

量子機械学習における
データエンコーディングとモデル選択

2023 年度

矢野碩志

主 論 文 要 旨

No.1

報告番号	㊦ 乙 第	号	氏 名	矢野 碩志
主 論 文 題 名： 量子機械学習におけるデータエンコーディングとモデル選択				
(内容の要旨) 量子コンピュータは、従来の古典コンピュータでは現実的な時間で計算困難ないくつかの問題を効率的に解くことが可能であると示されている。量子計算が得意な分野として、素因数分解やデータベース探索などが有名である。加えて、より汎用的な応用を目指して、機械学習アルゴリズムの性能向上も期待されている。 本論文では、量子コンピュータ上で動作する機械学習アルゴリズムを量子機械学習アルゴリズムと呼ぶ。量子機械学習アルゴリズムが取り扱うデータは、古典コンピュータが取り扱う画像などの古典的データか、ハミルトニアン基底状態などの量子データのどちらであるかは問わない。このような設定のもとで、どのように量子機械学習アルゴリズムを設計すべきか、さらには果たして量子コンピュータを使うことで古典コンピュータ上で動作するアルゴリズムより優位な点があるのか、ということは量子機械学習における重要な研究課題である。後者については、学習理論などを通して優位性のある学習タスクの解明が進んでいるが、未だ優位性が証明されている事例は数少ない。前者についても、具体的な量子回路の構成に至るまで検討が進んでいる一方数多くの課題が残る。本論文では、この量子機械学習アルゴリズム設計における課題を解決すべく、二つの課題に着目した。 一つ目の課題はデータエンコーディングである。古典的データを扱う量子機械学習アルゴリズムでは、古典的データを量子コンピュータにどのように入力するかという課題が残っており、体系的な枠組みが未だ存在しない。バイナリ変数やカテゴリ変数は統計的な取り扱いが自明ではないが機械学習の実用場面では重要な役割を果たすことから、我々は古典的データの中でも離散的なデータに着目した。そして、離散的データの量子コンピュータへの入力方法として、量子通信理論で優位性が証明されている量子ランダムアクセス符号 (QRAC) という古典ビット列の符号化手法を用いることを提案した。QRAC は古典ビット列をより少ない数の量子ビットに符号化できるため、問題の難しさに応じてアルゴリズムが必要とする量子ビット数を削減することができる。論文中では数値実験を通して、QRAC を用いた量子機械学習アルゴリズムの性能を網羅的に調べている。 二つ目の課題はモデル選択である。古典・量子問わず機械学習アルゴリズムの重要な設計指針として、手元にあるデータだけに限らず未知のデータにも精度良く予測を行うために、いくつか考えられる候補の中から最も良いモデルを選択する必要がある。このような汎化性能を考慮したアルゴリズムの設計は、古典では古くから調べられているものの、量子機械学習においては未だ発展途上である。この観点から我々は、量子状態推定におけるモデル選択指標として、量子情報量規準という量を提案した。量子状態推定は量子機械学習にとって基礎的なタスクであり、未知の量子状態に対して測定を行いその量子状態を表す密度演算子の推定を目的とする。量子情報量規準は、推定された量子状態を量子相対エントロピーに基づいて評価することが可能な初めての量である。論文中では数値実験を通して、従来のモデル選択指標との比較を行っている。				

Thesis Abstract

No. 1

Registration Number	☒ "KOU" ☐ "OTSU" No. *Office use only	Name	Hiroshi Yano
Thesis Title Data encoding and model selection in quantum machine learning			
Thesis Summary Quantum computers are believed to efficiently solve some of the problems that are computationally hard for classical computers. The famous areas where quantum computers excel include prime factoring and database search. The performance of machine learning (ML) algorithms is also expected to be improved for more general applications. In this thesis, ML algorithms that run on quantum computers are referred to as quantum machine learning (QML) algorithms. QML algorithms takes as inputs both classical data, such as images handled by classical computers, and quantum data, such as the ground state of a Hamiltonian. Under this setting, how QML algorithms should be designed and whether QML algorithms really has any advantages over the classical counterparts are important themes in QML research. For the latter problem, there have been only a few learning tasks with the proven quantum advantage, but gradually more and more effort is being put into elucidating such tasks theoretically.. While the former problem has been investigated up to the specific circuit configuration, many issues remain. In this thesis, we focus on two issues for designing QML algorithms. The first issue is data encoding. For QML algorithms, there remains the challenge of how to input classical data into a quantum computer, for which no systematic framework yet exists. Since binary and categorical variables are non-trivial to handle statistically but play an important role in ML applications, we focus on discrete data among classical data. To encode such discrete data into quantum computers, we propose to use quantum random access coding (QRAC) with the provable advantage in quantum communication theory. Since QRAC defines an encoding of a number of bits into a smaller number of qubits, the number of qubits required for the QML algorithms can be reduced depending on the difficult of the learning task. We examine the performance of QML algorithms with QRAC through numerical experiments. The second issue is model selection. An important design guideline for both classical and quantum ML algorithms is to choose the best model among possible candidates in order to not only explain the observed data but also make accurate predictions for unknown data. Designing ML algorithms with consideration on their generalization performance has long been investigated classically, but it is still in the early stages in QML. For this perspective, we propose a quantity called quantum information criterion as a model selection metric in quantum state estimation. Quantum state estimation is a fundamental task in QML and aims at estimating a density operator from measurement outcomes on an unknown quantum state. A quantum information criterion is the first quantity that evaluates the estimated state based on quantum relative entropy. Numerical simulations are conducted to compare it with conventional information criteria.			