

テンソルネットワーク構造を用いた量子回路学習 —QTensorNet：高速・簡単な量子回路学習ライブラリ—

1. 背景

近年、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum device) と呼ばれる、誤り訂正機能のない数百～数千量子ビットからなる量子コンピュータの開発が進んでいる。量子コンピュータは量子ビットと呼ばれる基本単位を用いて量子力学的な処理を実行できるため、古典コンピュータと比べて指数関数的な速度で情報を処理できる。

NISQ 上で動作するタスクの一つに量子回路学習があり、古典機械学習では学習不可能なデータセットを学習できる可能性があるとして注目されている。ところが、量子回路学習を手軽に実行できるライブラリは存在せず、学習の実装コストが非常に高い。さらに、量子回路を古典シミュレートするには一般に非常に計算量が大きく、たかだか 30 量子ビット程度の量子回路学習しか現実的に実行することができない。このような小規模な量子系において動かすことの出来る学習タスクは非常に限られる。これらの原因により、量子回路学習の性能解明があまり進まず、社会に「量子コンピュータ上での機械学習」のアイデアが浸透しづらい状況にある。

このような現状において、量子コンピュータに興味ある人が手軽に、手元の環境で量子回路学習のシミュレーションを実行できる環境が必要とされている。さらに、回路構成にある程度の制約を入れる代わりに、大規模な量子系における量子回路学習のシミュレーションが実行できるような枠組みの整備が求められる。

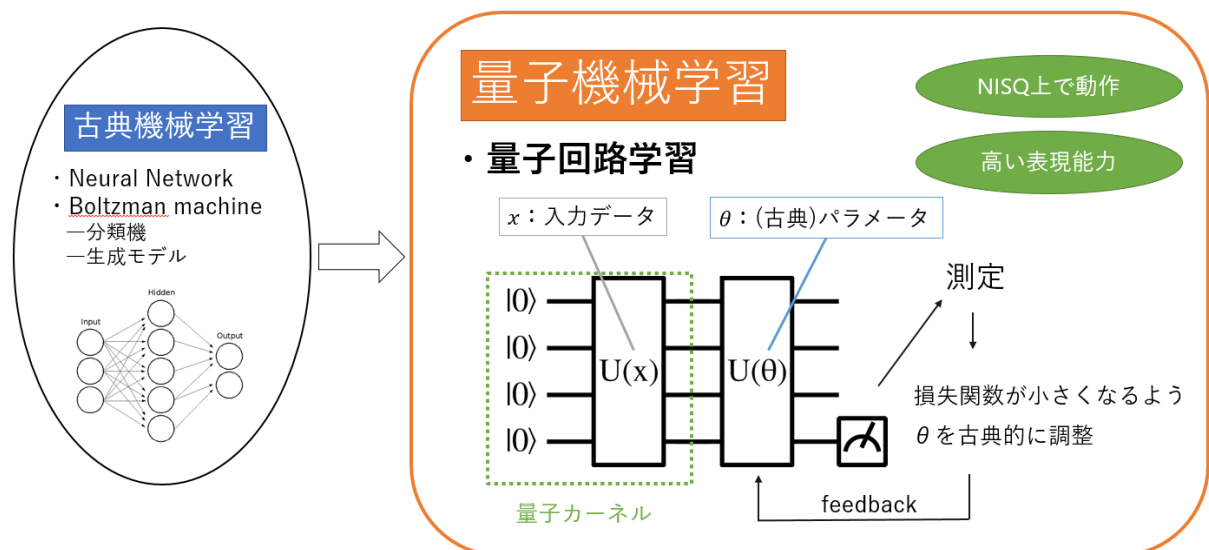


図 1：量子回路学習のイメージ図

2. 目的

本プロジェクトでは、量子コンピュータに興味ある人が手軽に、手元の環境で量子回路学習のシミュレーションを実行できるために、

1. 量子多体系の分野で用いられるテンソルネットワークの技術を使用することで、特定の構造を持つ量子回路に対して非常に低いコストでシミュレーションが実行できる。
2. ゲートを追加する、測定を追加する、データを指定する、などの基本操作だけで簡単に量子回路学習を実行できる。

という2つの特徴を兼ね備えた量子回路・量子回路学習ライブラリの作成を目的とした。さらに、作成したライブラリをもとに、定量的な大規模量子回路学習に対する性能調査も行った。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは量子回路学習ライブラリである QTensorNet を開発した。

QTensorNet はテンソルネットワークをバックエンドとする量子回路シミュレータである。テンソルネットワークとはテンソル同士の掛け算をネットワークとして表す枠組みであり。特に量子回路はテンソルネットワークとみなすことができる。例えば図2に、とある物理量を測定する量子回路と、その測定値の期待値に対応するテンソルネットワーク表示を示す。

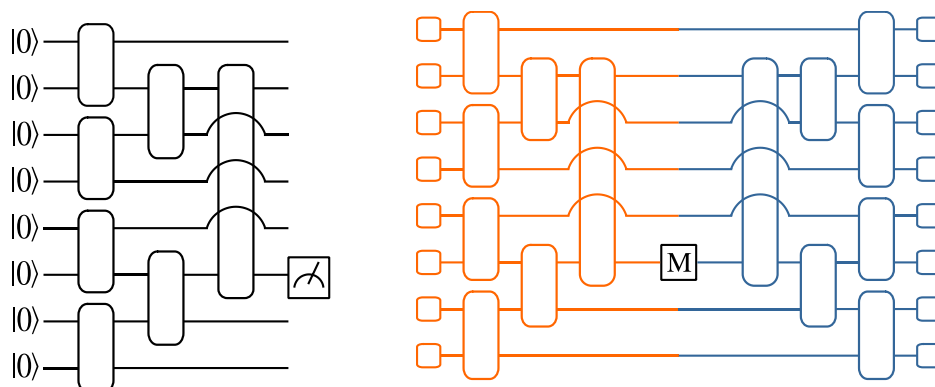


図 2 : 量子回路とその測定値の期待値のテンソルネットワーク表現

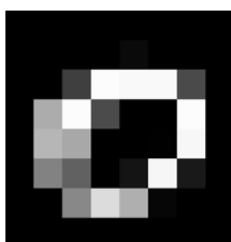
量子回路の物理量の期待値を知りたいときは、図2左の量子回路の各ステップにおける量子状態を保持する代わりに、図2右のテンソルネットワークの縮約をとることで求められる。このように、量子回路のシミュレーションというタスクを、テンソルネットワークの縮約というタスクに

置き換えて考えることができ、さらにテンソルの縮約の順番を最適化することで計算の高速化を図ることができる。

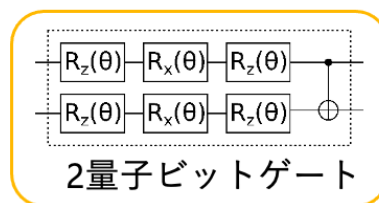
以上のような特性を持つテンソルネットワークをベースとして、本プロジェクトでは量子回路・量子回路学習シミュレータである QTensorNet を開発した。QTensorNet では Python モジュールとして記述され、通常の量子回路シミュレータとしても利用できるが、特に量子回路学習シミュレータとして利用することができる。量子回路学習のアルゴリズムである、

- ・古典データを量子状態にエンコードする
- ・パラメータ付き量子ゲートを追加する
- ・物理量の測定をし、その期待値を求める
- ・期待値に依存した損失関数を減少させる方向にパラメータを更新するという学習のステップを、今までよりも遥かに簡単に量子回路学習を実装・実行することができる。

特に、量子回路として特定のテンソルネットワーク構造を用いることで、今までではシミュレーション不可能であった大規模な量子回路学習も実行することができる。例として、 8×8 、 16×16 のサイズに圧縮した MNIST 画像データセットの "0"、"1" 各 1000 枚を 2 値分類するのに、64、256 量子ビット系量子回路を用いて量子回路学習の実行した結果を以下に示す。量子回路の構成は図 2 のようなツリーテンソルネットワーク型を用いて、各 2 量子ビットゲートは以下のようなゲートを 1~3 回繰り返したものを使用する。



MNIST dataset.
8×8に圧縮した
"0"の画像.



点線の部分を
1~3回繰り返す

学習後のlossの値

繰り返し回数	1回	2回	3回
64qubit	262.32	30.26	37.22
256qubit	253.29	15.47	20.19

学習後のテストデータへの正答率

繰り返し回数	1回	2回	3回
64qubit	82.56%	99.56%	99.31%
256qubit	87.5%	100%	99.75%

表 1 : 画像分類量子回路学習の実行例

4. 新規性・優位性

本プロジェクトで開発した量子回路・量子回路学習ライブラリである QTensorNet はテンソルネットワークをバックエンドとしているため、大規模量子系かつ生み出されるエンタングルメントが少ない状況では従来の量子回路シミュレータと比較して速度に優位性がある。図 3 に、従来の量子回路シミュレータである Qulacs と QTensorNet について、ランダムな量子回路に対する測定値の期待値を計算するのにかかる時間を、量子ビット数を変えて比較したものを示す。

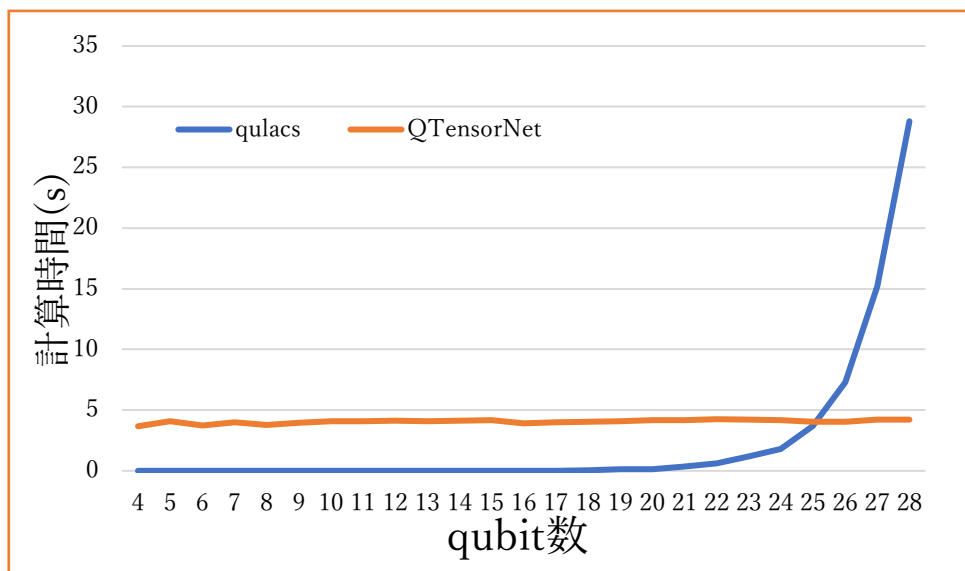


図 3：1次元ランダムゲート回路(50ゲート)における速度比較。

青が Qulacs を、橙が QTensorNet を表す。

また、量子回路学習に特化し、ユーザーにとって使いやすいライブラリを提供する試みは本プロジェクトが初である。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

QTensorNet のような誰でも簡単に利用できる量子回路学習フレームワークを作成することで、機械学習に興味のある人々が参入するための心理的、あるいは技術的なしきい値を下げることで、量子機械学習という分野の活性化に繋がり、また分野全体において量子機械学習という技術そのものへの理解、知見が高まっていくことが期待される。

また、量子回路学習、特にテンソルネットワークを用いた量子回路学習の研究は最先端の研究である。QTensorNet を用いて量子回路学習の特性・性能について研究することで、実装・計算時間の短縮になるのに加え、再現性の高い数値実験を行うことができる。

6. 氏名（所属）

真鍋 秀隆（京都大学工学部情報学科）

（参考）関連 URL

QTensorNet: : <https://github.com/wotto27oct/QTensorNet>