設立25年記念PCクラスタシンポジウム

2025年12月9日

量子機械学習の理論的進展とAIへの展望

東京大学
素粒子物理国際研究センター（ICEPP）
寺師 弘二

講演の概要（1）

量子機械学習 = 入力データの学習を量子モデルで行う機械学習

量子モデルで学習	➡	量子計算機で推論	➡	結果
⬆		⬆		
訓練古典データ		テスト古典データ		

古典データを入力とする効率的な量子学習モデルを作るために

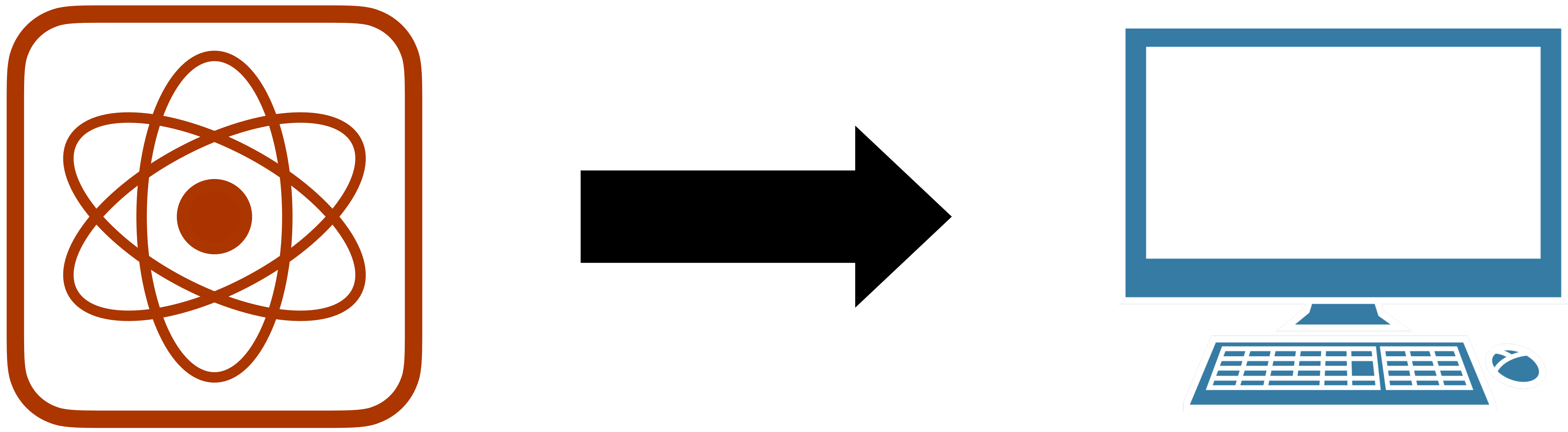
1）量子学習モデルの訓練可能性、汎化性の理解
2）問題に応じた量子ニューラルネットワークモデルの設計

講演の概要（2）

量子回路からの出力に対するHPC活用の可能性を考えてみる

3）量子コンピュータで基底状態を探索 + HPCでエネルギーを推定

量子コンピュータ　　　　　HPC



量子状態のサンプリング　　ハミルトニアンの対角化

講演の概要（3）

量子回路からの出力に対するHPC活用の可能性を考えてみる

量子コンピュータでの期待値計算を古典学習モデルで学習する

古典モデルで学習 ➡ 古典計算機で推論 ➡ 結果

⬆ 訓練量子回路の出力　⬆ テスト量子回路の出力

一般的な量子回路の期待値に対する古典学習は、通常大きなコストがかかる

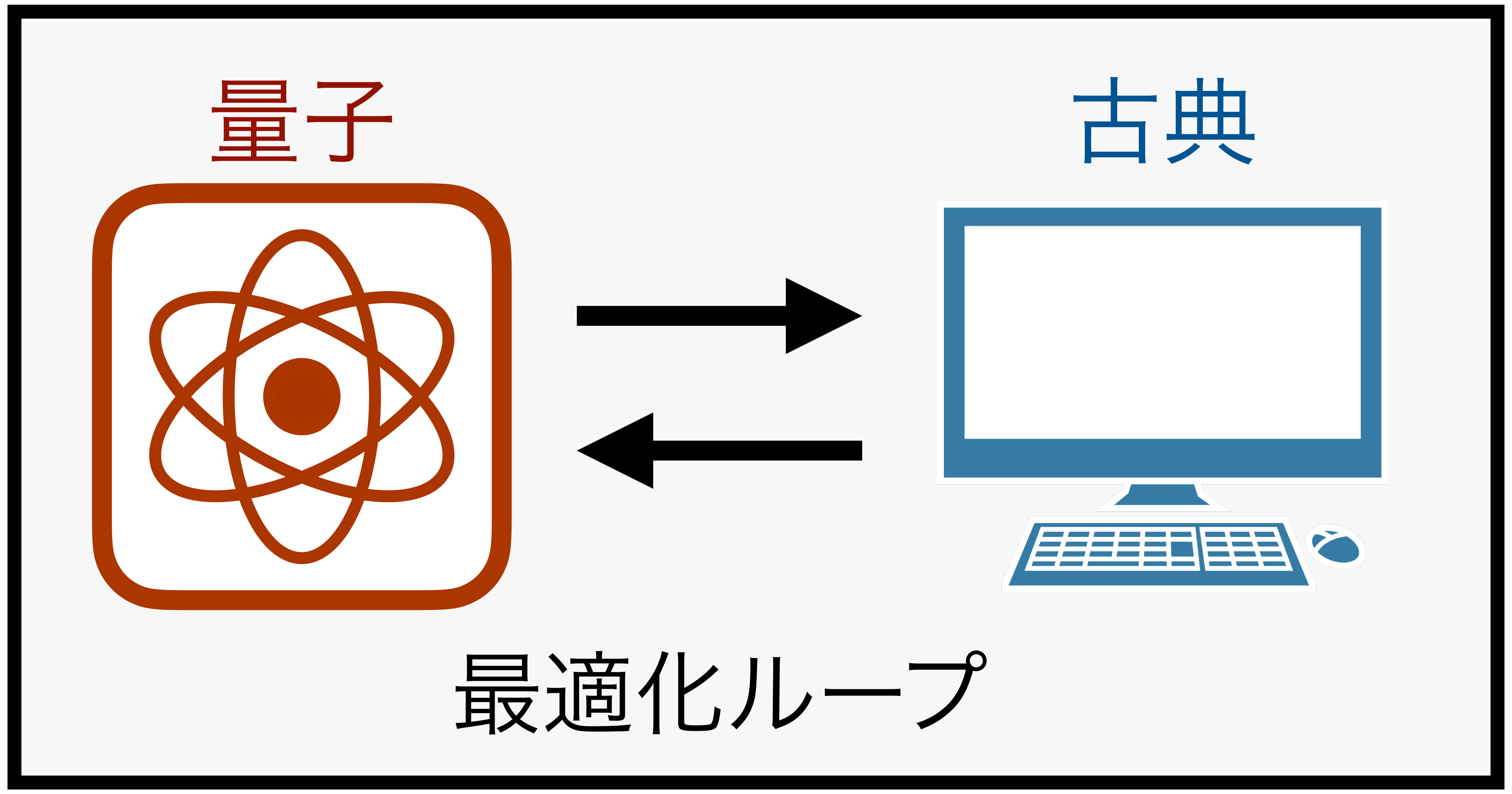
➡ 現実的な有界ゲートからなる量子回路に対しては、効率的な古典学習も可能

4）有界ゲート量子回路の期待値計算に対するHPC古典学習の可能性

量子学習モデル

変分量子回路を用いた量子学習モデル

- 量子コンピュータの入力状態ρを準備
- 学習パラメータ$\boldsymbol{\theta}$を持つユニタリー$U(\boldsymbol{\theta})$を適用し、$\rho(\boldsymbol{\theta}) = U(\boldsymbol{\theta})\rho U(\boldsymbol{\theta})^\dagger$を生成
- 観測量Oの期待値を計算し、損失関数$C(\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{Tr}\left[O\rho(\boldsymbol{\theta})\right]$を決定
- 古典計算で損失関数を最小化し、学習パラメータ$\boldsymbol{\theta}$を最適化



最適化にかかるリソースのため、一般的に大きな問題への適用が難しい

変分量子固有値ソルバー（VQE）など

量子学習モデルでの勾配消失問題

一般的なローカルユニタリーからなる（構造のない）量子学習モデルは、
系のサイズとともに訓練が困難になる　— “次元の呪い” 問題 —

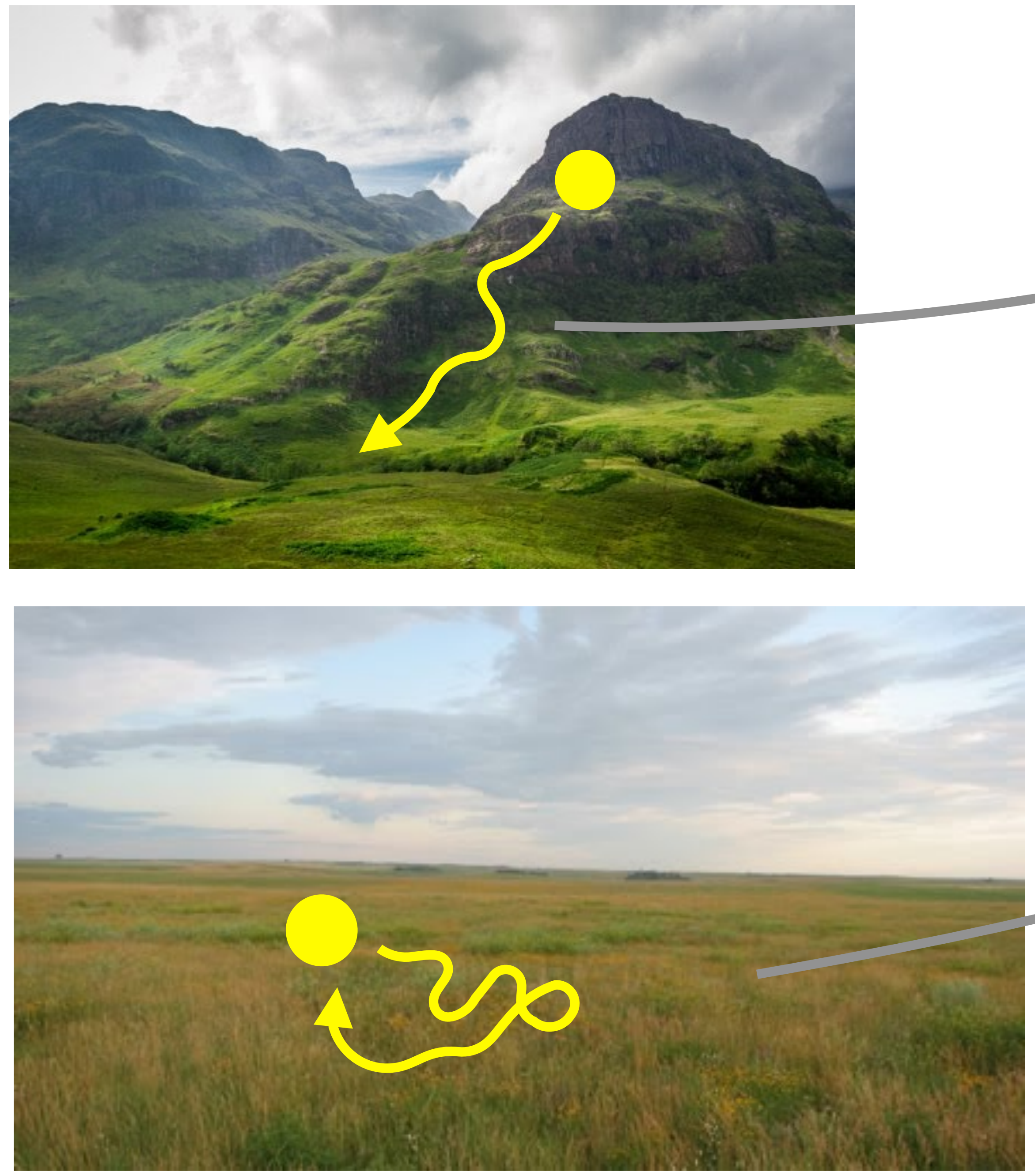
McClean et al., Nat. Commun. 9, 4812 (2018)

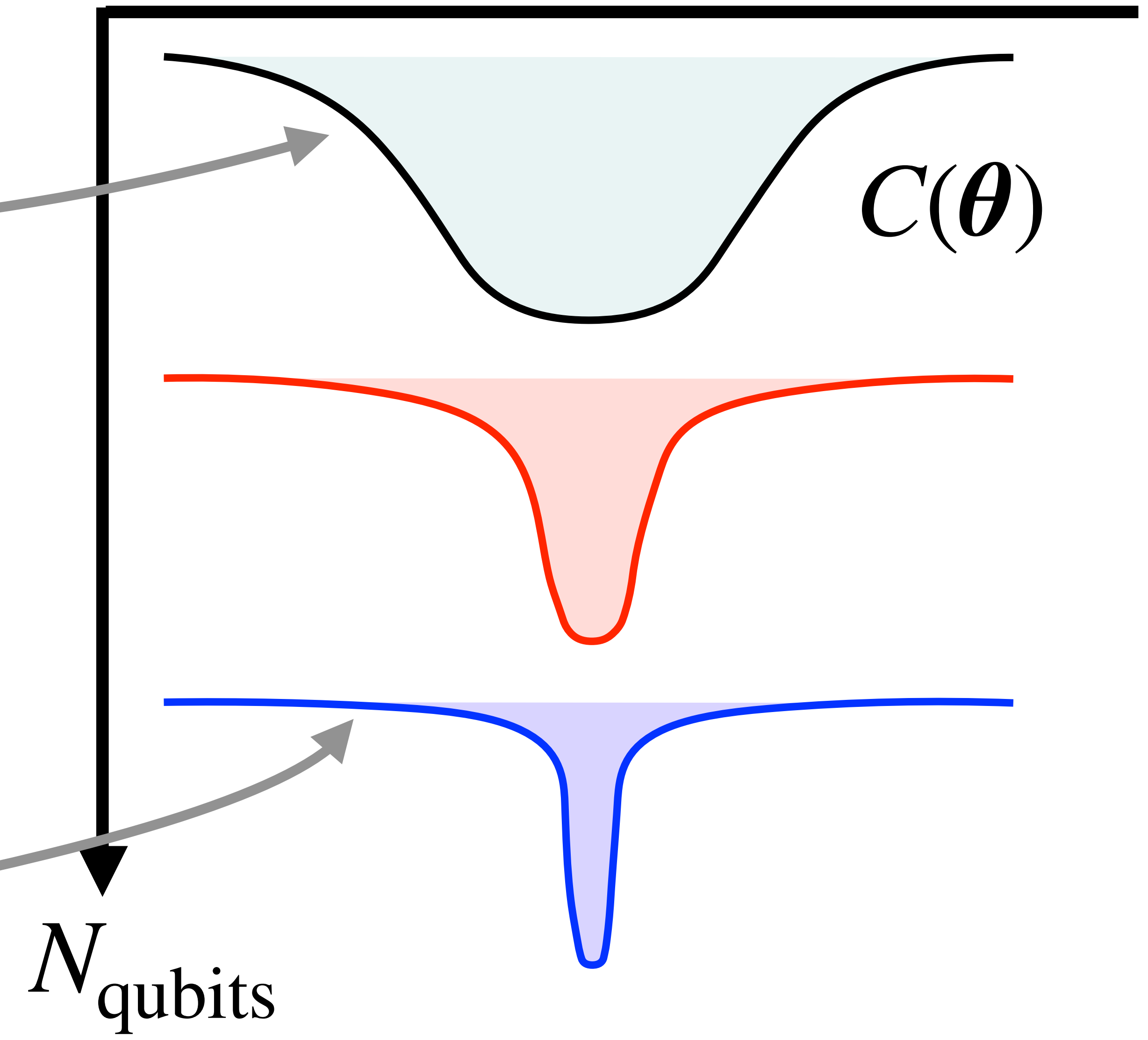
損失関数

$$C(\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{Tr}[OU(\boldsymbol{\theta})\rho U^{\dagger}(\boldsymbol{\theta})]$$

$$\Rightarrow V_{\boldsymbol{\theta}\sim\mathrm{uniform}}\left[C(\boldsymbol{\theta}) \text{ or } \frac{\partial C(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_i}\right] = \mathcal{O}(b^{-n}) \quad (b > 1)$$

コスト関数あるいはその勾配が
一定値に指数的に集中する



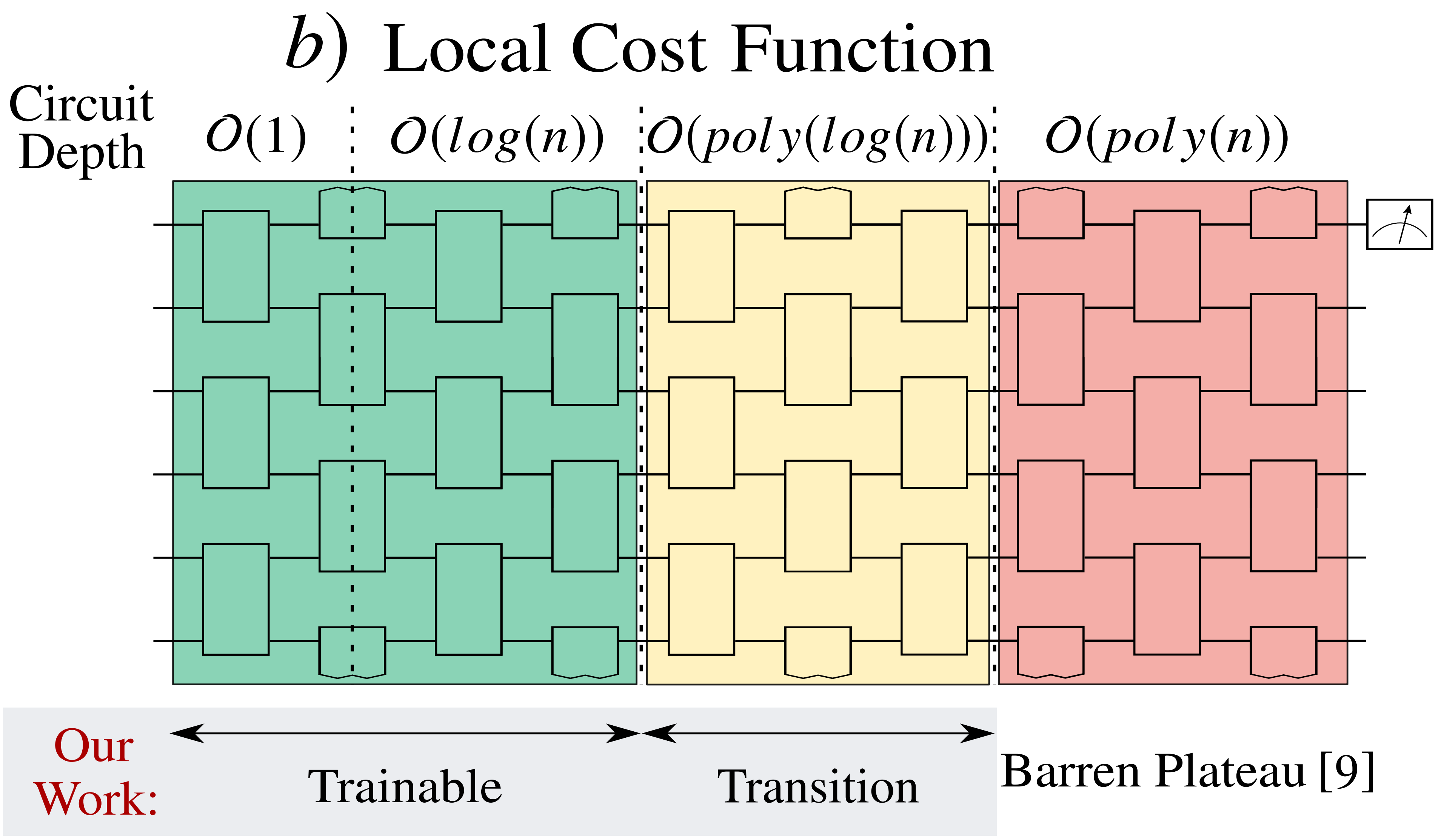


➡ バレンプラトー（勾配消失）問題

量子学習モデルの訓練可能性

量子学習モデルの学習性能をいかに向上させるか

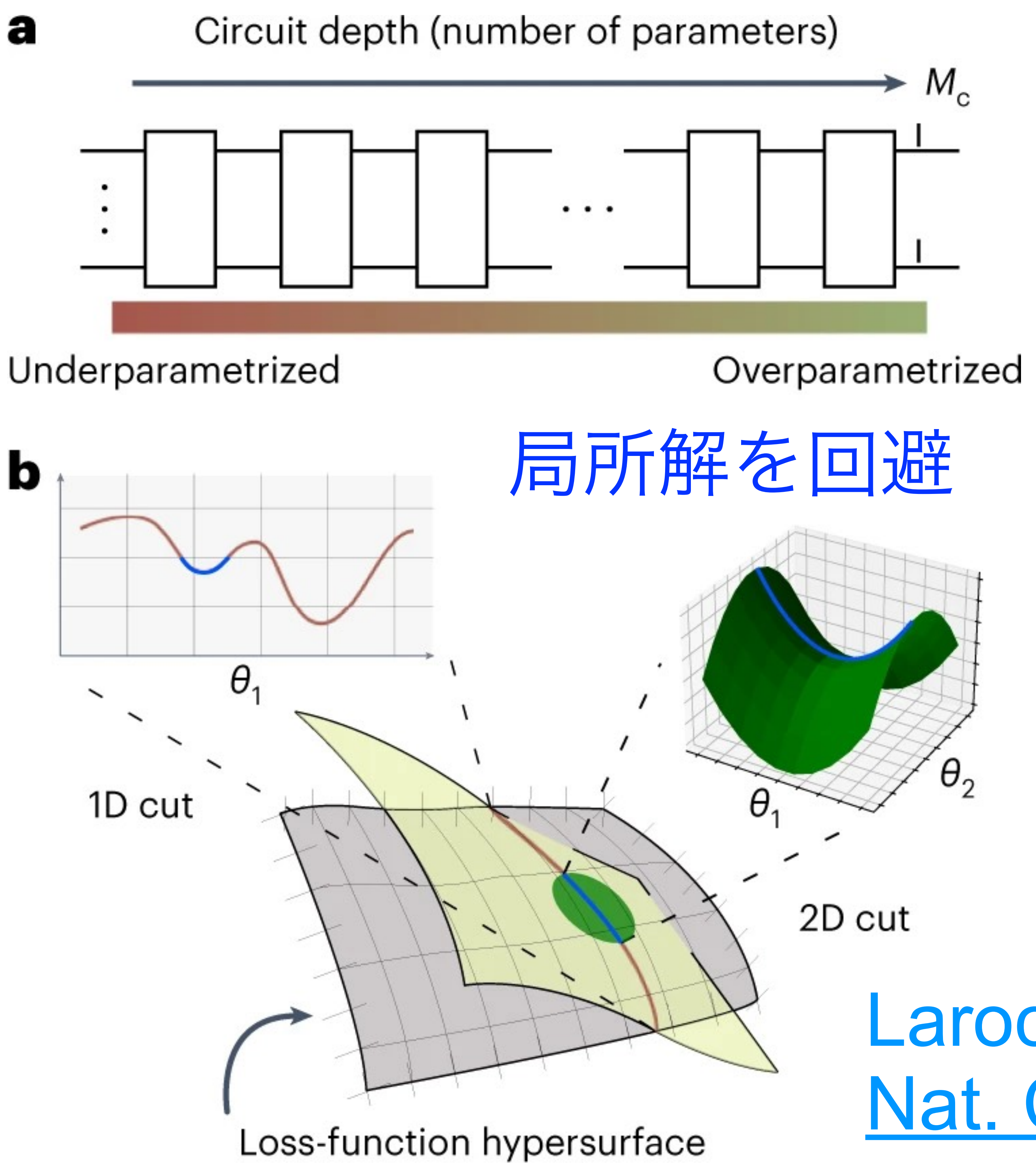
- 学習モデルの表現能力は学習パラメータ数とともに向上
- 回路が深くなると、勾配消失が起こりうる



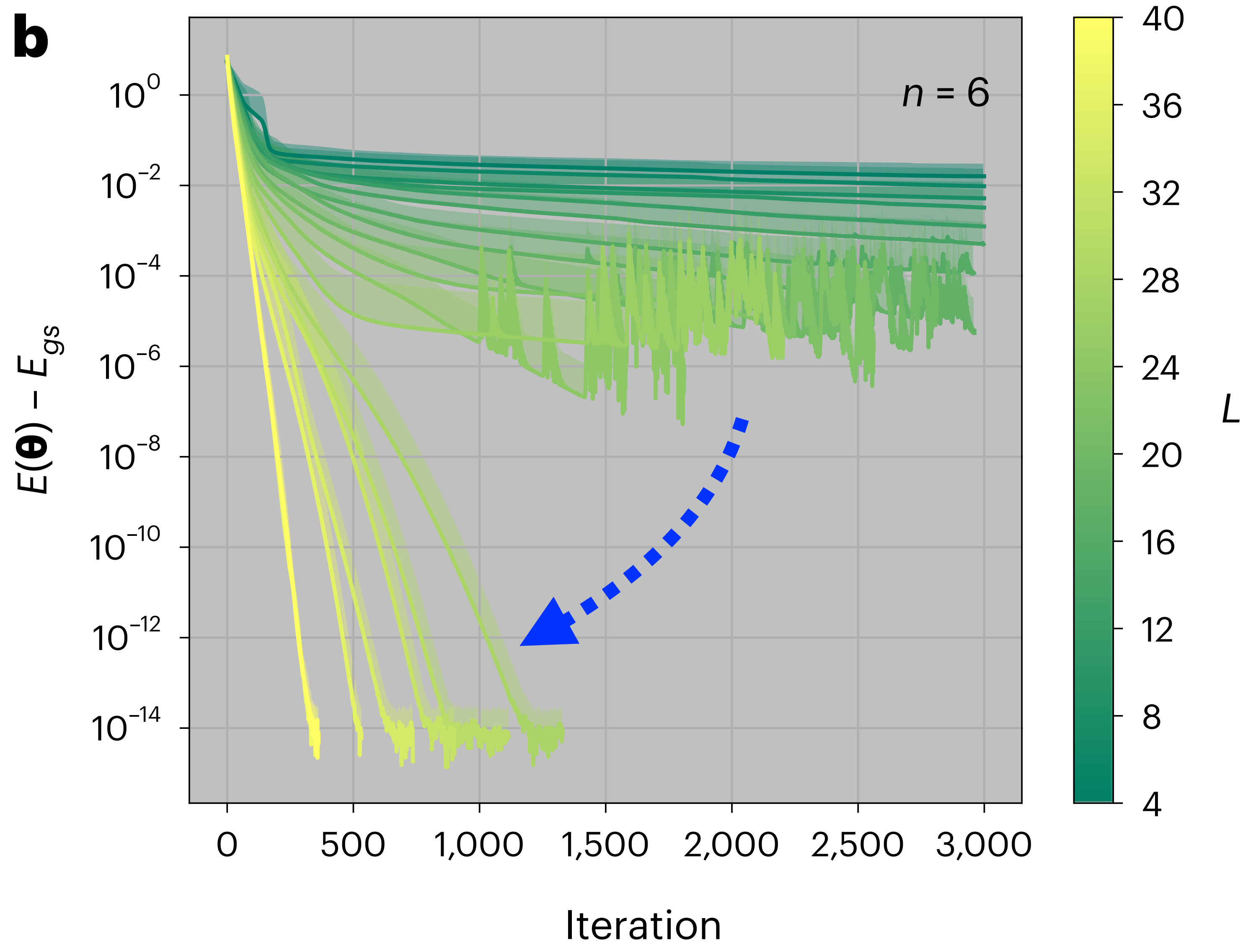
[Cerezo et al., Nat. Commun. 12, 1791 (2021)]()

学習パラメータ数がある閾値を越えると、学習性能が非連続的に向上する場合がある

→ 過剰パラメータ現象



局所解を回避



学習の収束性の向上

[Larocca et al., Nat. Computat. Sci. 3, 542 (2023)]()

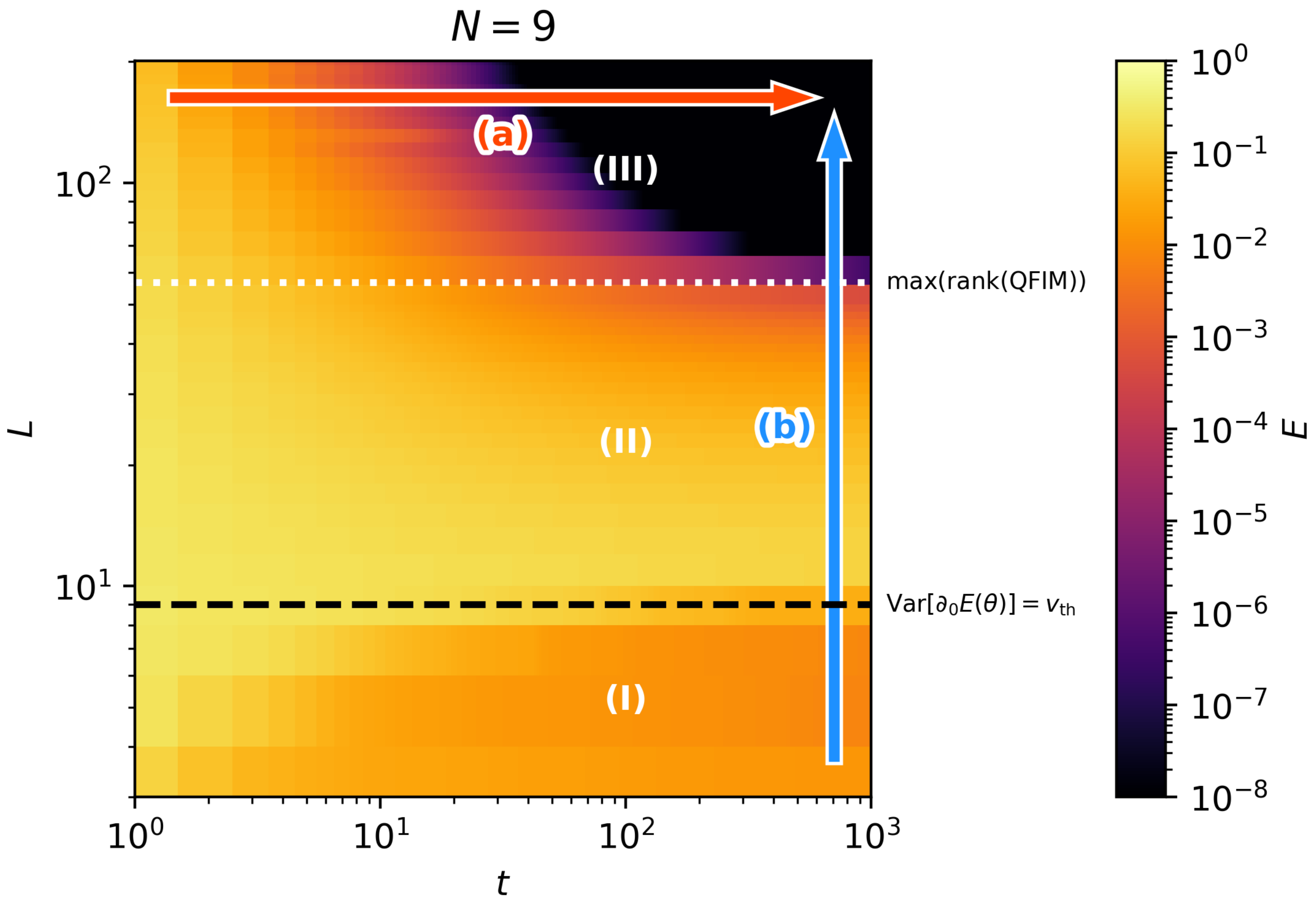
勾配消失と過剰パラメータ

横河電機（中林暁男氏、橋本凌氏）との共同研究として、勾配消失と過剰パラメータの包括的な数値実験を行った

VQEでの基底エネルギー探索

- 縦横磁場イジング模型 $(3 \leq N \leq 10)$
- Hardware-Efficient アンザッツ
- 逐次最小問題最適化法（NFT）によるパラメータの最適化

Nakanishi, Fujii, Todo,
[Phys. Rev. Res. 2, 043158 (2020)]



相対エネルギー誤差Eを、量子ビット数N、パラメータ数（レイヤー数L）、更新回数tを変えて数値検証した

論文を準備中

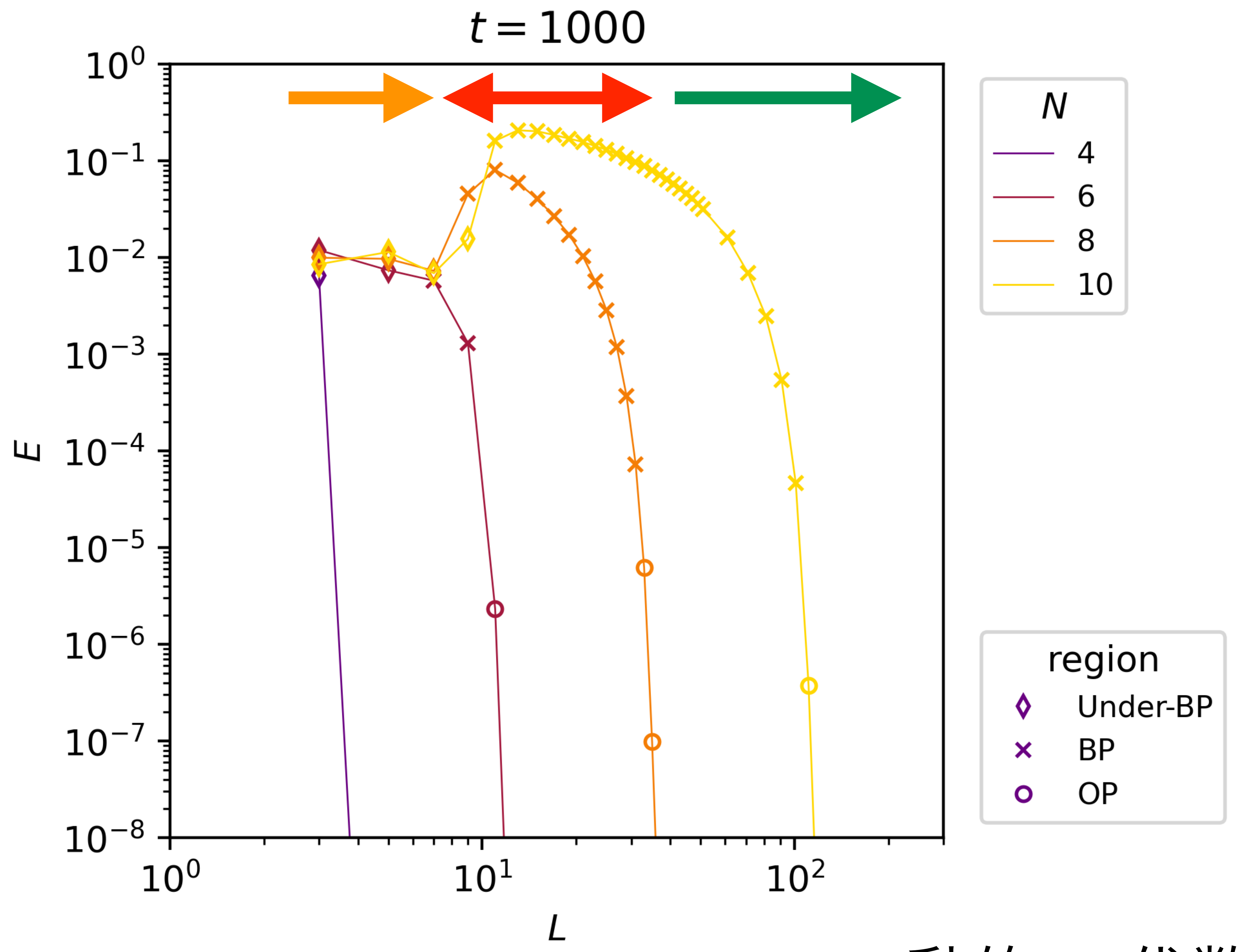
勾配消失と過剰パラメータ

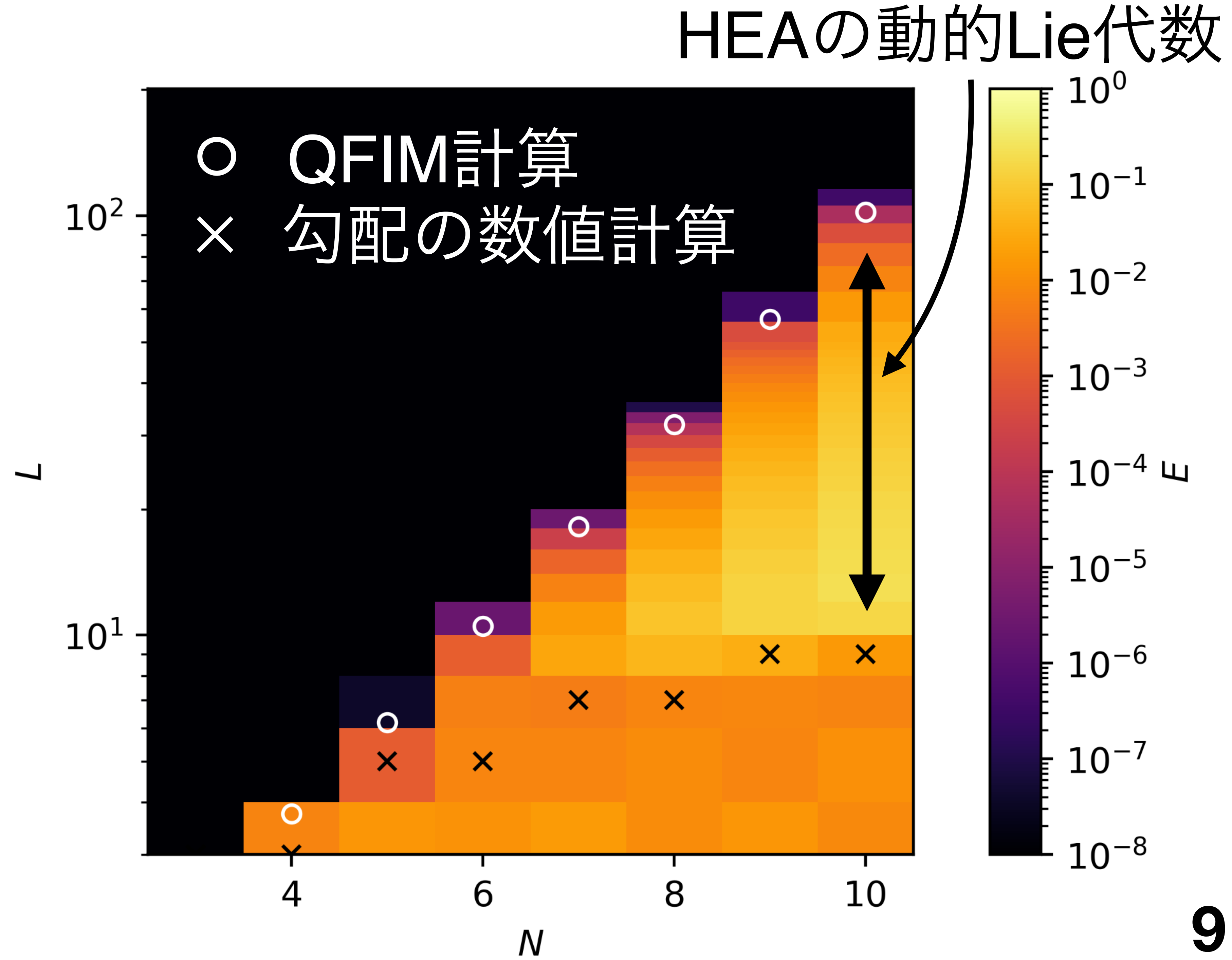
エネルギー誤差EのL-依存性：

L小　表現能力が小さく収束性は悪い

勾配消失によるEの悪化 ➡ **HEAの動的Lie代数と無矛盾** [Larocca et al. (2023)]

L大　過剰パラメータによる指数的収束 ➡ **QFIM計算と無矛盾**





エネルギー誤差Eのt-依存性：

- 過剰パラメータ領域での指数的収束を確認
- パラメータ数に対する非単調な収束を観測

実問題に対して、量子回路が勾配消失や過剰パラメータを起こす領域へ遷移する時の振る舞いを検証

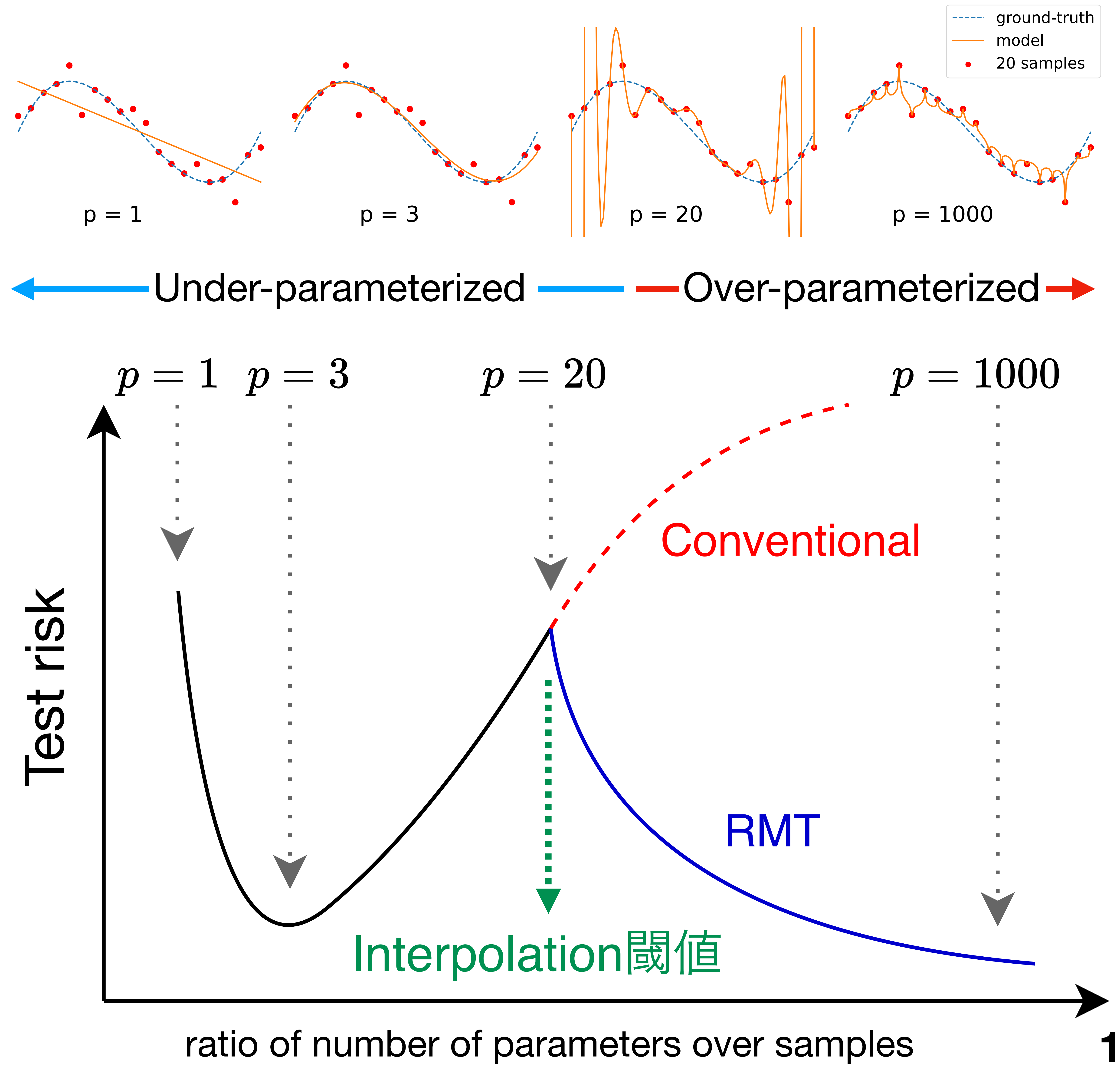
➡ 理論に立脚した量子回路設計の指針

機械学習の汎化性

学習モデルの汎化性（➡ 学習に用いていないデータに対する予測性能）は性能評価の重要な指標

- 学習モデルのパラメータ数がデータ量と同等になると、オーバーフィッティングによって汎化性は下がる
- 過剰パラメータ領域に入ると、汎化性の非連続的な改善が見られる

➡ **二重降下現象**



量子学習でも二重降下は起こるか？

量子カーネル回帰タスクでの汎化性

量子カーネルリッジ回帰での二重降下の研究を進めている

- ノイズ$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{tr}}$付き学習サンプル：$\boldsymbol{y}_{\mathrm{tr}} = X_{\mathrm{tr}}\boldsymbol{\alpha}^* + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{tr}}$

  入力データ $X_{\mathrm{tr}} = \left(\phi(x_1), \cdots, \phi(x_n)\right)^T \in \mathbb{R}^{n\times d}$ （リプシッツ関数 $\phi(x)$）

- 量子カーネルモデル：$f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Tr}[\rho(\boldsymbol{x})O] = \boldsymbol{\alpha}\cdot\phi(\boldsymbol{x})$　$O = \sum_i \alpha_i \rho(x_i)$

リッジ損失関数：$\hat{R} = \dfrac{1}{n} \| \boldsymbol{y}_{\mathrm{tr}} - X_{\mathrm{tr}}\boldsymbol{\alpha} \|_2^2 + \lambda \| \boldsymbol{\alpha} \|_2^2$

テストエラー：$R_{\lambda,\hat{\Sigma}} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{tr}}}\mathbb{E}_{(\boldsymbol{x}_{\mathrm{ts}},\boldsymbol{y}_{\mathrm{ts}})}\left[(\boldsymbol{y}_{\mathrm{ts}} - \hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\phi(\boldsymbol{x}_{\mathrm{ts}}))^2\right]$

➡ 正規化項の大きさとともに汎化性がどう変わるか

Cf. 正規化項なしの量子カーネル回帰, M. Kempkes et al., arXiv:2501.10077

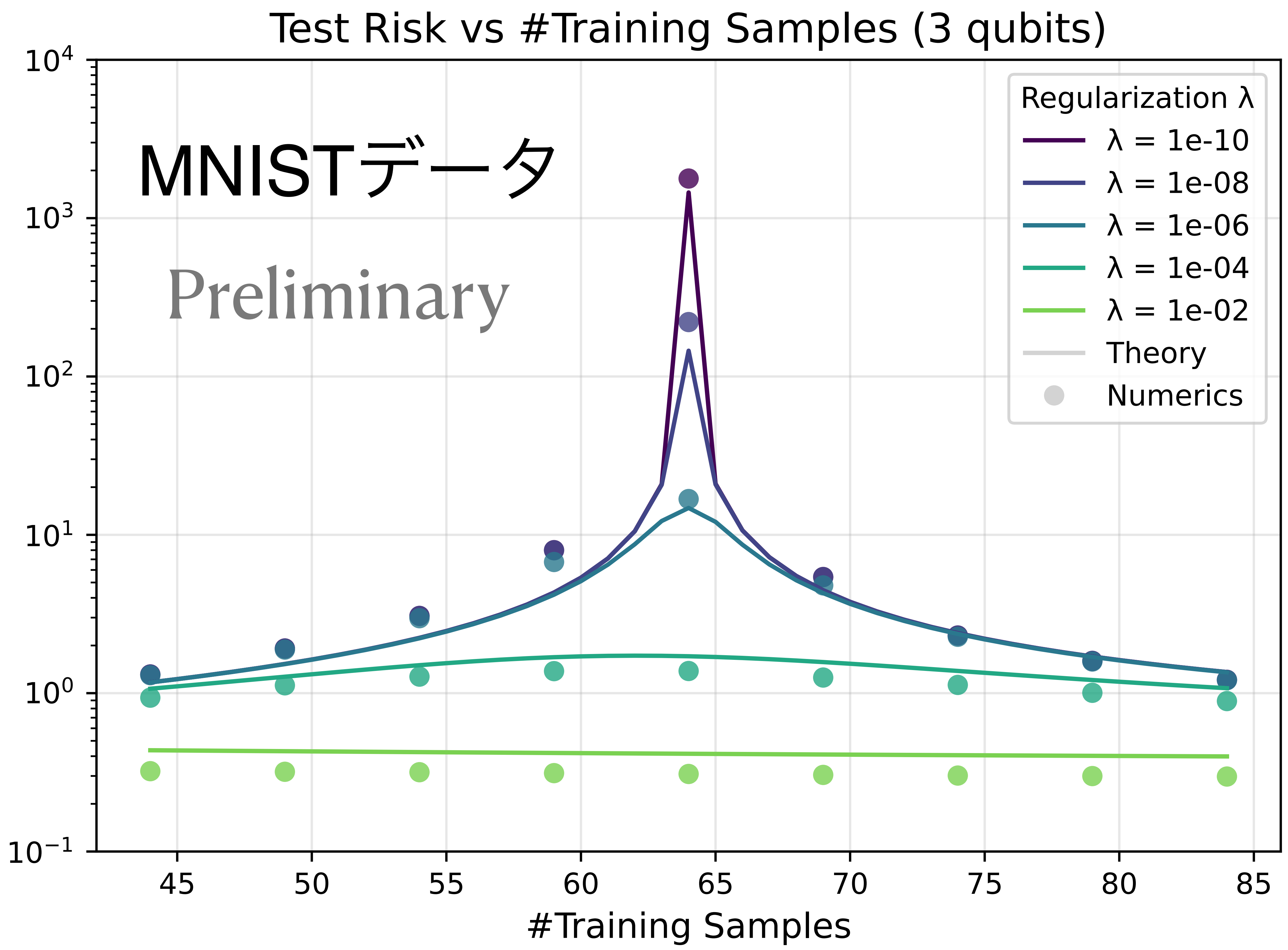
量子カーネル回帰タスクでの汎化性

量子カーネルリッジ回帰での二重降下の研究を進めている

ランダム行列理論を用いた、テストエラー$R_{\lambda,\hat{\Sigma}}$の決定論的同値の評価

サンプル数 n 特徴量次元 p : $n \to \infty, p \to \infty, p/n = \gamma$

解析結果を数値計算と比較



QTML 2025 poster (Singapore)

Interpolation閾値でのピークの大きさは正規化項に依存する

対称性を持つ量子学習モデル

勾配消失の影響を受けにくい量子回路として、問題が持つ性質（例えば対称性）を取り入れた回路設計は一つの指針

そのような回路が張る空間は、ヒルベルト空間全体ではなく対称性を保つ部分空間に限定される

➡ **回転対称性と順不同性を効率的に扱うことができる量子ニューラルネットワークモデルを提案**

Li, Nagano, Terashi, Phys. Rev. Res. 6, 043028 (2024)

Z. Li
（→ 民間企業）

勾配消失を起こさず、非常に少ない学習パラメータで高い識別性能を持つ学習モデルを実現

HPCを用いた量子・古典ハイブリッド計算

HPCを活用した量子・古典ハイブリッドは有望な計算リソース

HPCを用いた量子・古典ハイブリッド計算

HPCを活用した量子・古典ハイブリッドは有望な計算リソース

量子化学への応用 鉄硫黄クラスターの基底エネルギー計算

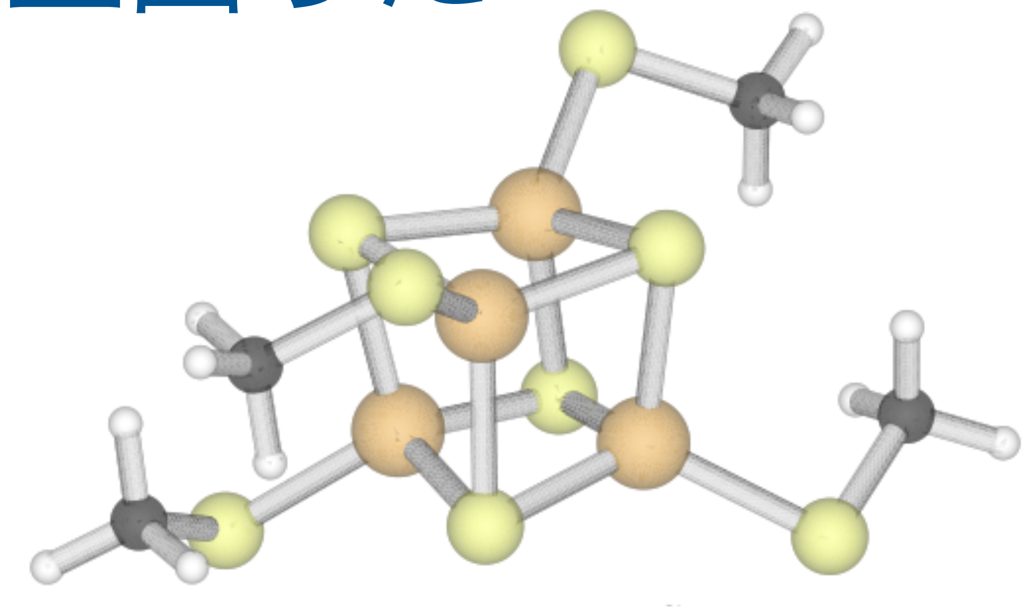
RIKEN

IBM Quantum

Shirakawa et. al, arXiv:2511.00224

- 量子コンピュータでの基底状態の探索
- HPCを用いて、ハミルトニアンを対角化・エネルギーを推定

ibm_marrakesh + 富岳 (2025) → 古典手法 (CISD) を計算精度で上回った



ibm_marrakesh

156量子ビット

Heron r2

＋

富岳

152,064ノード

Quantum-Selected Configuration Interaction Kanno et. al, arXiv:2302.11320

Sample-based Quantum Diagnonalization Robledo-Moreno et. al, Sci. Adv. 11, 25 adu9991 (2025)

HPCを用いた量子・古典ハイブリッド計算

HPCを活用した量子・古典ハイブリッドは有望な計算リソース

高エネルギー物理への応用 **格子ゲージ理論の基底エネルギー計算**

ICEPP
The University of Tokyo

ibm_kawasaki

IBM

156量子ビット

Heron r2

＋

Miyabi

東京大学、筑波大学

JCAHPC 最先端共同HPC基盤施設

Miyabi-G: CPU+GPU
NVIDIA GH200 Grace-Hopper
Superchip（1,120ノード）

格子ゲージ理論の量子シミュレーション

2次元$\mathbb{Z}_2$格子ゲージ理論の基底状態シミュレーション

Iiyama, Nagano, Terashi (UTokyo), Hayata (Keio),
Kawashima, Kirby, Motta, Pascuzzi, Mezzacapo (IBM)

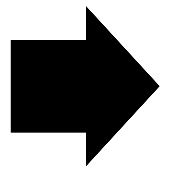

飯山悠太郎　永野廉人

クリロフ部分空間で基底状態を表現し、そのサンプリングを元にハミルトニアンを対角化

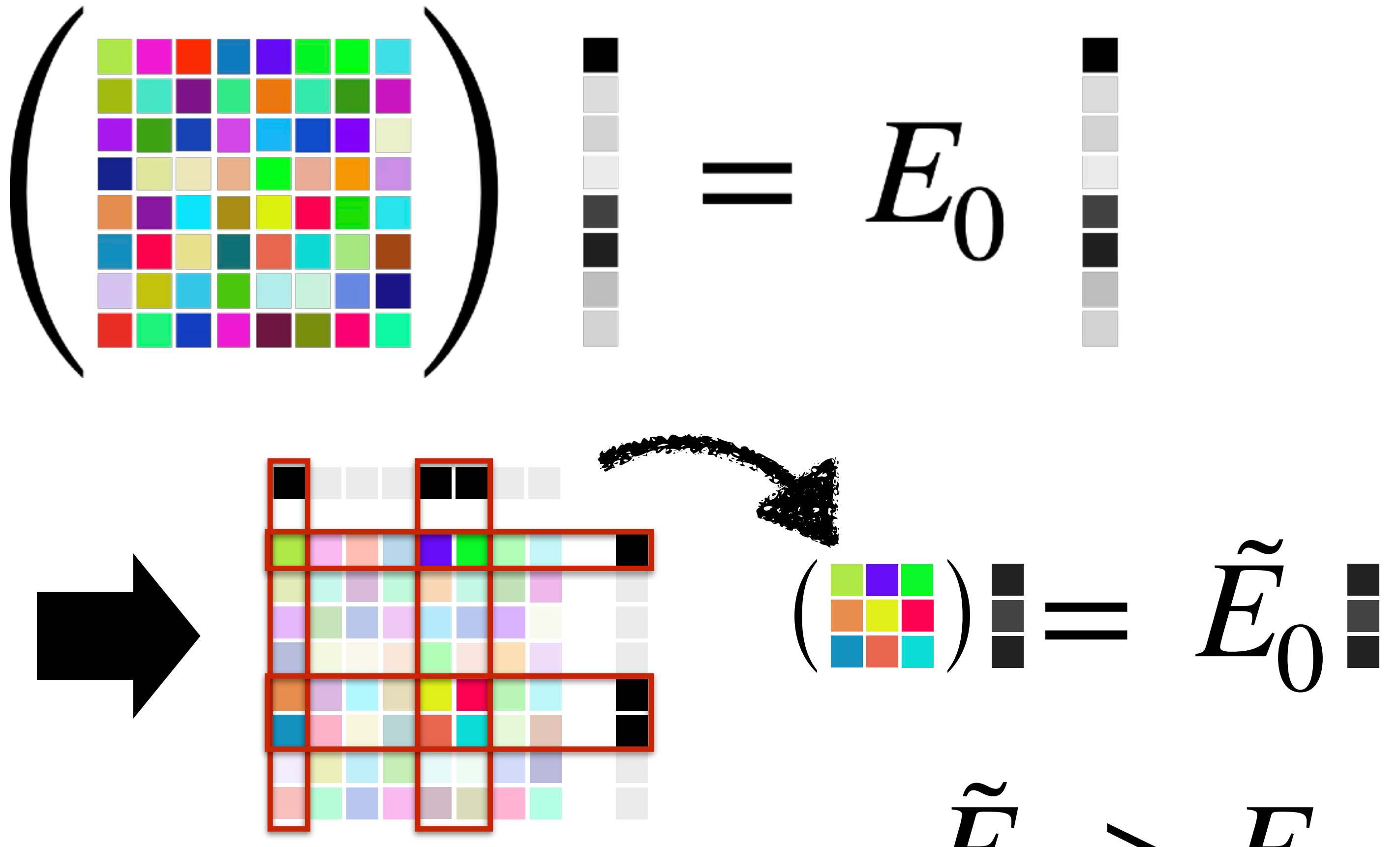
クリロフ部分空間の探索

$\langle \Omega | \psi_0 \rangle \neq 0$を満たす状態$|\psi_0\rangle$の元で、時間ステップ$\Delta t$、$U = e^{-iH\Delta t}$に対して

$$|\Omega\rangle \in \lim_{D\to\infty} \mathrm{span}\{U^n|\psi_0\rangle\}_{n=0}^{D}$$

 クリロフ部分空間での基底状態

サンプリングベースの対角化



$\tilde{E}_0 \gtrsim E_0$

- 疎な基底をサンプリング
- ハミルトニアンをビット列に射影し、対角化

2次元三角格子での$\mathbb{Z}_2$格子ゲージ理論

ハミルトニアン $H = -\sum_{e\in\mathscr{E}} Z(e) - \lambda \sum_{p\in\mathscr{P}} \prod_{e\in\partial p} X(e)$

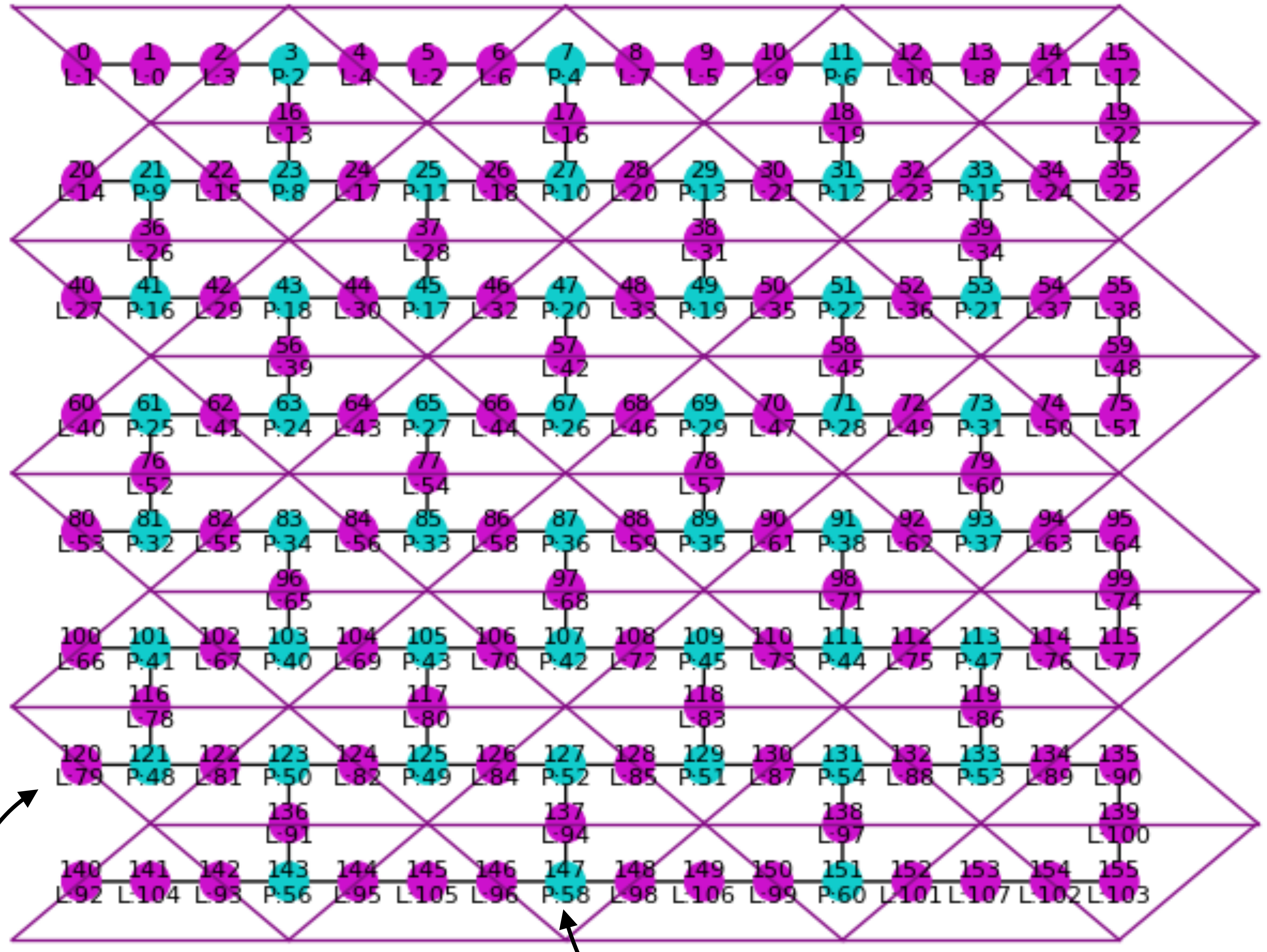
edges

plaquettes

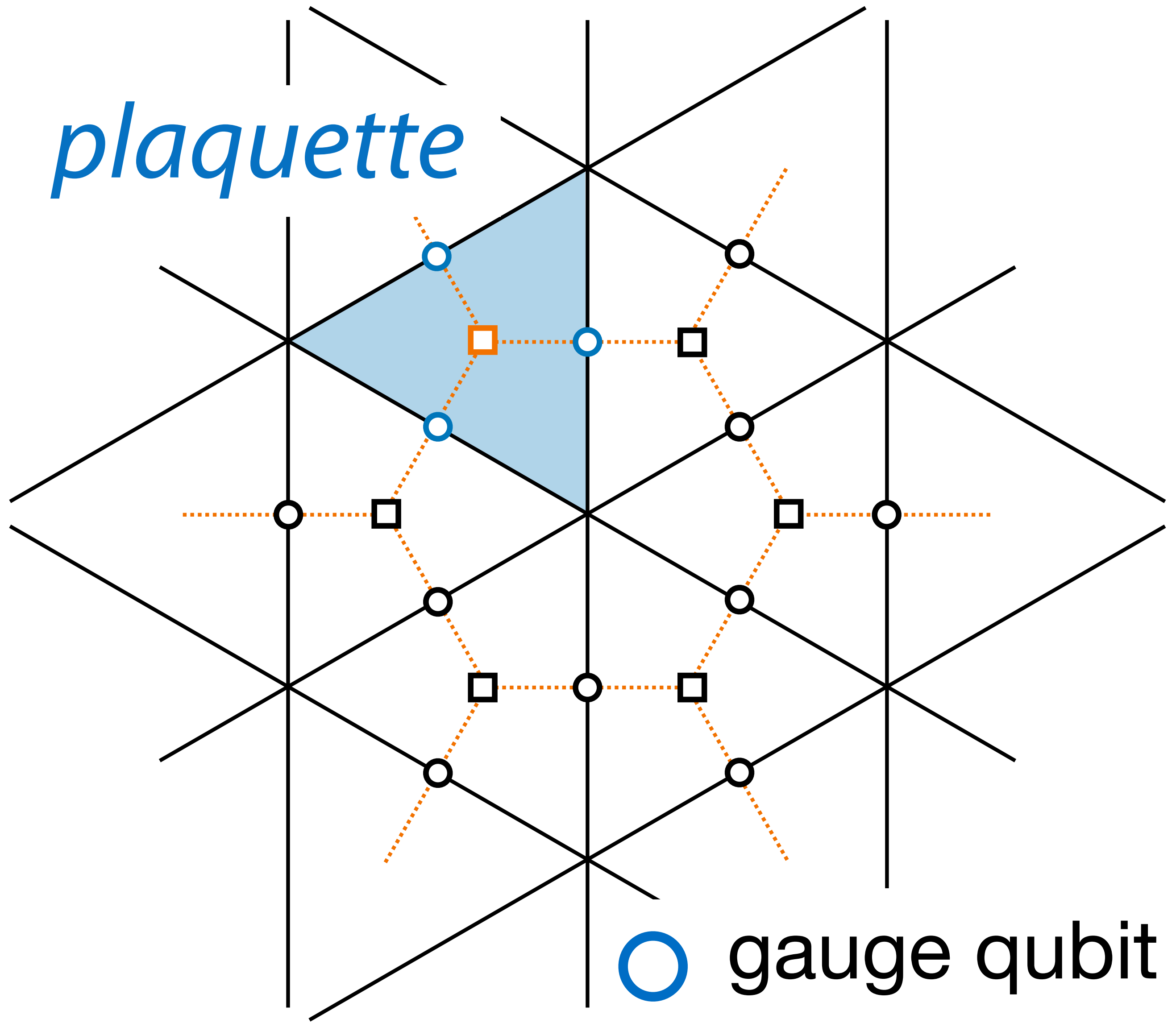
- ボソンのみのモデル
- 三角格子にボソンを配置

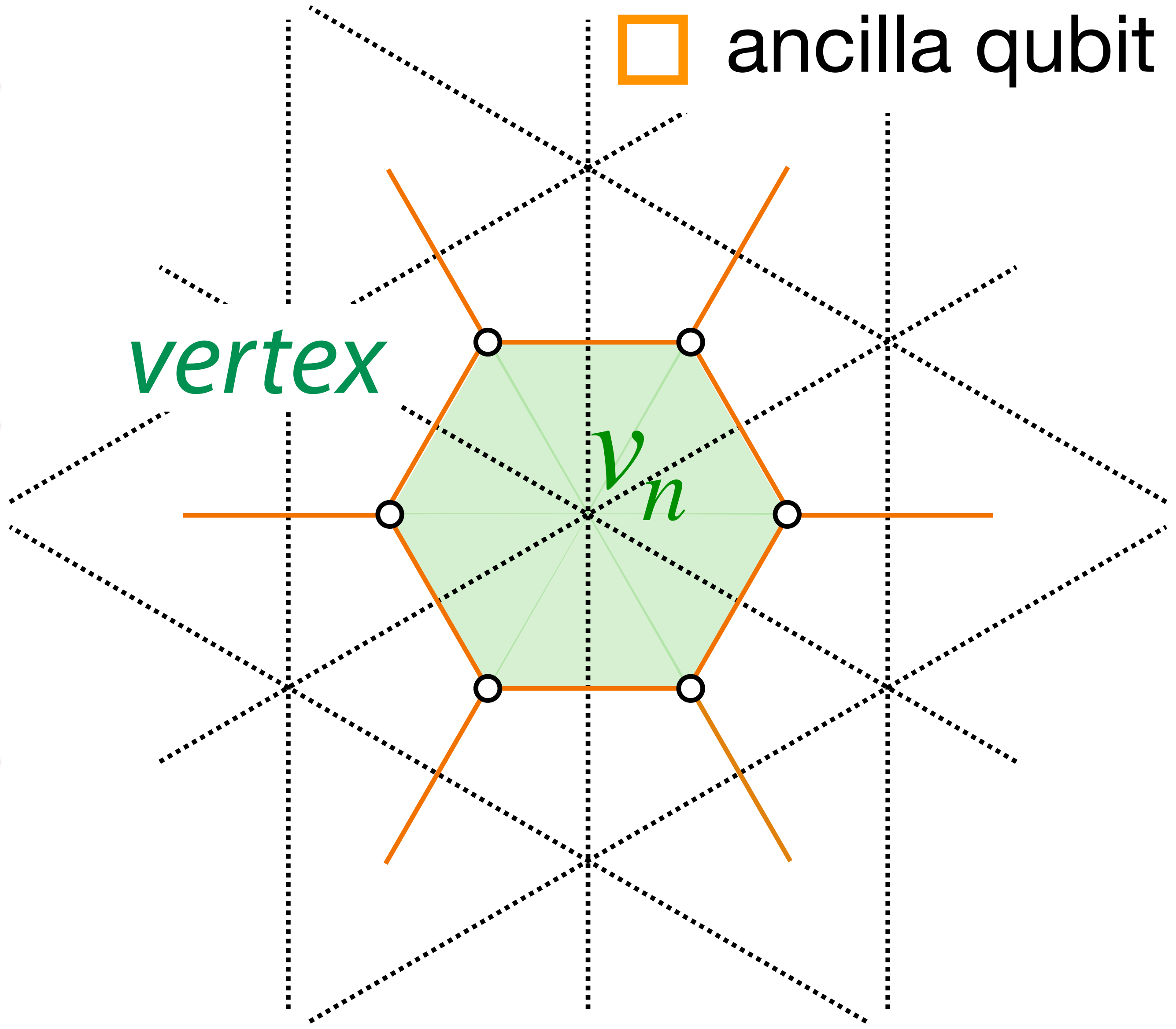
➡ **Heronの全156量子ビットを利用**

ibm_kawasaki (Heron r2 - 156 qubits)



Link qubits = dynamic d.o.f. Plaquette qubits = ancillae





三角格子を用いた先行研究：

- Cobos et al., [arXiv:2507.08088]
- Banarjee et al., [Phys. Rev. Res. 4, 023176 (2022)]

基底エネルギー測定の結果

156量子ビットモデル、ゲージ不変セクターでの基底エネルギー測定

- クリロフ部分空間の状態をIBM量子コンピュータで生成
- サンプリング中に起こるビット反転エラーをMiyabiで補正：
  - 最小重み完全マッチング（MWPM）
  - ゲージ対称性（ガウス則）

以下を入力とした、条件付き制限ボルツマンマシン（CRBM）による生成モデルで補正

- ガウス則演算子のシンドローム測定
- ノイズエラー評価用回路の測定

Preliminary

	$E_0(\lambda = 1.0)$	ΔE_{DMRG}
MWPM only	-115.92	2.84
MWPM + CRBM (N = 3, M = 6)	-117.10	1.66
DMRG	-118.76	0

論文を準備中

AIへの展望：量子回路の線形特性に対する古典学習

一般的な量子状態のダイナミクスを古典計算で完全に把握することは困難

有限個の$R_Z(\theta)$ゲートとクリフォードゲートからなる有界ゲート量子回路

➡ 量子回路の線形特性（期待値）を測定データから効率的に古典学習できるか？

AIへの展望：量子回路の線形特性に対する古典学習

一般的な量子状態のダイナミクスを古典計算で完全に把握することは困難

有限個の$R_Z(\theta)$ゲートとクリフォードゲートからなる有界ゲート量子回路

➡ 量子回路の線形特性（期待値）を測定データから効率的に古典学習できるか？

Du, Hsieh, Tao, Nat. Commun. 16, 3790 (2025)

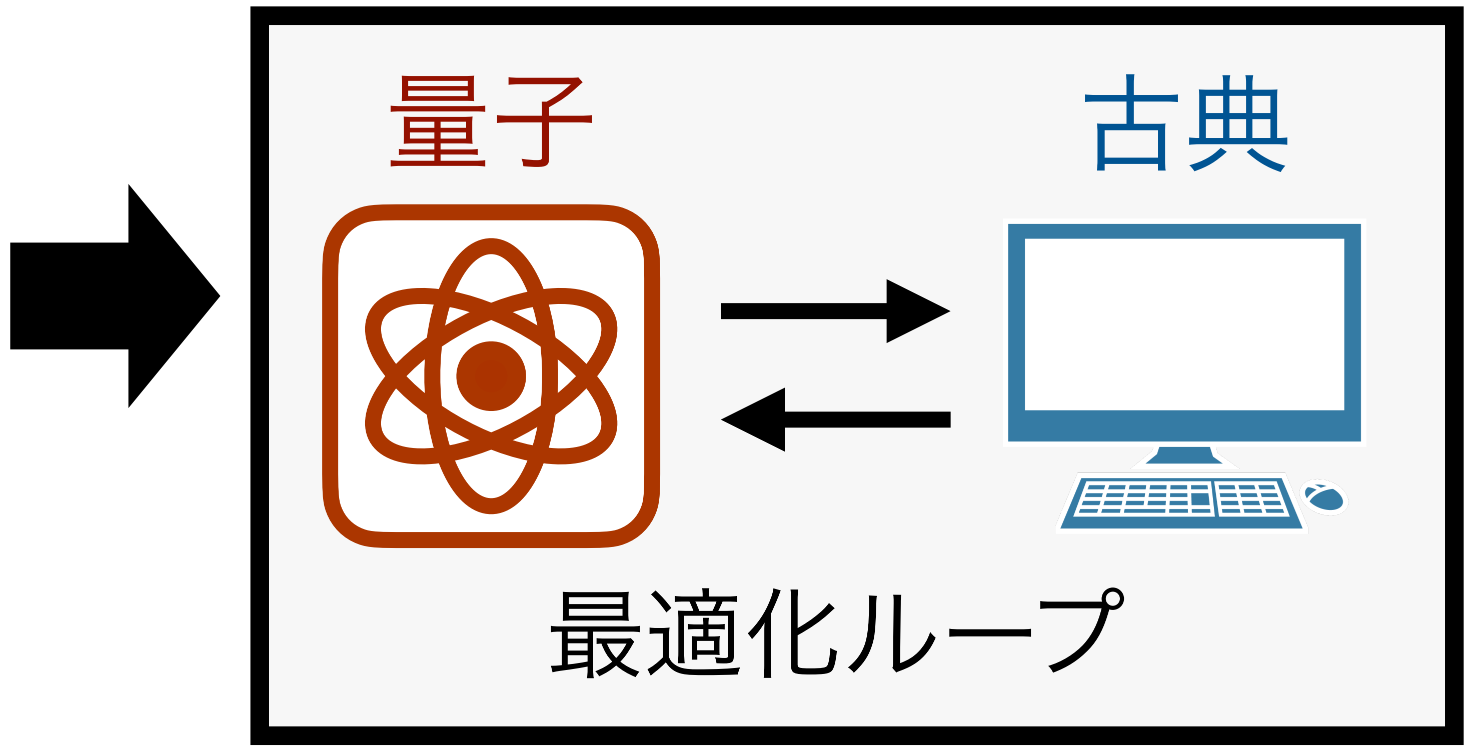
- 必要な学習データ数は、ゲート数dに対して線形（効率的）
- 学習や予測にかかる計算時間は、dに対して指数増大する場合がある（困難）

➡ **古典シャドウとカーネルベースの学習モデル**

- 古典シャドウによる期待値を三角関数で展開し、高周波成分を切り捨て
  ➡ 計算量を多項式時間に抑制可能
- 対象とする関数の勾配ノルムが有界であれば、多項式オーダーの計算時間とデータ数で学習可能

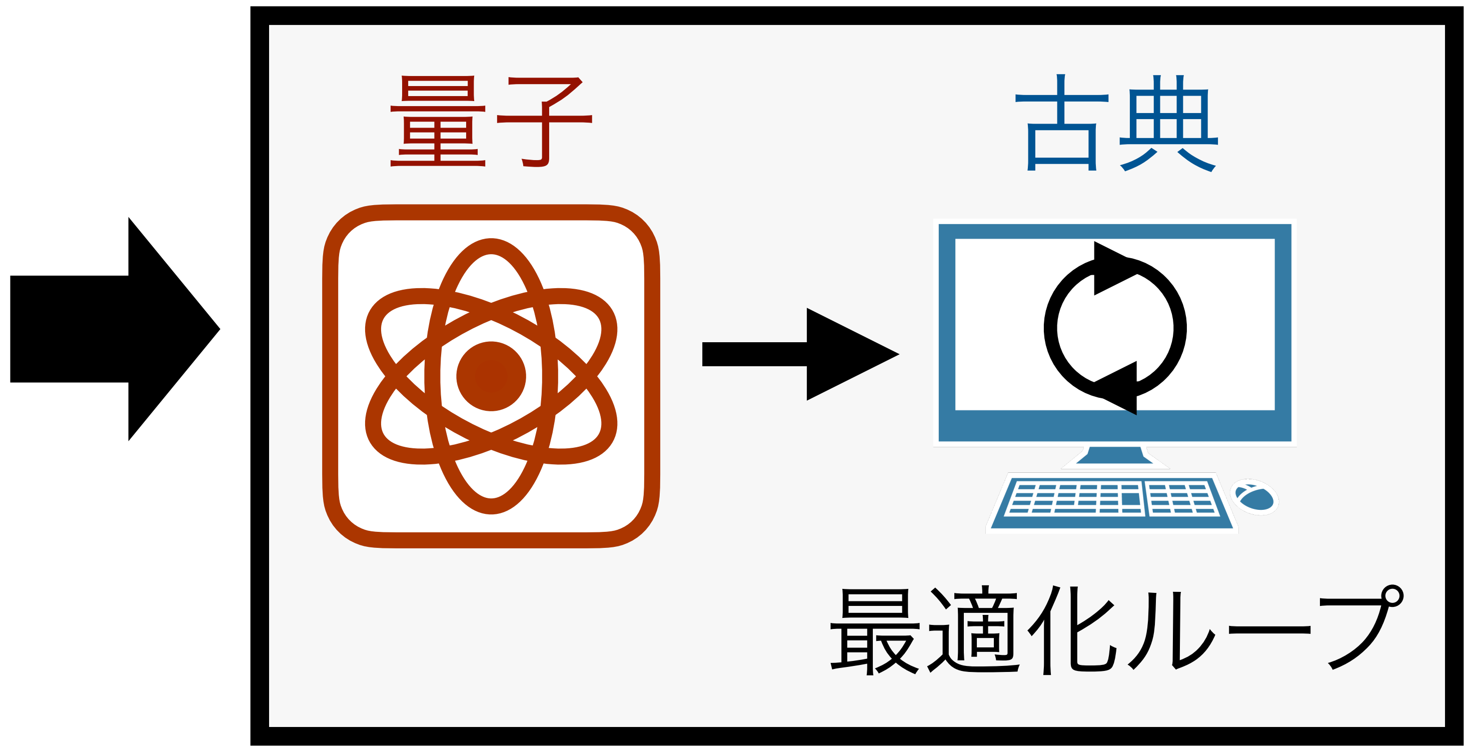
AIへの展望：量子回路の線形特性に対する古典学習

通常のVQEは、最適化ループごとに量子プロセッサへのアクセスが必要（コストが高い）



VQEのオフライン学習：

- VQE回路の出力データを量子デバイスから収集
- 古典学習モデルを最適化し、量子回路パラメータを決定



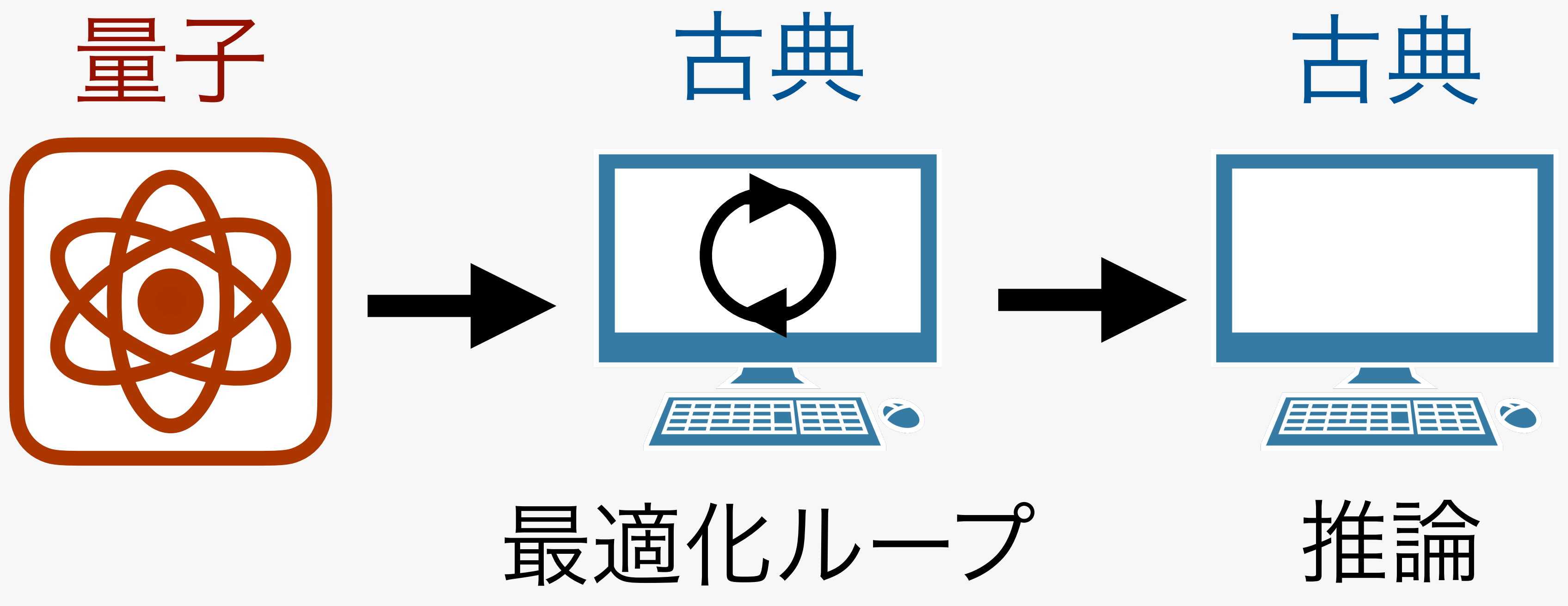
実験結果：

- 50量子ビットの横磁場イジング模型で、厳密解に近い基底エネルギーを達成
- 有限回の測定ショットでも高い計算精度を維持
- 多層パーセプトロンやカーネルリッジ回帰、ランダムフーリエ特徴量と比較し、顕著に低い予測誤差と高いエネルギー推定精度を実現

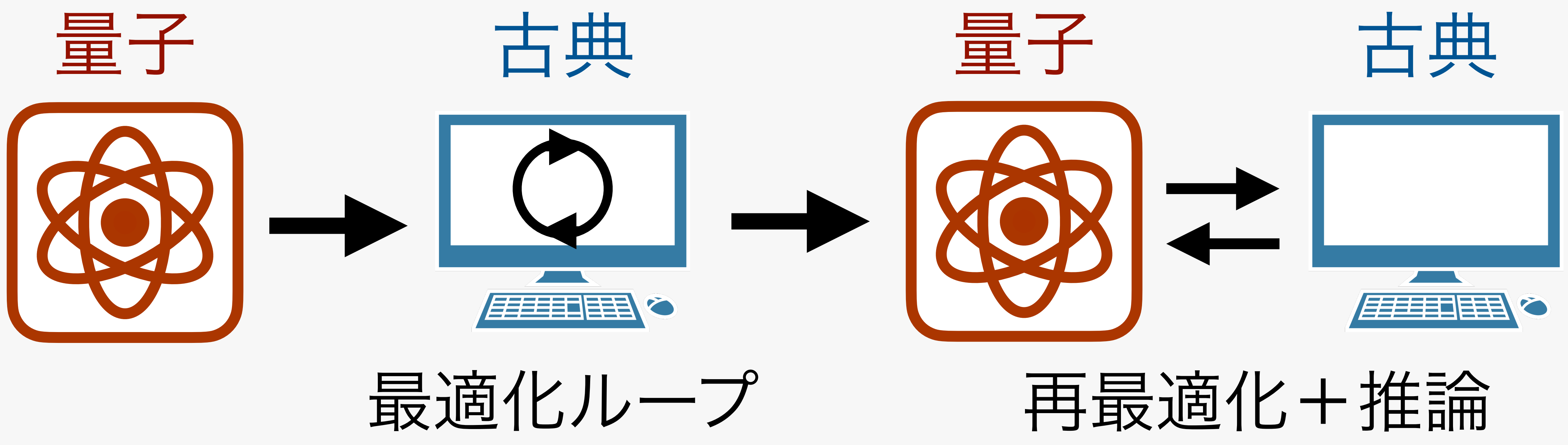
Du, Hsieh, Tao, Nat. Commun. 16, 3790 (2025)

AIへの展望：量子デバイスでの大規模推論への応用

1. HPC上での古典推論による基底エネルギーの推定



2. HPCでのVQEの事前学習 → パラメータの再最適化＋推論を量子計算機で実装



➡ HPC単体では難しい大規模量子系や、強くエンタングルした系での推論の可能性

量子コンピュータの進展に合わせた大規模系への拡張

まとめ

量子機械学習の進展と可能性について、私見を交えて紹介した

1）量子学習モデルの訓練可能性、汎化性の理解
2）問題に応じた量子ニューラルネットワークモデルの設計
3）量子コンピュータで基底状態を探索 ＋ HPCでエネルギーを推定
4）有界ゲート量子回路の期待値計算に対するHPC古典学習の可能性

HPCを活用した量子・古典ハイブリッドの潜在的ポテンシャルや、
AI応用への幅広い可能性を検討する好機にある