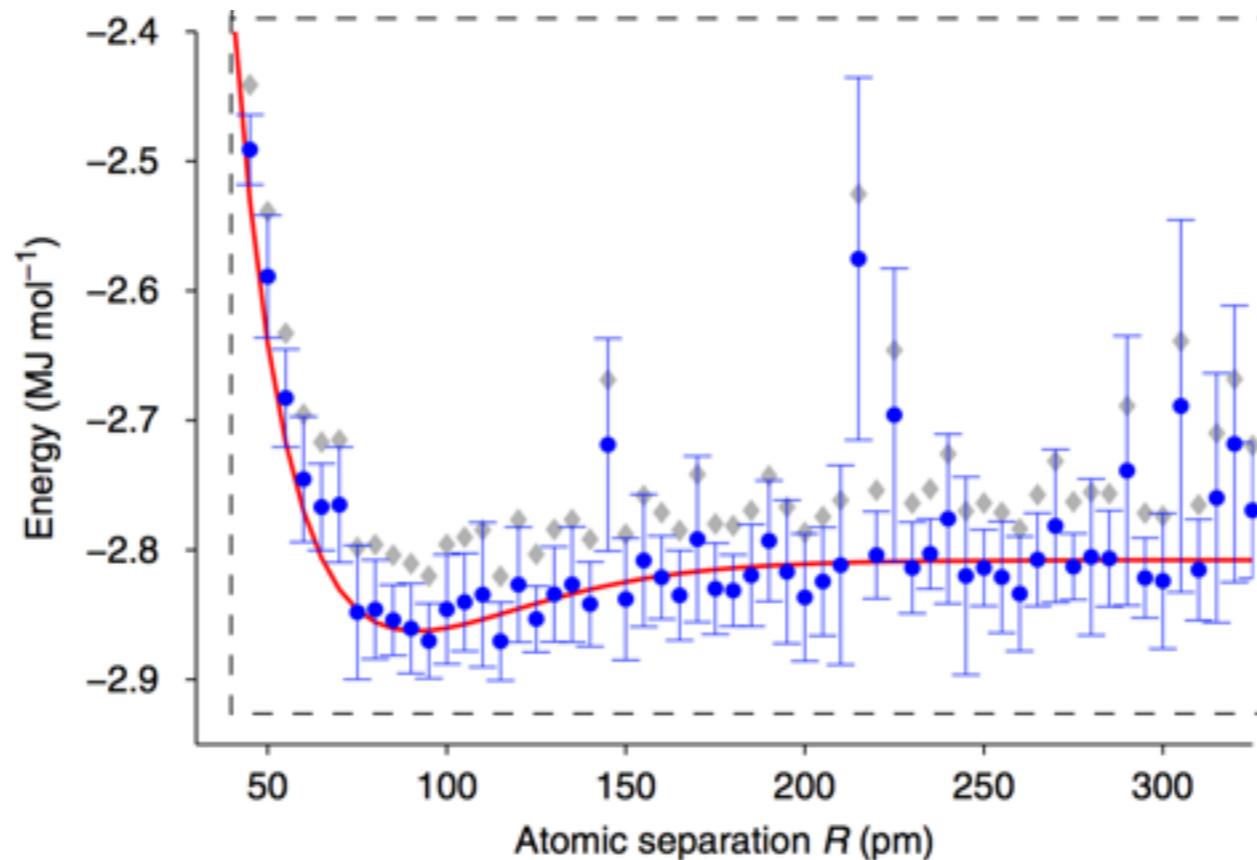
Kosuke Mitarai, Tennin Yan, Keisuke Fujii, arXiv:1810.04482, to be appeared in Phys Rev Applied

Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz

Kosuke Mitarai, Tennin Yan, Keisuke Fujii, arXiv:1810.04482, to be appeared in Phys Rev Applied

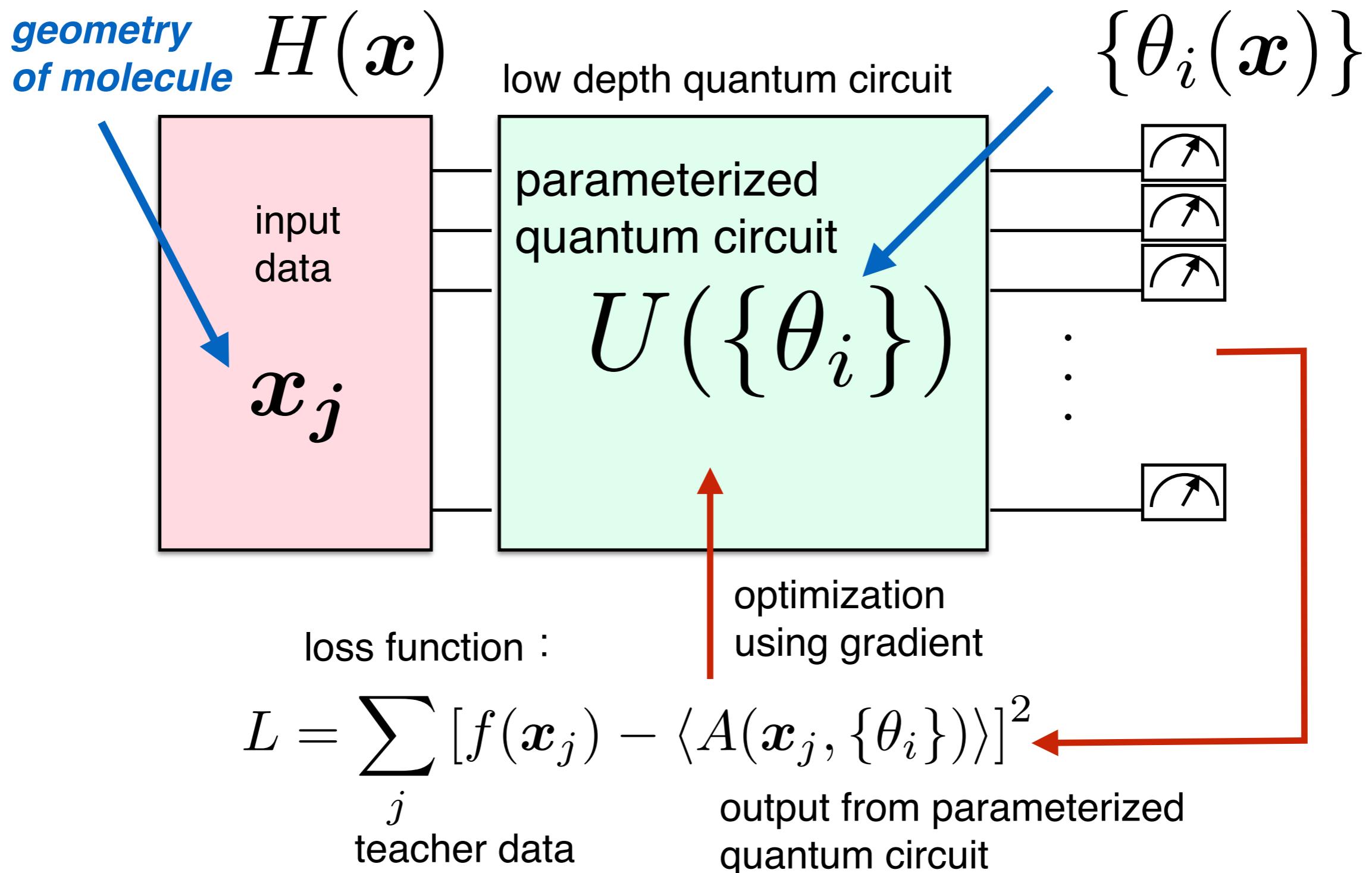
“A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor”

Petuzzo et al Nature Communication 5:4213
(2014)



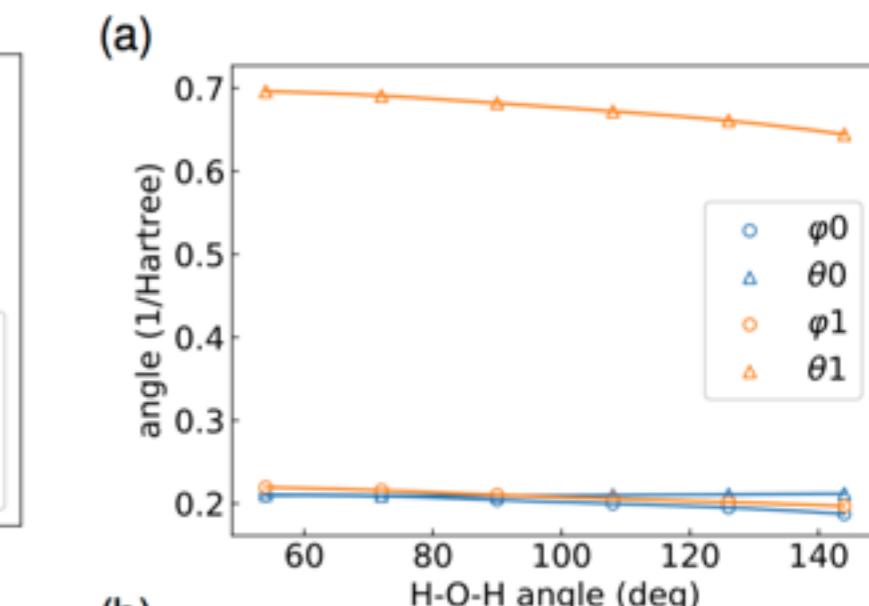
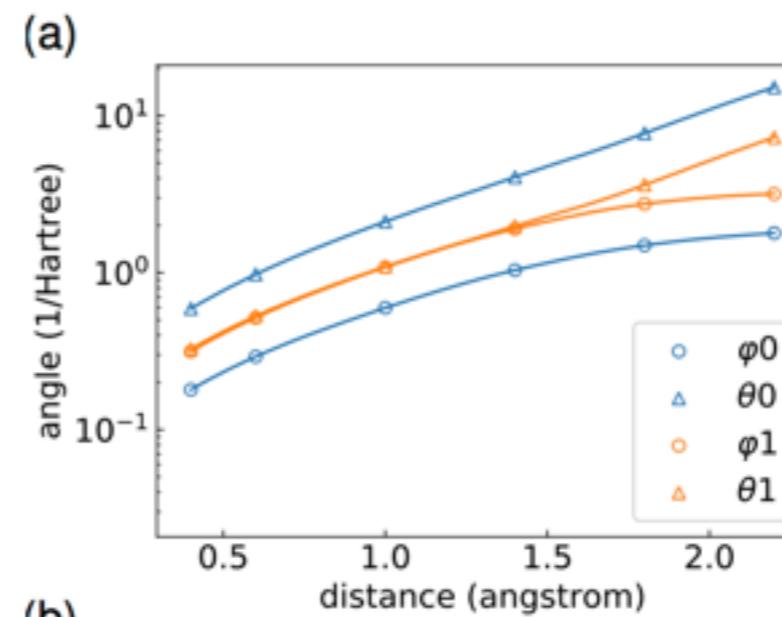
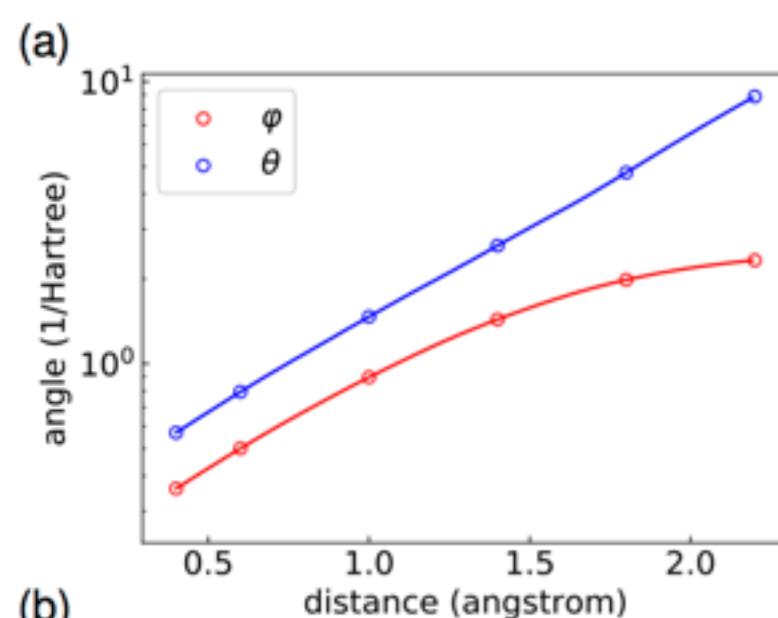
Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz

Kosuke Mitarai, Tennin Yan, Keisuke Fujii, arXiv:1810.04482, to be appeared in Phys Rev Applied



Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz

Kosuke Mitarai, Tennin Yan, Keisuke Fujii, arXiv:1810.04482, to be appeared in Phys Rev Applied



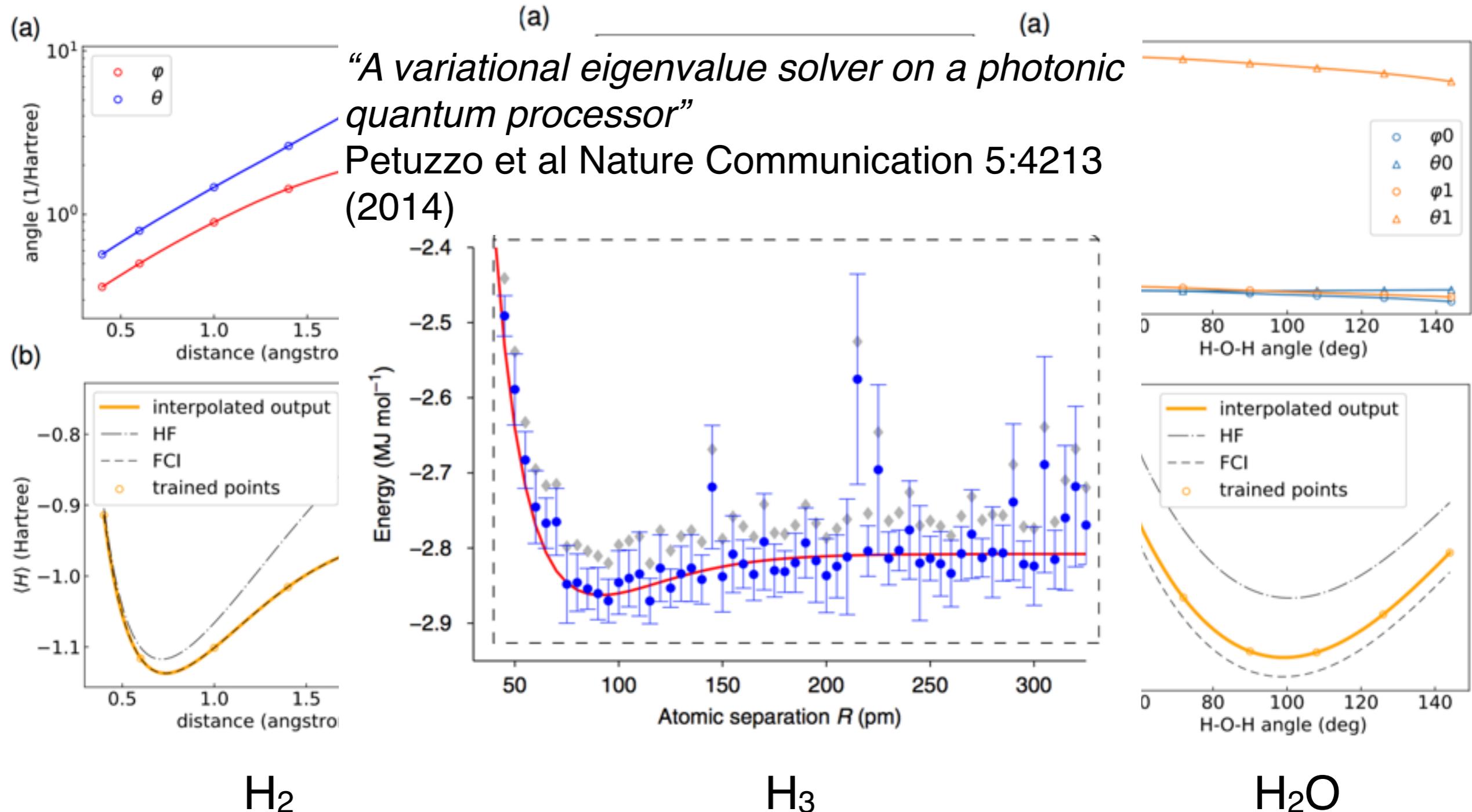
H_2

H_3

H_2O

Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz

Kosuke Mitarai, Tennin Yan, Keisuke Fujii, arXiv:1810.04482, to be appeared in Phys Rev Applied



まとめ

量子コンピュータ＝ 情報と物理、基礎と応用、理学と工学の交差点

- ・長い年月を経てやっと**量子を操れる時代**になってきた
- ・**どのようにすれば賢く使えるか**はよくわかっていない
→量子エクスペリエンス
- ・大規模な万能量子コンピュータにはまだ**10~年(準備期間)**
- ・近未来的には量子超越（量子加速の実証）とその利用(分子・物理シミュレーション・機械学習)
- ・量子の優位性を活かして**量子を経験**し、量子を操るための**知識を蓄積**し、**従来コンピュータの延長上にない**世界(古典コンピュータの進化)への道を見極める