

# 量子機械学習の HEP応用

寺師 弘二

東京大学

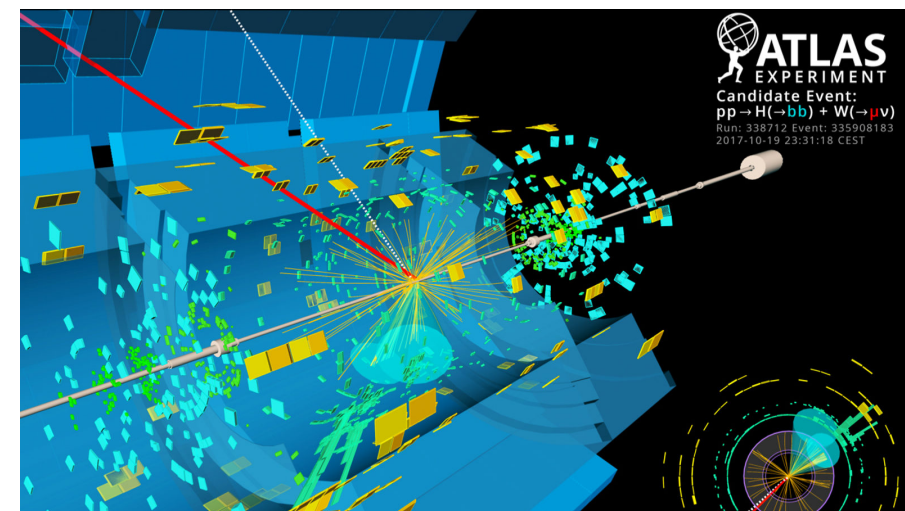
素粒子物理国際研究センター

2020年8月12日

新テラスケール研究会

# 量子コンピューティングと 高エネルギー物理

- 自然界のミクロな現象は量子力学の法則に従う
- 素粒子実験は量子現象を直接プローブする
- 高エネルギー実験は多くの計算資源を必要とする



➡ 高エネルギー実験での量子コンピューティングの応用を考える

量子コンピューティング：

- ▶ 特定の問題について、指数関数的な速度向上が期待できる
- ▶ 広大な(複素)量子空間でのデータ表現が可能

10(50, 300)量子ビット ➡  $\sim 10^{3(15, 90)}$ の状態を表現

現在~近い将来の(NISQ)量子コンピュータで、古典計算を上回る性能を役に立つ問題で実証することが課題

# 量子計算

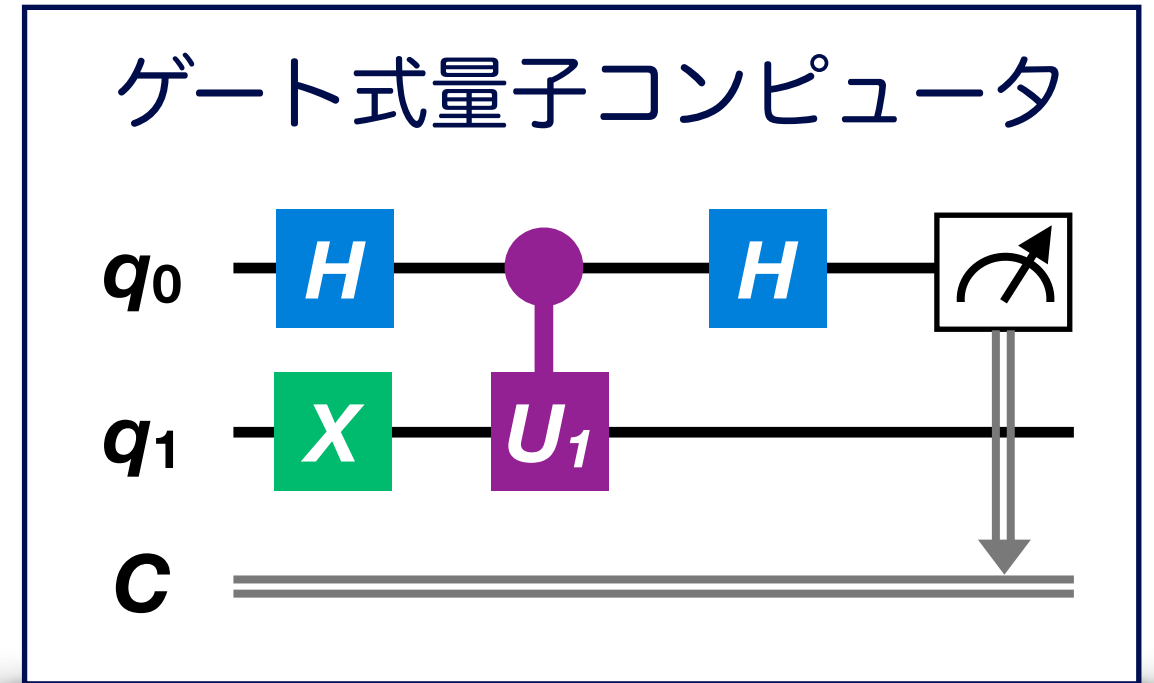
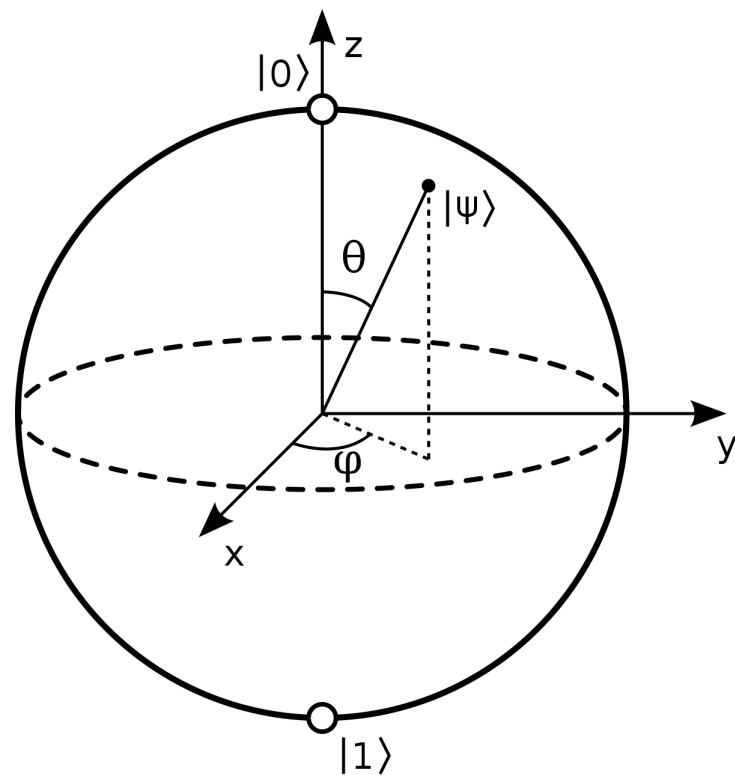
量子ビット = 量子計算の基本ユニット :

- 2準位を持つ量子系
- $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の任意の重ね合わせ状態を表現
- 状態はユニタリー演算(ゲート)で変換

Block球での量子状態の表現 :

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma}(\cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle)$$

- 角度 $(\theta, \phi)$ で重ね合わせ状態を表す
- グローバルな位相 $\gamma$ は測定には寄与しない



量子ゲートで状態を変換 :

- 1, 2量子ビットゲート
- $2^N \times 2^N$ ユニタリー行列で表現

Operator	Gate(s)	Matrix
Pauli-X (X)		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Hadamard (H)		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Controlled Not (CNOT, CX)		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$



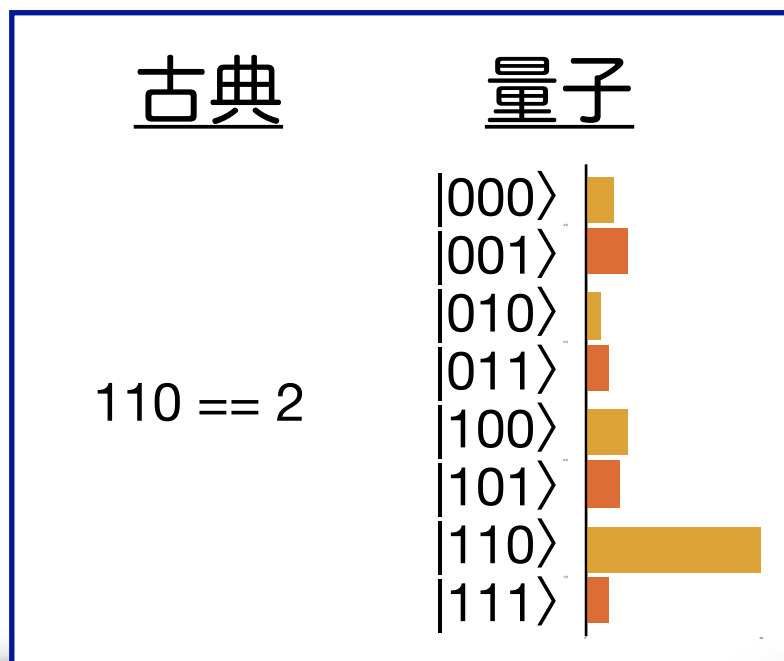
# 量子計算の特徴

量子アルゴリズム → 量子ゲートを組み合わせた量子回路で構成  
古典アルゴリズムとは異なる原理が必要:

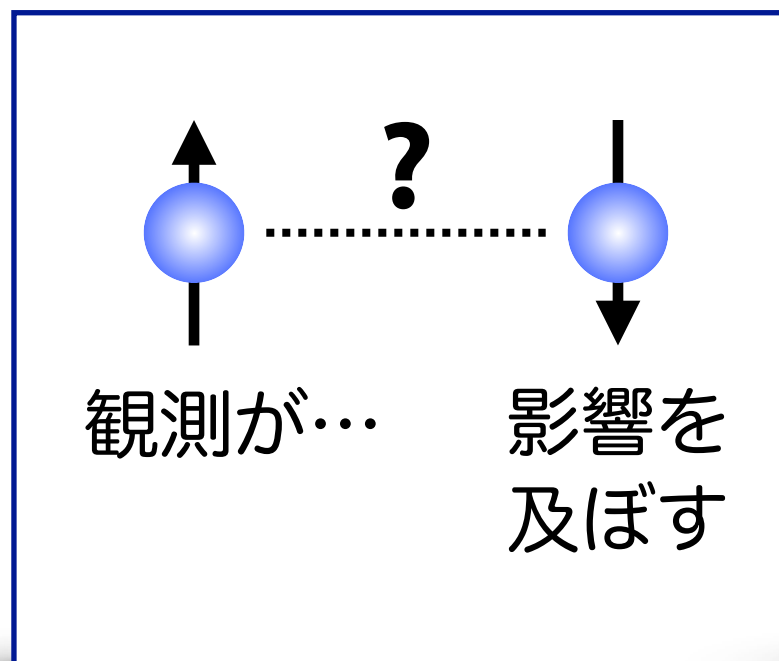
▶  $N$ -量子ビットの測定は、 $N$ -古典ビットの情報を与えるだけ…

量子加速の鍵を握るのは…

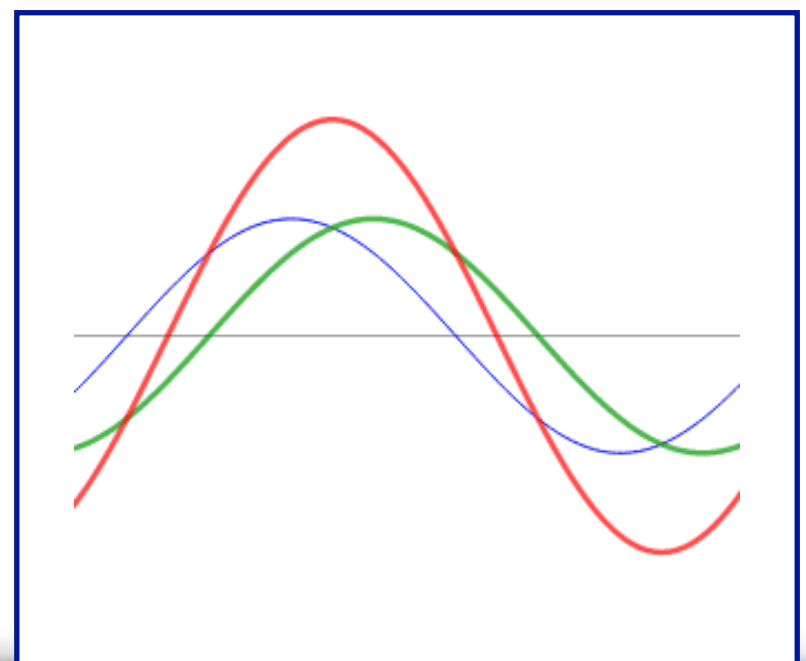
重ね合わせ



量子もつれ



量子干渉



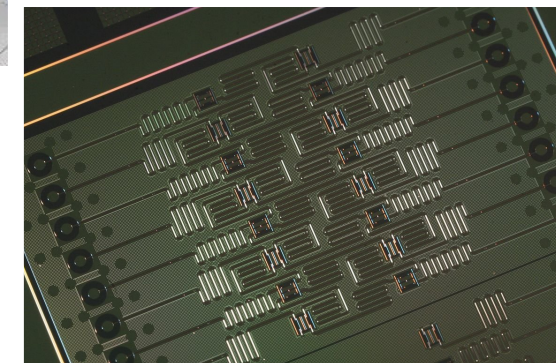
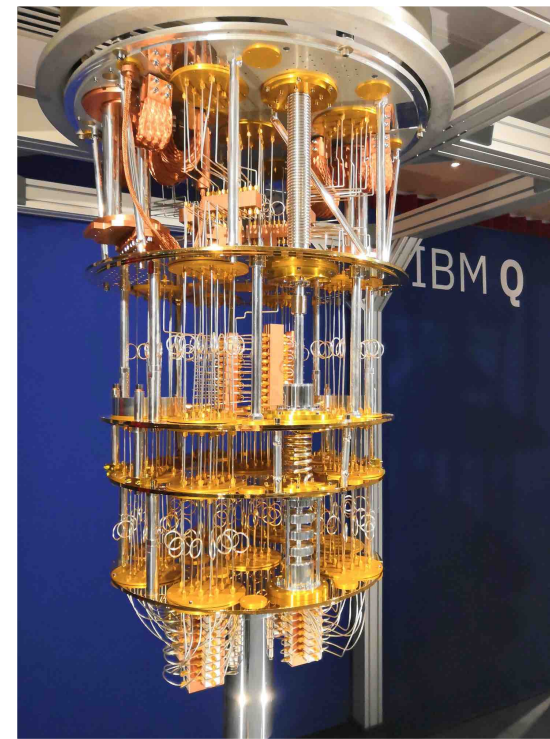
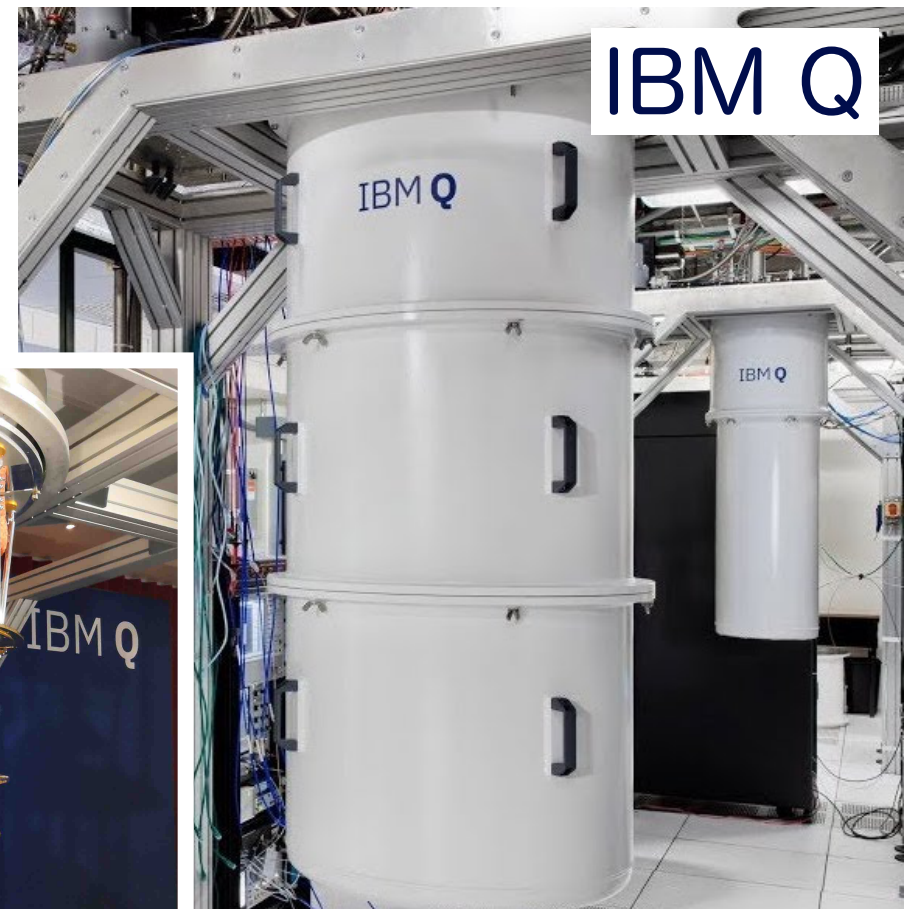
➡  $2^N$ 個の可能性の中から、量子特有の性質を使って正しい答えを得る確率を上げる工夫が必要

# IBM 量子コンピュータ

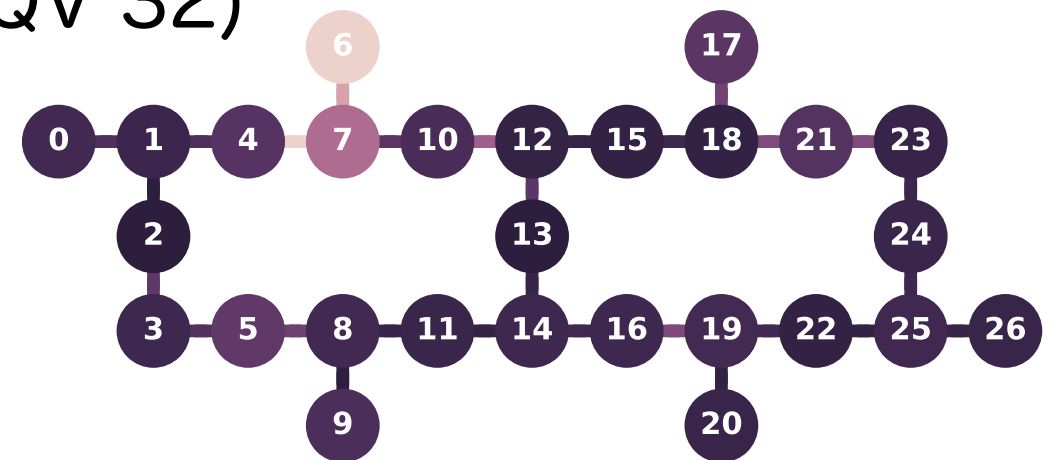
超伝導量子ビットを用いた  
量子コンピュータ

- 2016年から公開
- 現在5/15/20/27/28/53量子ビットのシステムが稼働
- 量子ビットの配置・結合はシステムごとに異なる
- コヒーレンス時間  $\sim \mathcal{O}(10) \mu s$
- 量子ゲートエラー率 (IBM Q Paris):  
Hadamardゲート =  $5 \times 10^{-4}$   
CNOTゲート =  $1.4 \times 10^{-2}$

毎年約2倍性能が向上している  
HL-LHCが動く頃には $>100$ 倍?



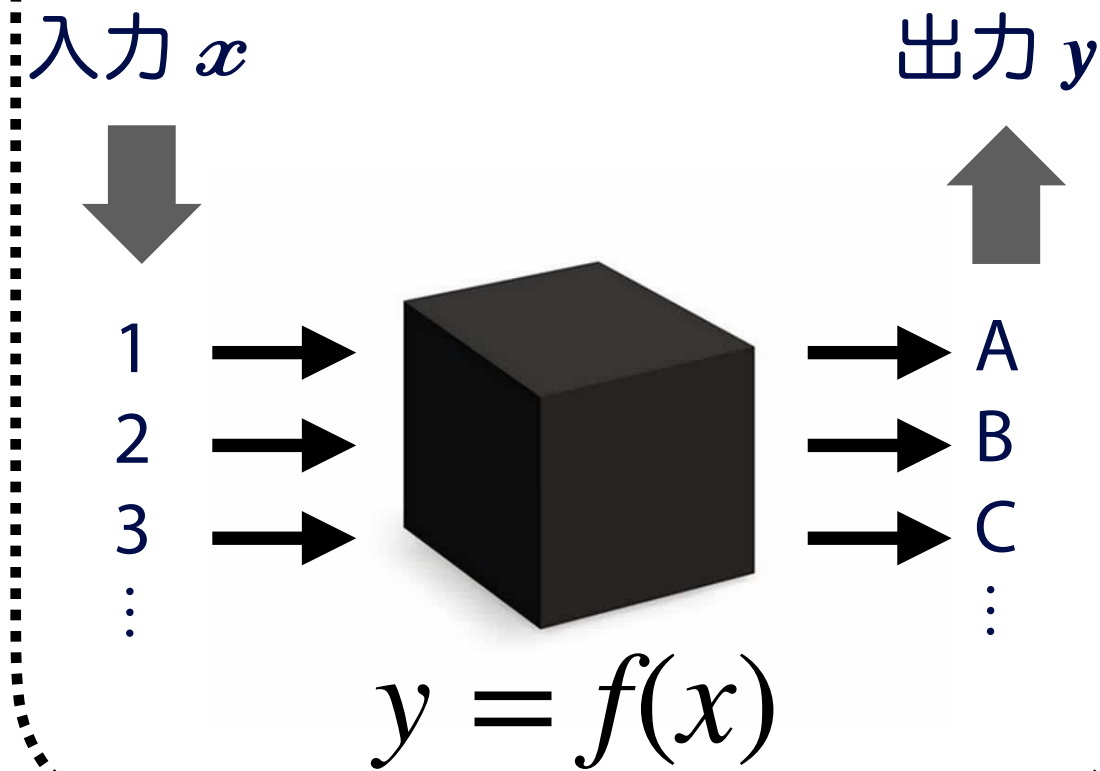
IBM Q Paris  
(QV 32)



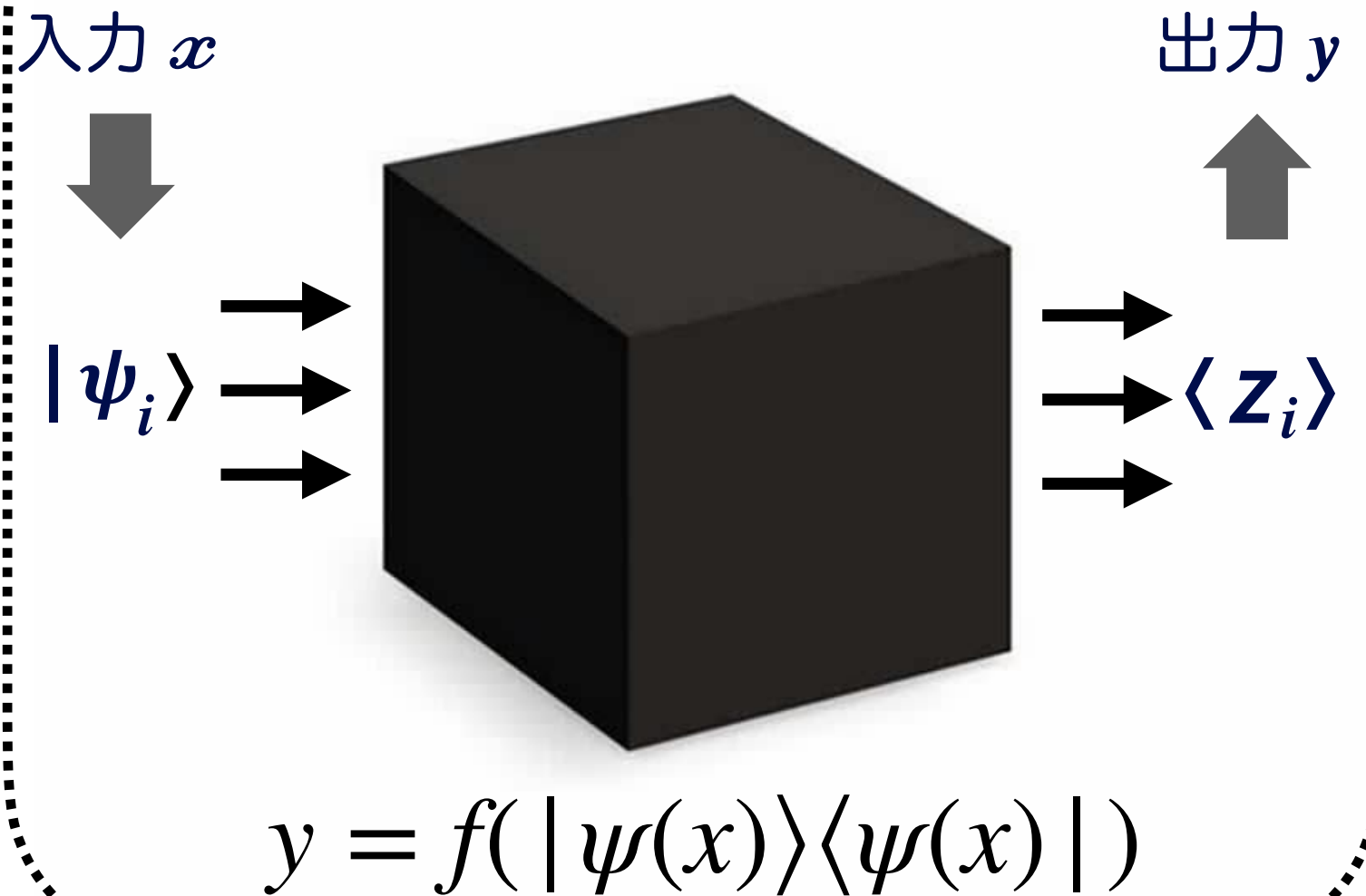
# 機械学習への応用

入力  $x$  と出力  $y$  の関係  $f$  を学習する

通常の(古典)機械学習



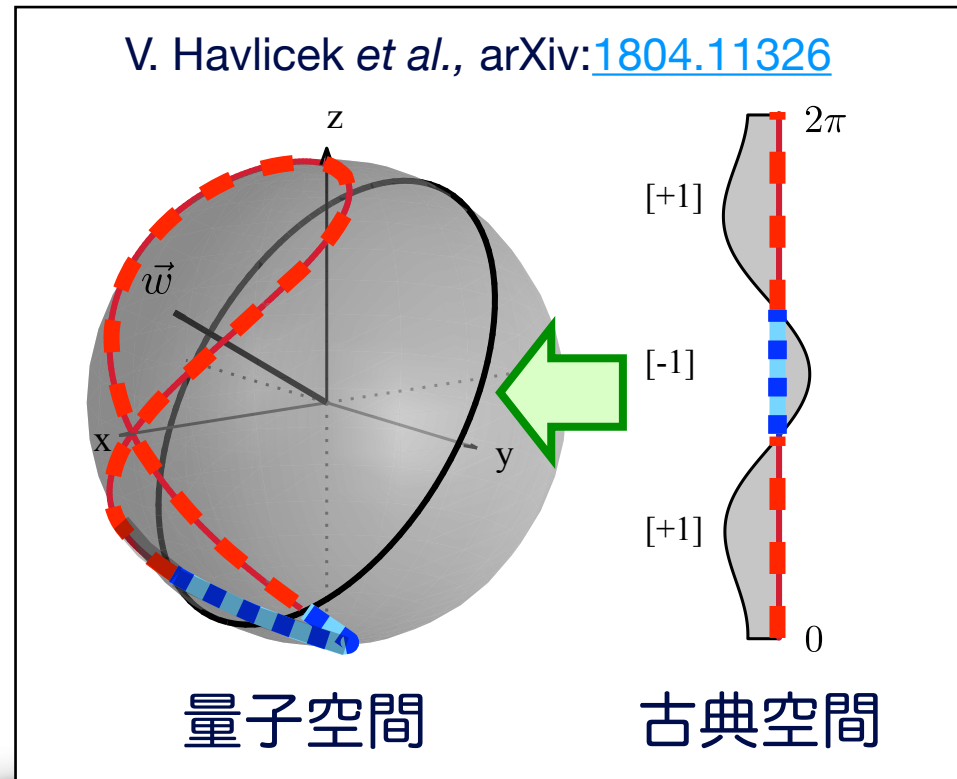
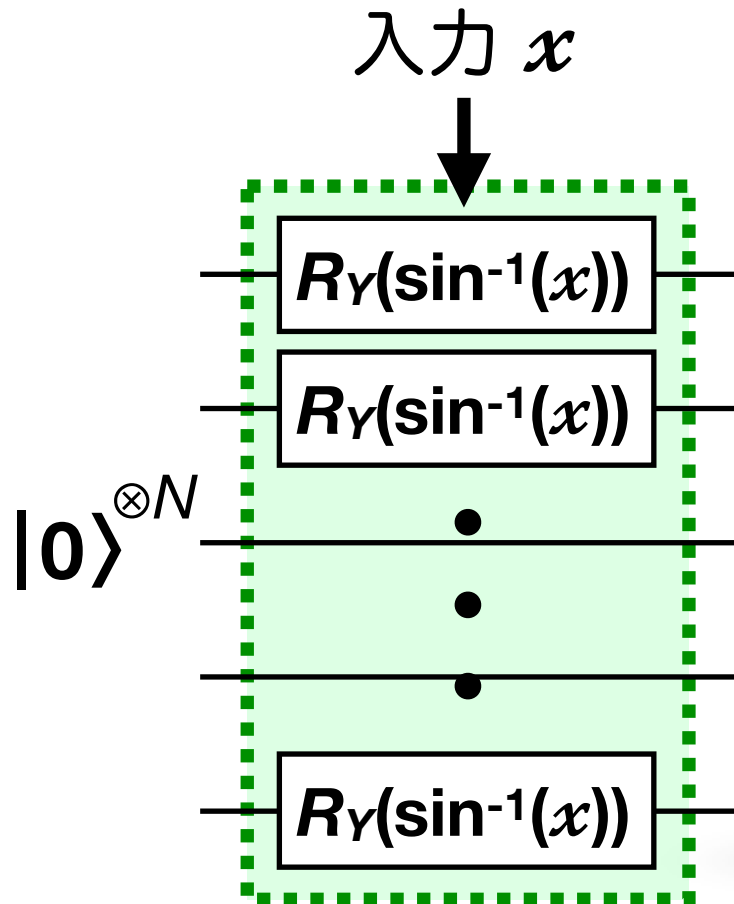
量子機械学習



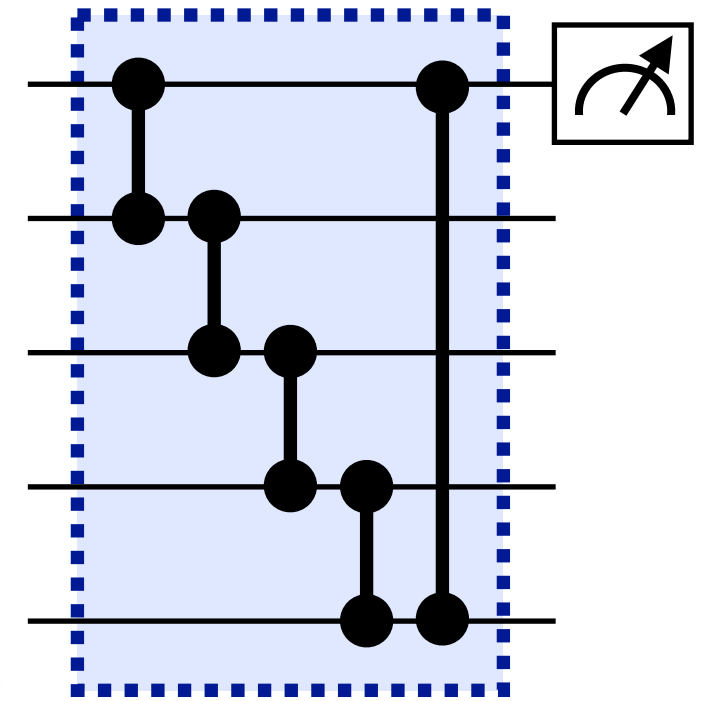
量子ヒルベルト空間が持つ表現能力の豊かさを活用することで、学習能力を飛躍的に向上できる可能性を持つ

# 量子状態空間での表現

$N$ -量子ビット状態に一次元変数 $x$ をエンコードする場合を考える



Entanglingゲート



$x$ 入力後の $N$ -量子ビット密度演算子:

$$\rho_N = \frac{1}{2^N} \bigotimes_{i=1}^N \left[ I + xX_i + \sqrt{1-x^2}Z_i \right]$$

$X^{\otimes N}$ の観測量には $x$ の $N$ 次表現が自然に含まれる  
( $x$ が $d$ 次元変数になれば、 $\mathcal{O}(x^{Nd})$ 表現へと拡張)

$X^{\otimes N}$ の状態をエンタングルさせて、単一量子ビットの観測量に変換

→ 非線形性

→ 指数関数的な表現能力

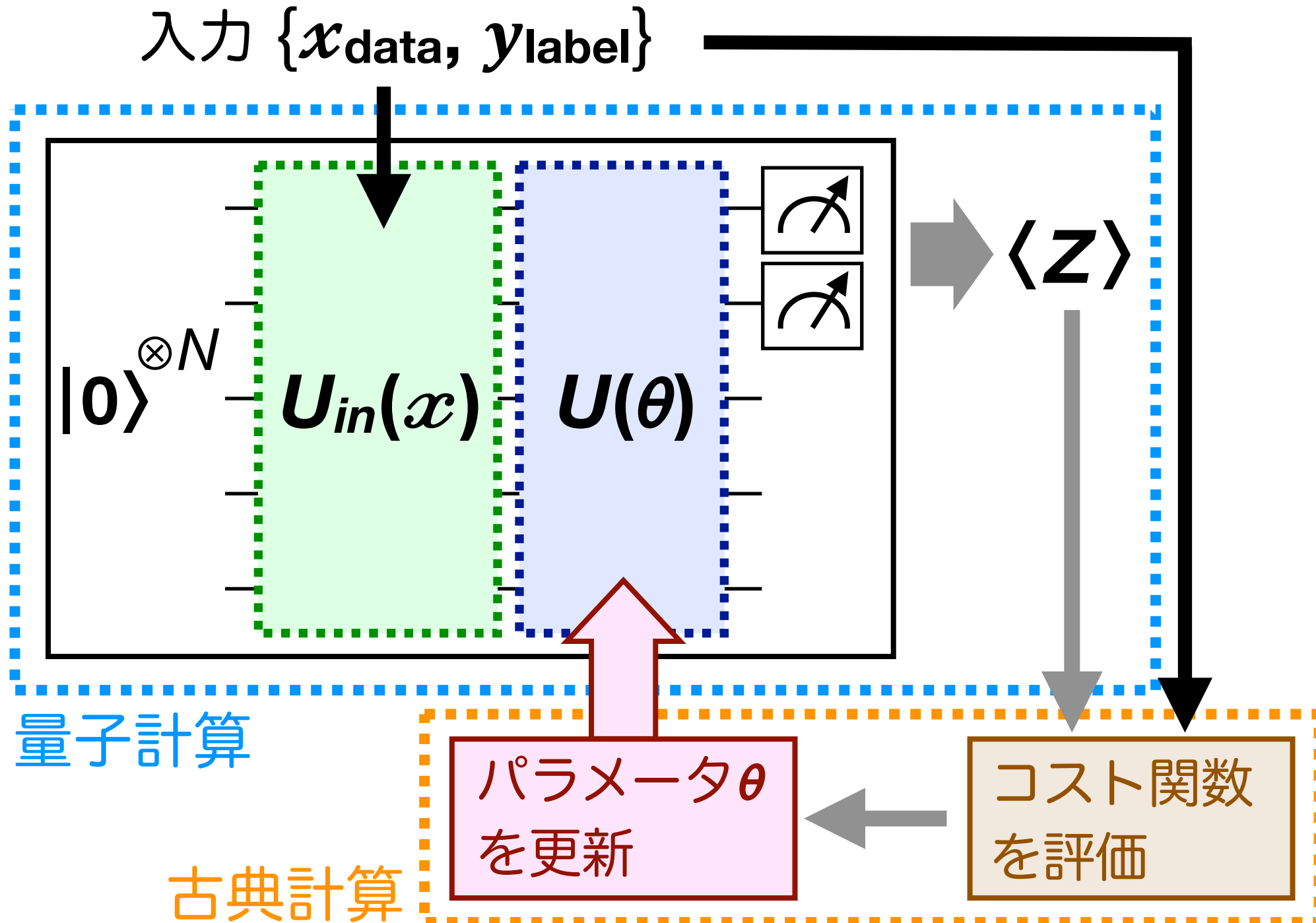
# ゲート式量子機械学習アルゴリズム

変分量子回路を使った学習

量子-古典ハイブリッドアルゴリズム

V. Havlicek *et al.*, arXiv:[1804.11326](https://arxiv.org/abs/1804.11326)

K. Mitarai *et al.*, arXiv:[1803.00745](https://arxiv.org/abs/1803.00745)



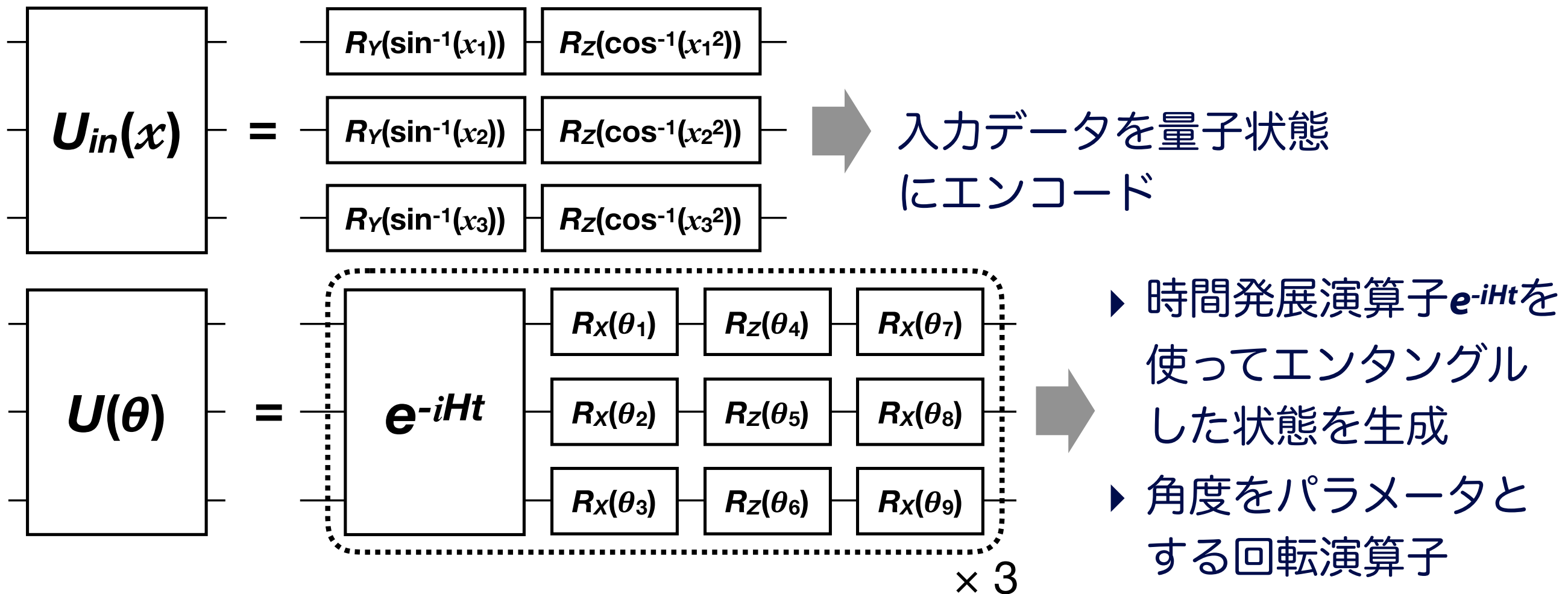


# 変分量子回路

K. Mitarai et al.,  
arXiv:[1803.00745](https://arxiv.org/abs/1803.00745)

[Qulacs](#)シミュレータを使って実装

C/C++ベースのシミュレータ+Pythonインターフェース

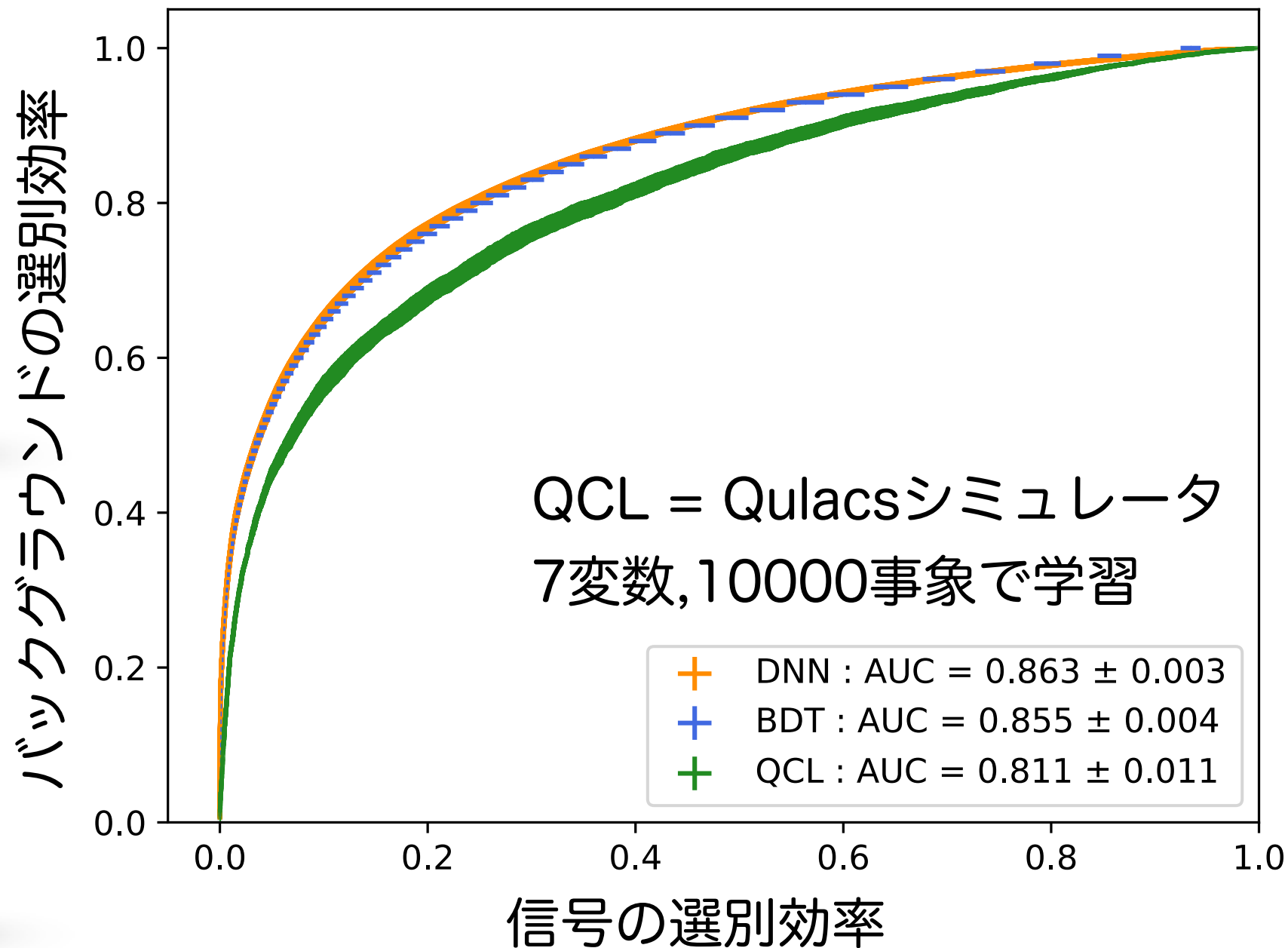
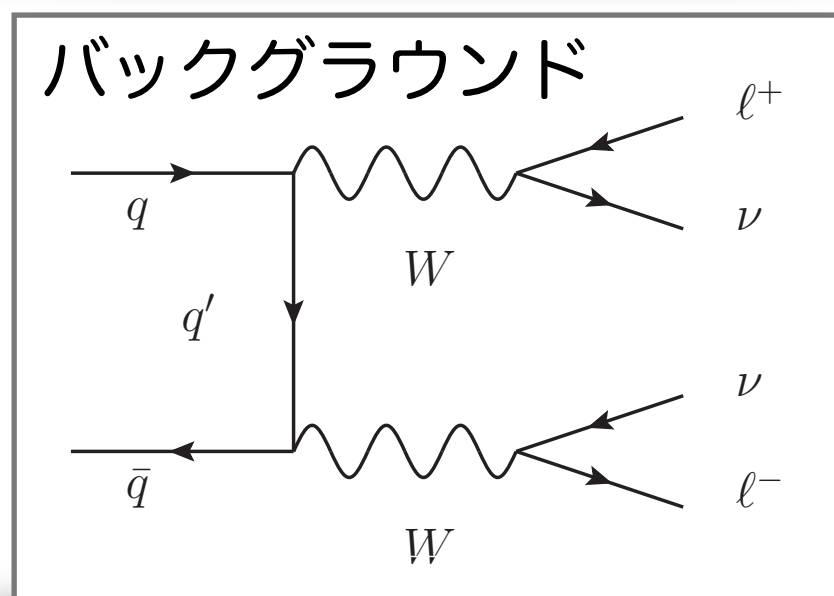
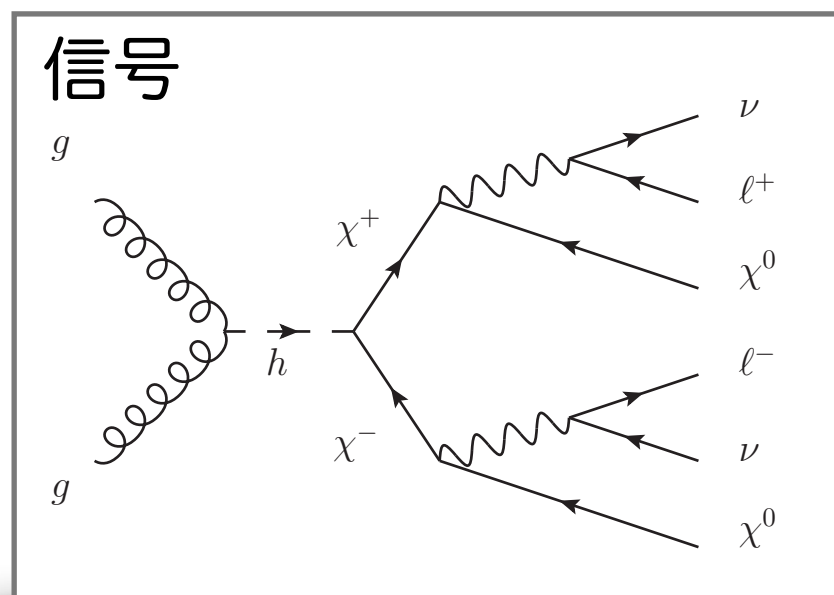


- ▶  $U(\theta)$ からの出力状態をパウリZ演算子を使って測定
- ▶ クロスエントロピーをコスト関数として使う
- ▶ コストを最小にするようにCOBYLAでパラメータを最適化

# 量子機械学習の結果 (1)

KT, M. Kaneda, T. Kishimoto,  
M. Saito, R. Sawada, J. Tanaka  
arXiv:[2002.09935](https://arxiv.org/abs/2002.09935)

## 超対称性粒子と標準模型バックグラウンドの分類

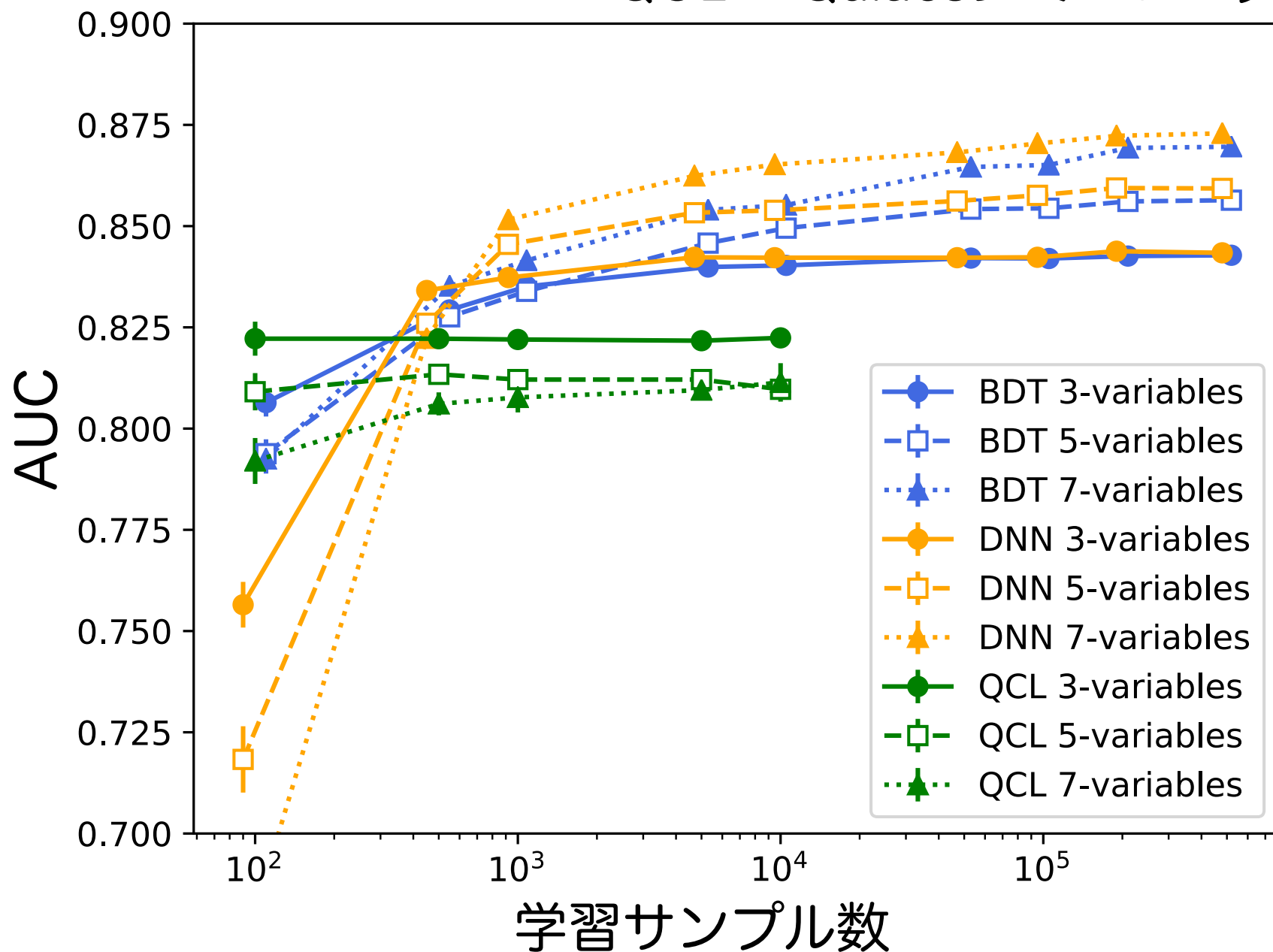


### ブースト決定木(BDT)と深層学習(DNN)と比較

- ▶ BDT : 勾配ブースト, 最大深さ = 1-3, 10-1000決定木
- ▶ DNN : 2-6隠れ層, 16-25ノード, RELU, Adam,  $\epsilon_{\text{learning}}=0.001$

# 量子機械学習の結果 (2)

QCL = Qulacsシミュレータ



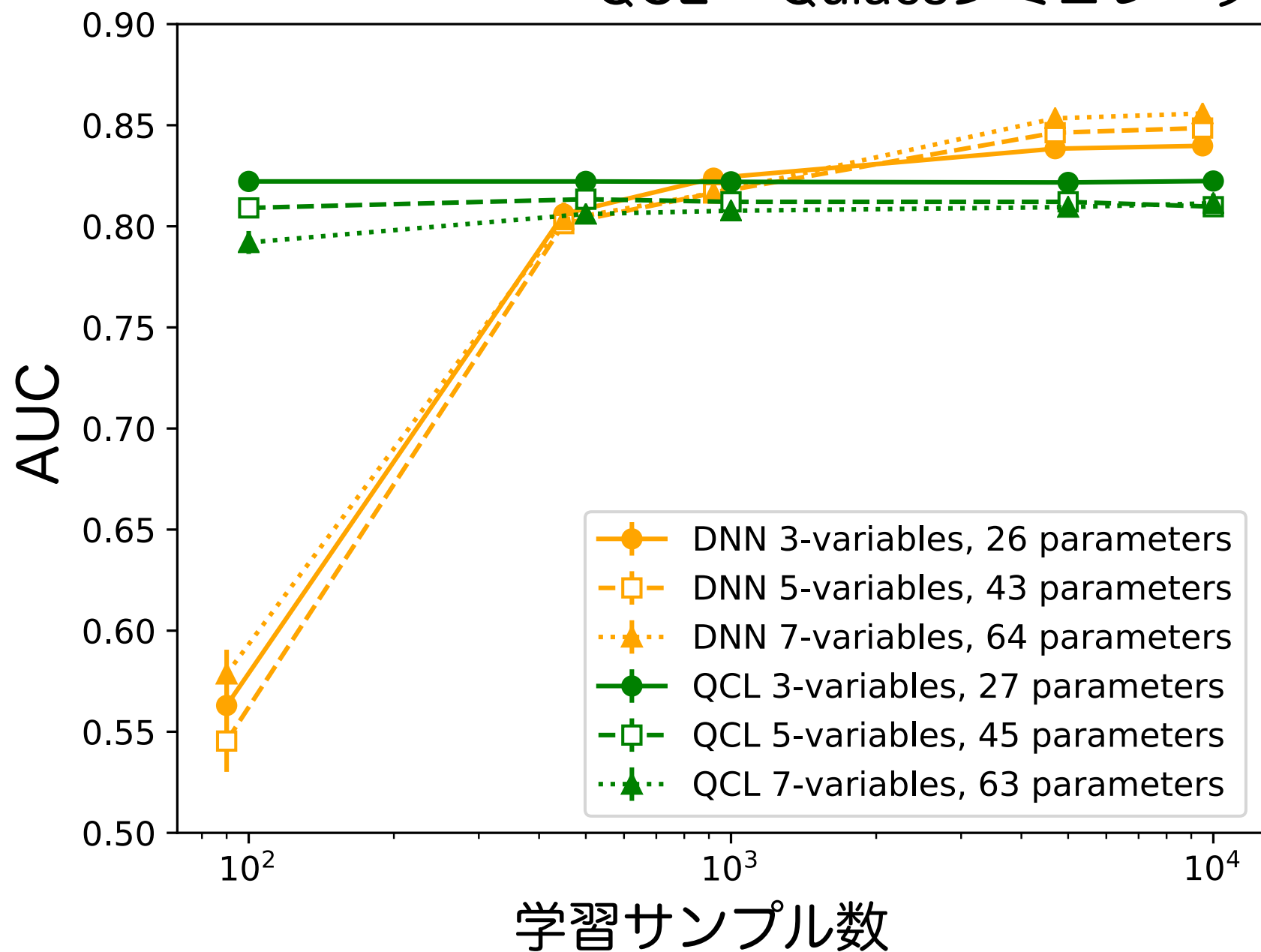
- ▶ BDTとDNNモデルは過学習を避けるため、各学習サンプル数ごとに最適化
- ▶ サンプル数が多い時はBDTとDNNが優秀

変数の数を増やすとQCLの性能が悪化する理由は、変数の選択に関係

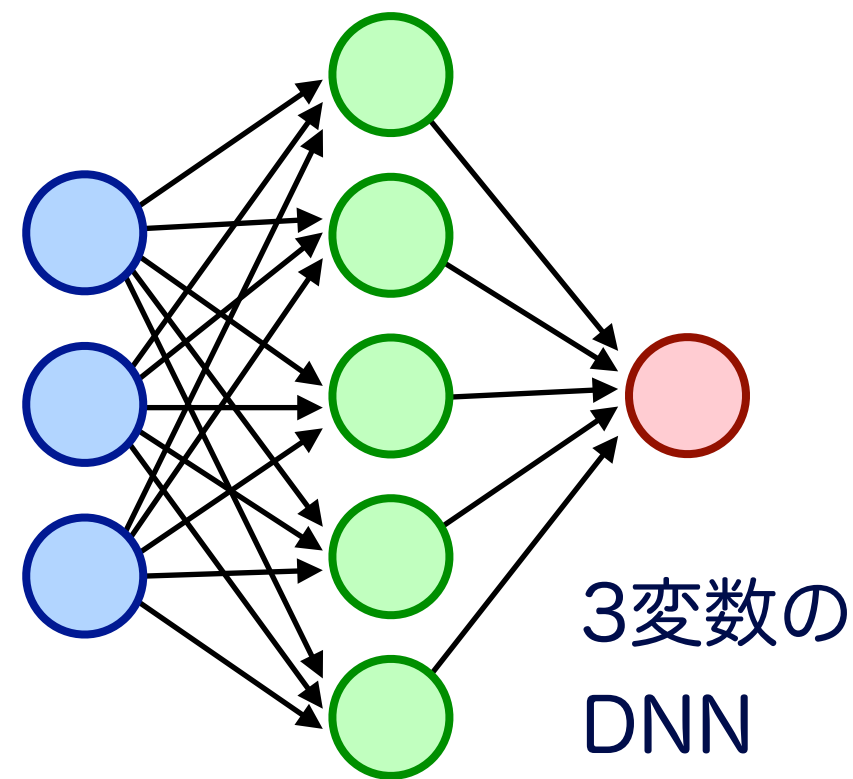
➡ 量子機械学習は、少ない変数で少量の学習サンプルを使う場合はBDT/DNNと同等の性能を持つ

# 量子機械学習の結果 (3)

QCL = Qulacsシミュレータ



同数のパラメータを持つ  
DNNモデルとの比較

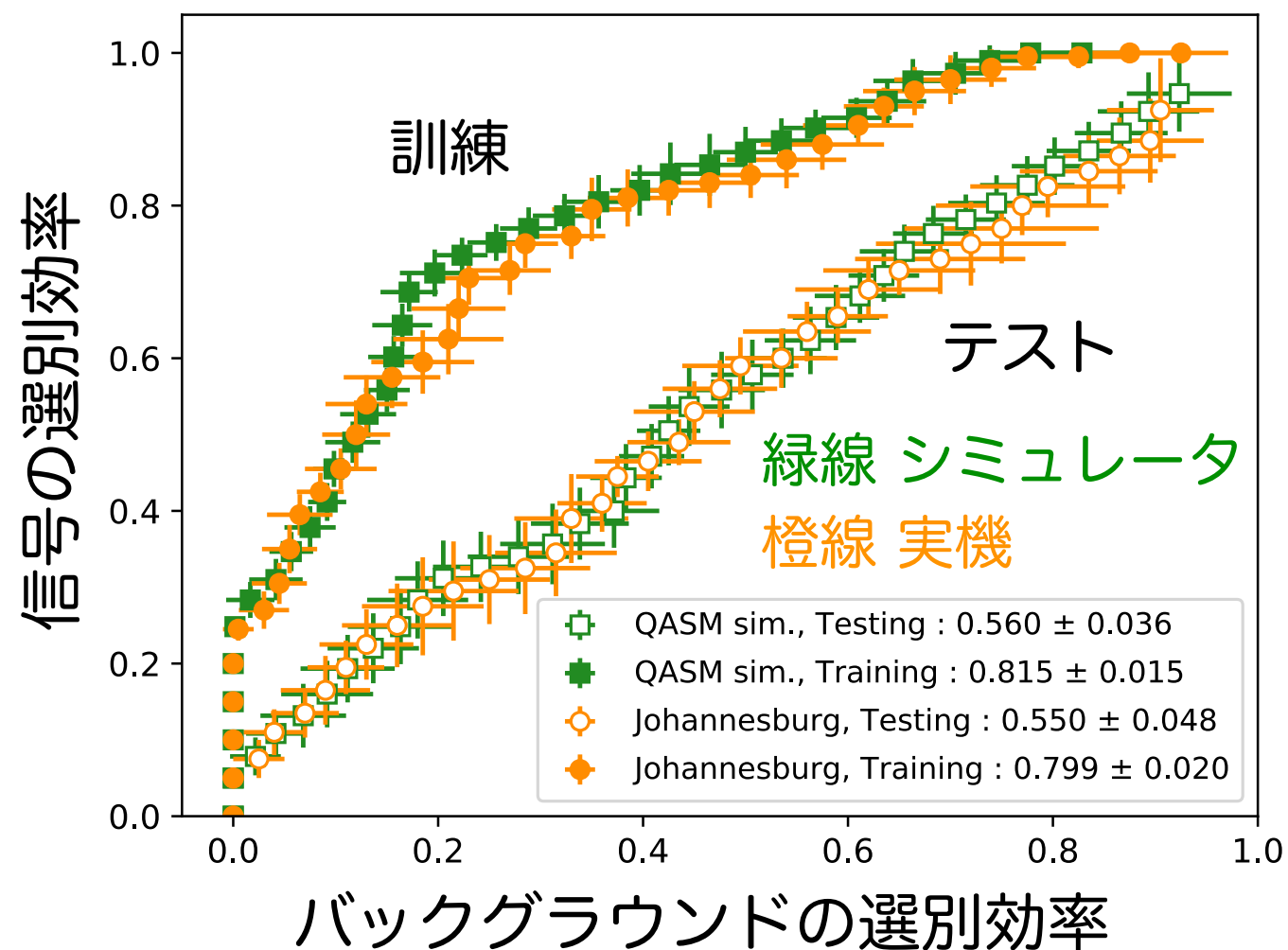
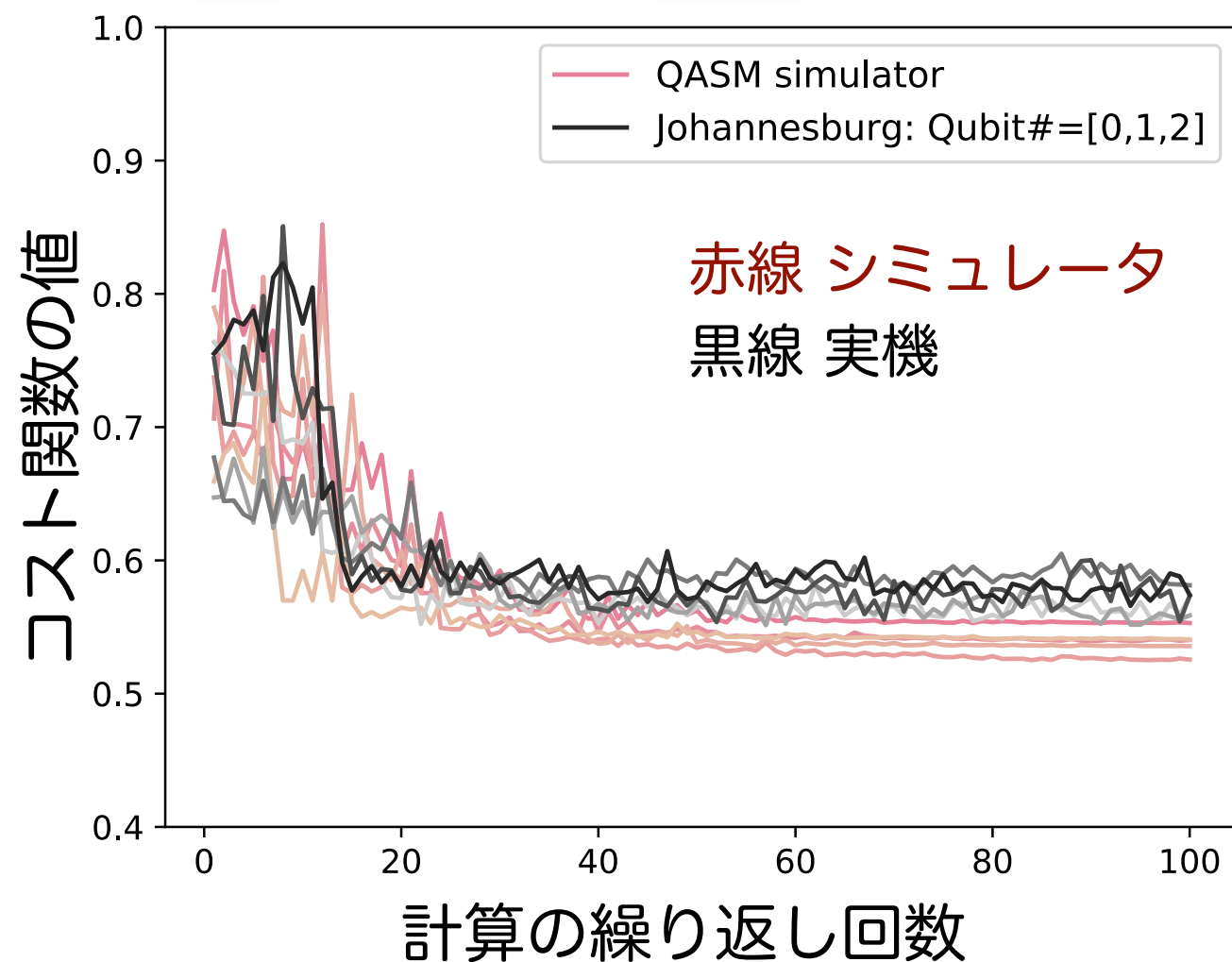


➡ パラメータ数が同じ場合、少量の学習サンプルでは  
量子機械学習はDNNを上回る性能を持つ可能性がある



# 実機での結果 (1)

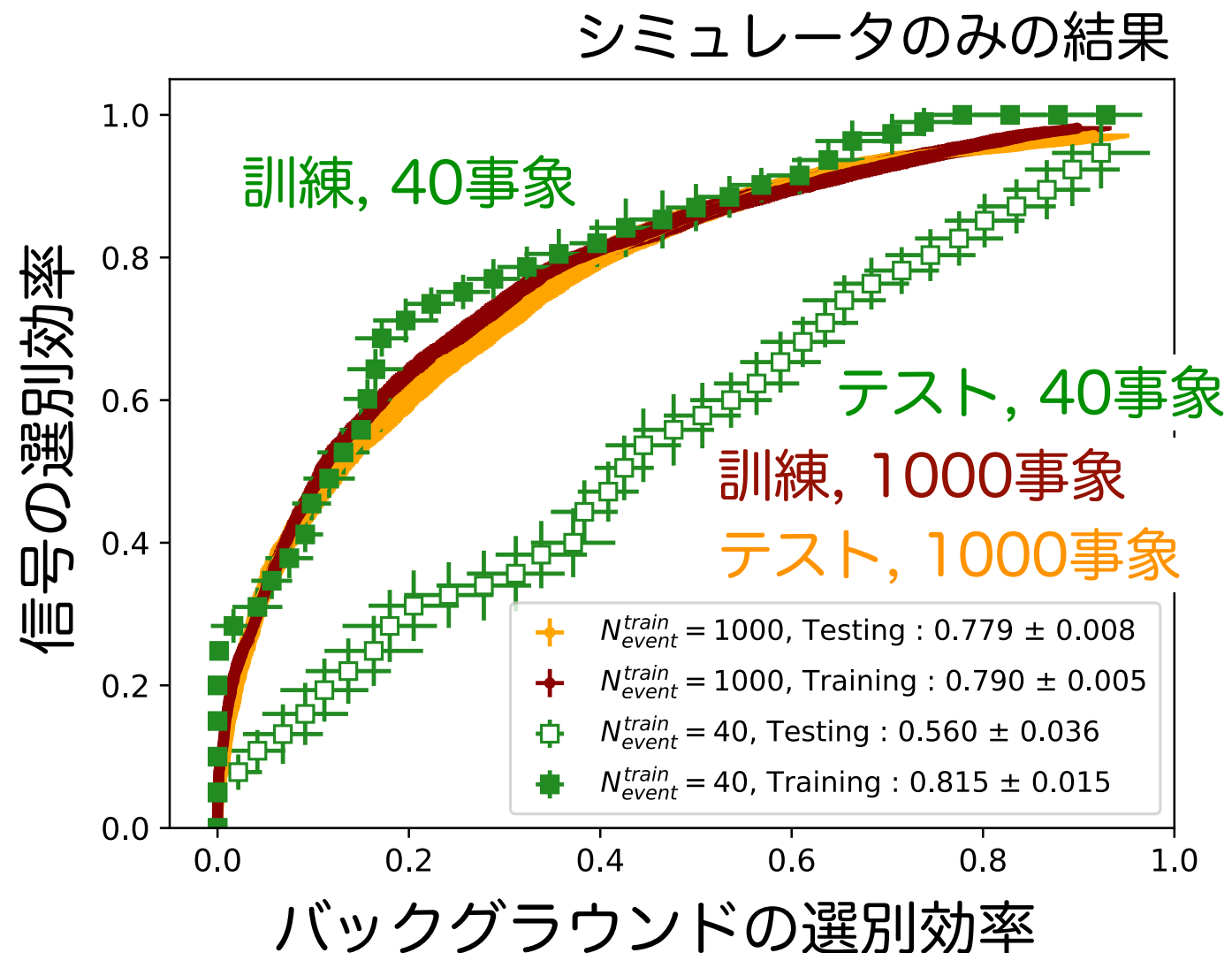
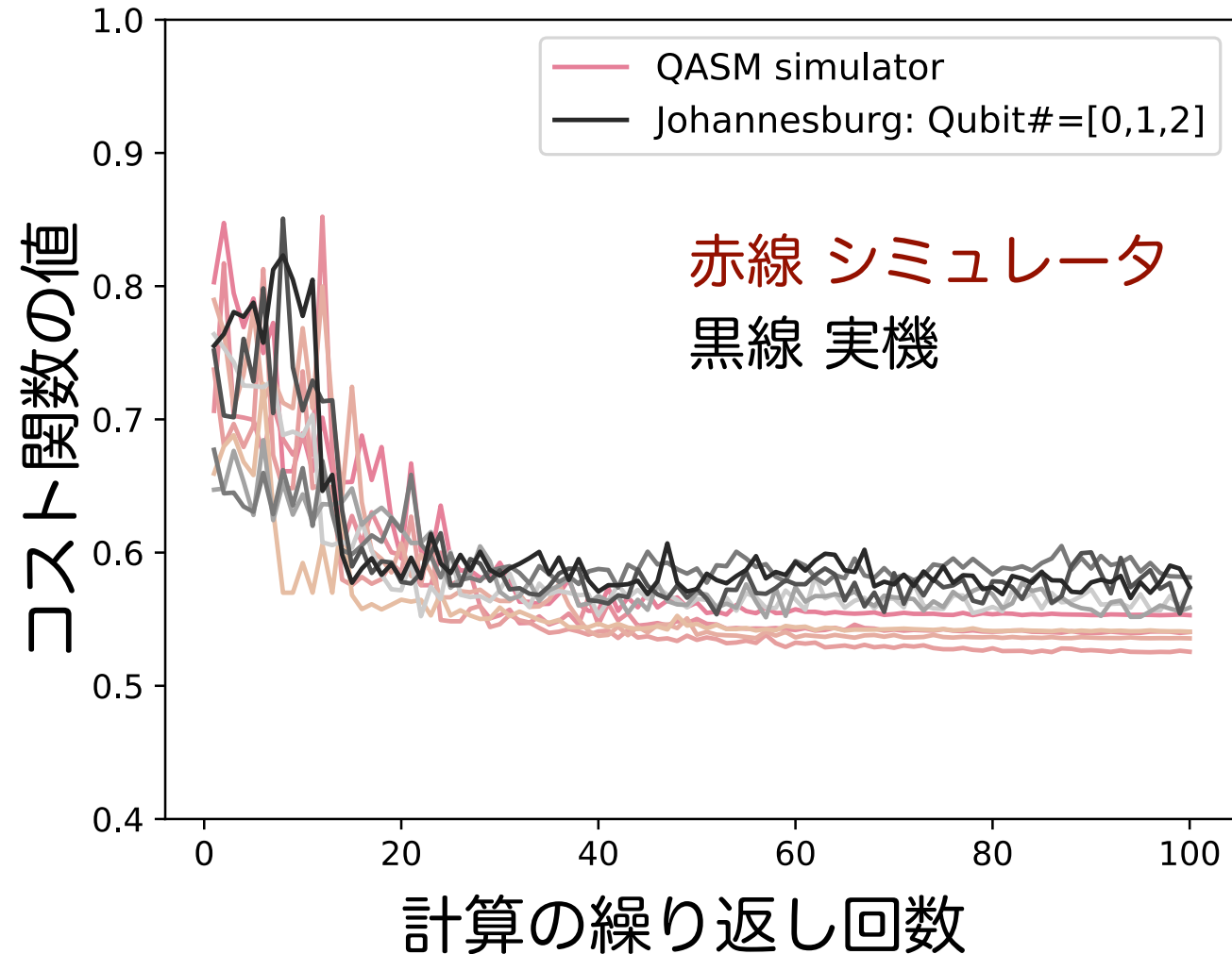
使った変分量子回路はバックアップ



## 40事象を使って3変数の分類を検証

- ▶ 約50回計算を繰り返すとコスト関数は一定値に収束
  - 実機のコスト値は若干高く、揺らぎも大きい (⇒ノイズの影響)
- ▶ ROC曲線から実機でも学習が進んでいることが分かる
  - サンプル数が小さいため、過学習を起こしている

# 実機での結果 (2)



## 40事象を使って3変数の分類を検証

- ▶ 約50回計算を繰り返すとコスト関数は一定値に収束
  - 実機のコスト値は若干高く、揺らぎも大きい (⇒ノイズの影響)
- ▶ ROC曲線から実機でも学習が進んでいることが分かる
  - サンプル数を増やすと、過学習は減少する

# “量子データ”の学習

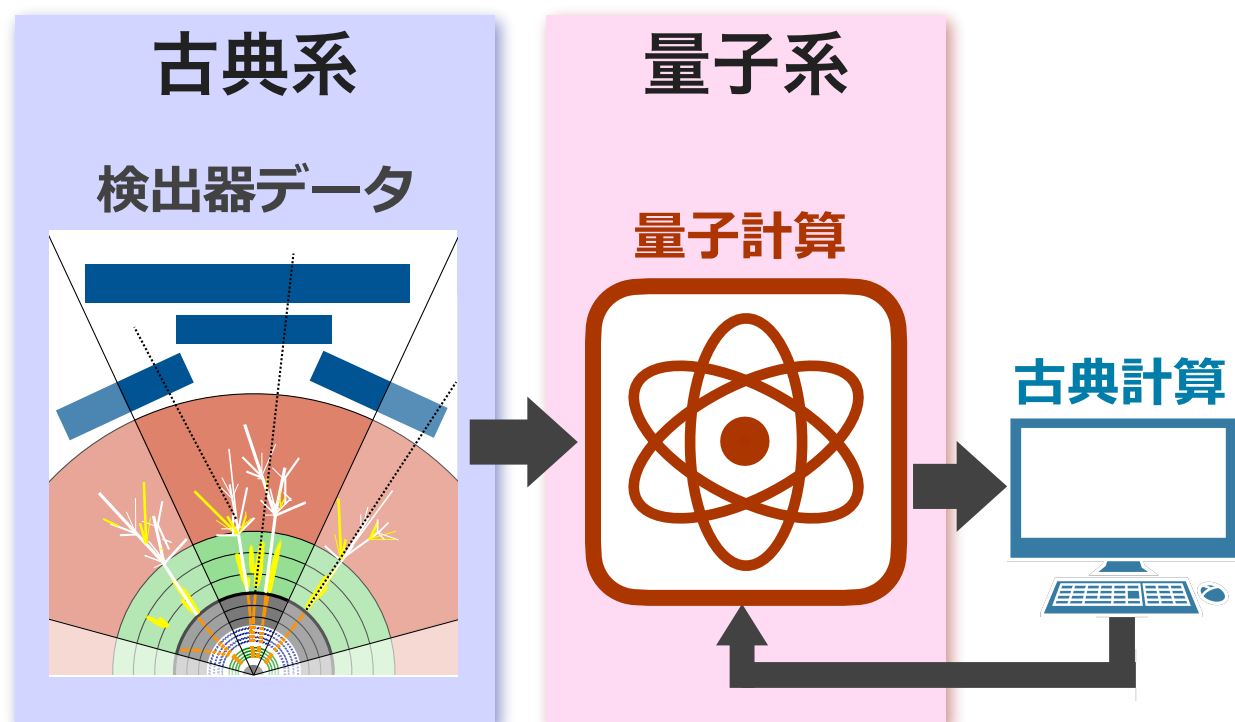
これまでは観測(古典)データを量子状態に変換して学習してきた  
量子物理系を直接学習することで、物理を引き出すことはできないか？

→ 量子データの学習

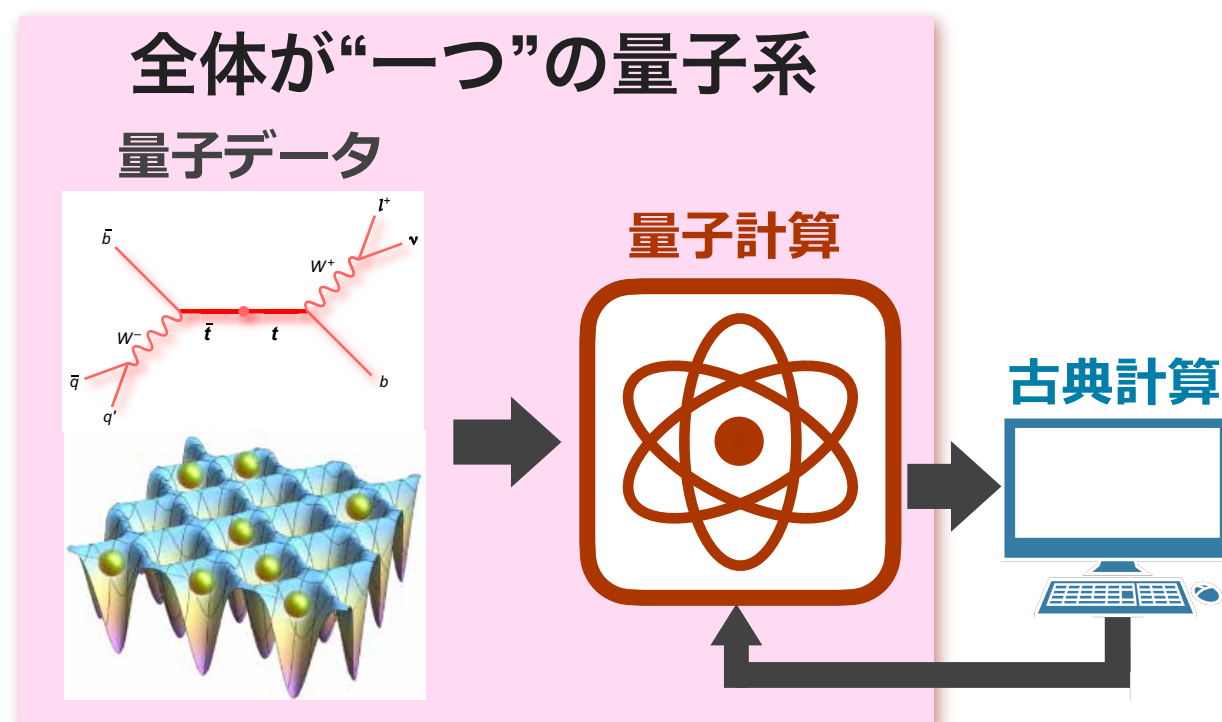
応用例: 量子センシング, 将来的なHEP実験の設計?

例えば、量子状態の測定感度に対する実験パラメータの最適化 (量子微分解析)

## 古典データの学習



## 量子データの学習



HEP実験では観測前の量子データは得られない。。

→ 量子シミュレーションで代用

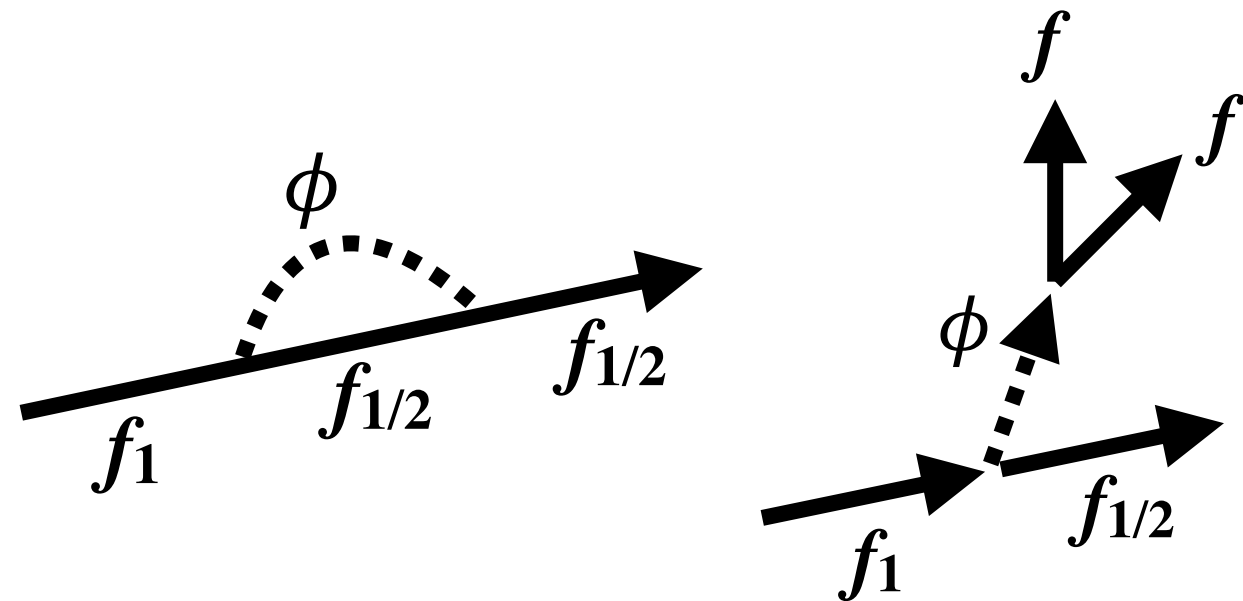
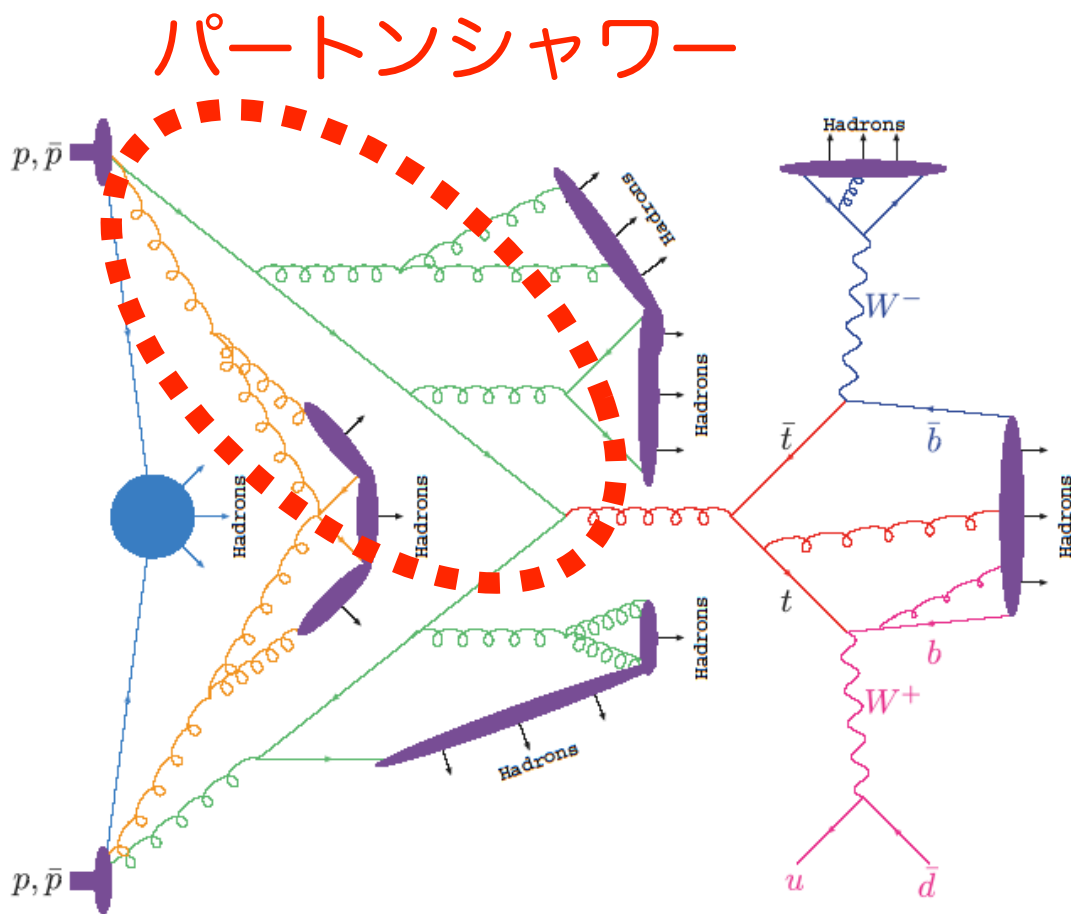
# 量子パートンシャワーモデル

量子シミュレーションの例として、パートンシャワーモデルを活用

C. Bauer *et al.*, arXiv:[1904.03196](https://arxiv.org/abs/1904.03196)

2フェルミオン+1スカラーボソンの模型

- ボソン $\phi$ の放出と分岐
- 中間状態のフェルミオン $f = \{f_1, f_2\}$ による干渉

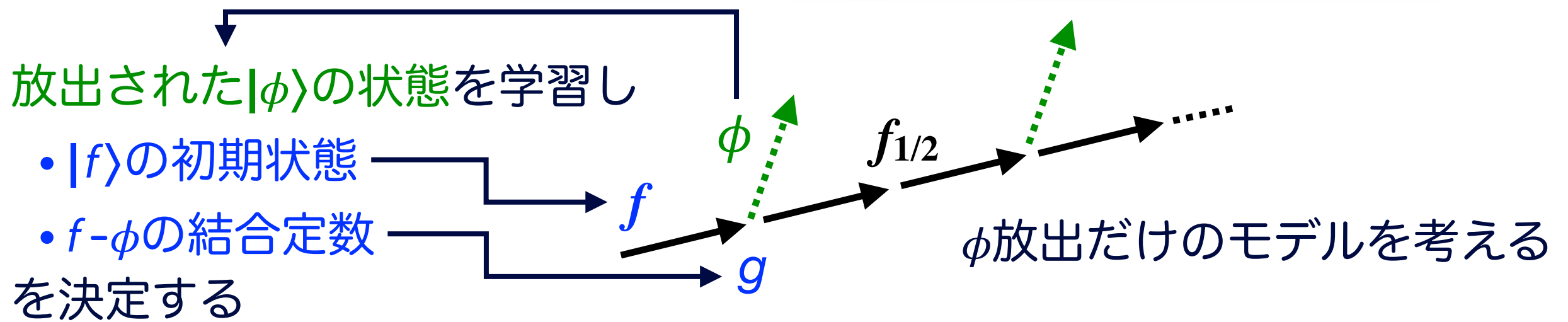


パートンシャワー過程は、通常Soft・Collinear近似を元にマルコフ連鎖MCで計算

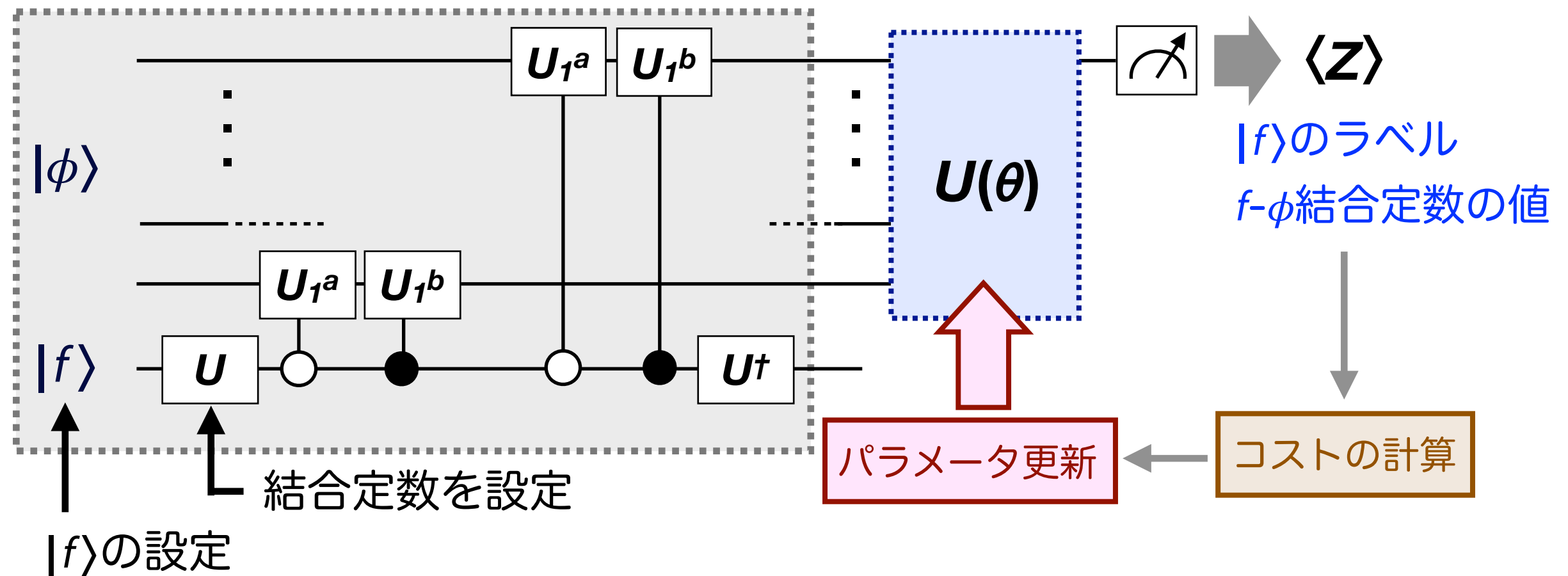
- ▶ 放出・分岐過程を結合定数の行列で表現  
→ 対角化し、フレーバーが混合しない基底へ移行
- ▶ 放出・分岐確率はスタコフ因子で計算
- ▶ ユニタリー演算で重ね合わせ状態を生成し測定  
→ 詳細は飯山くんのトークで



# フェルミオン状態・結合定数の決定 (1)

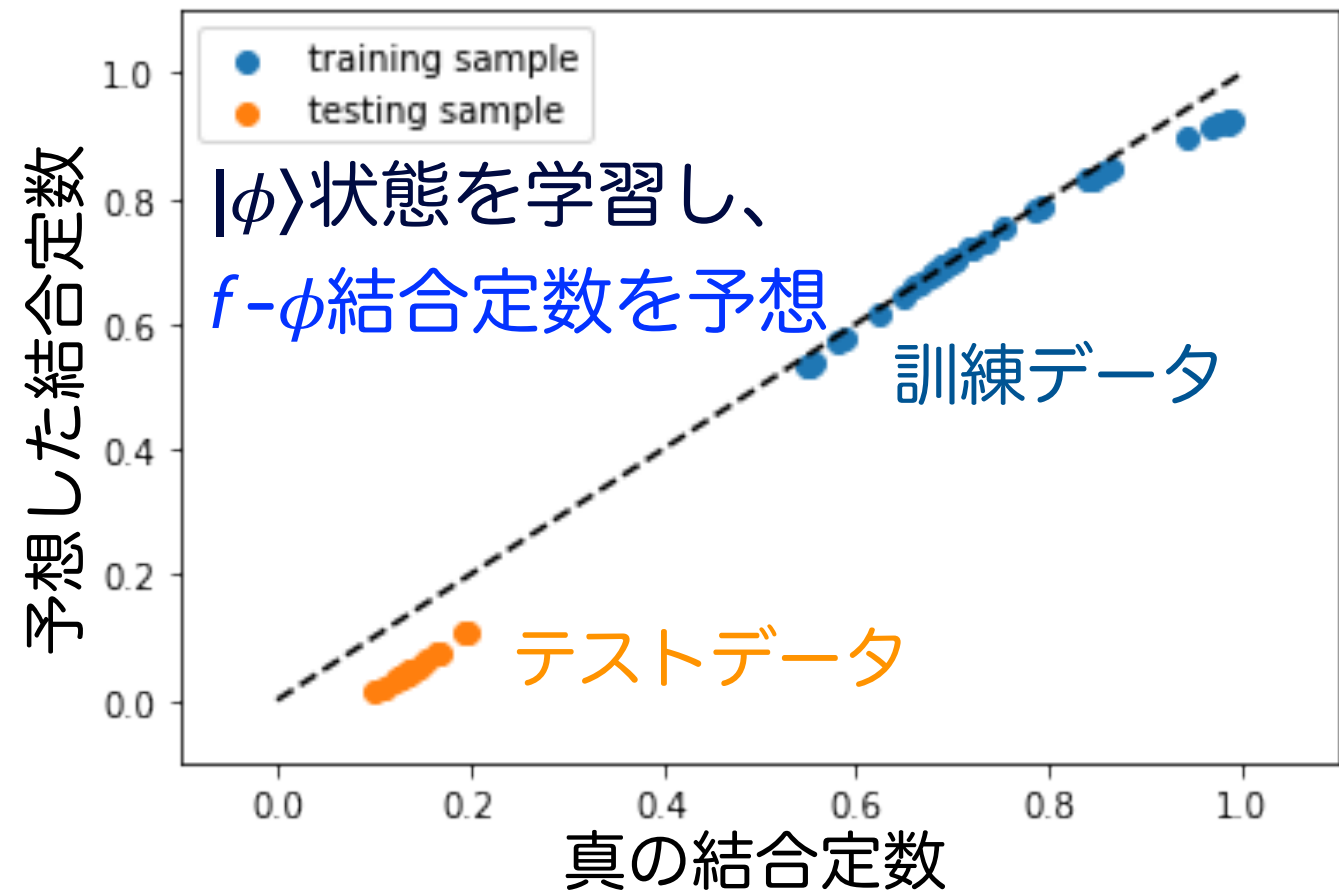
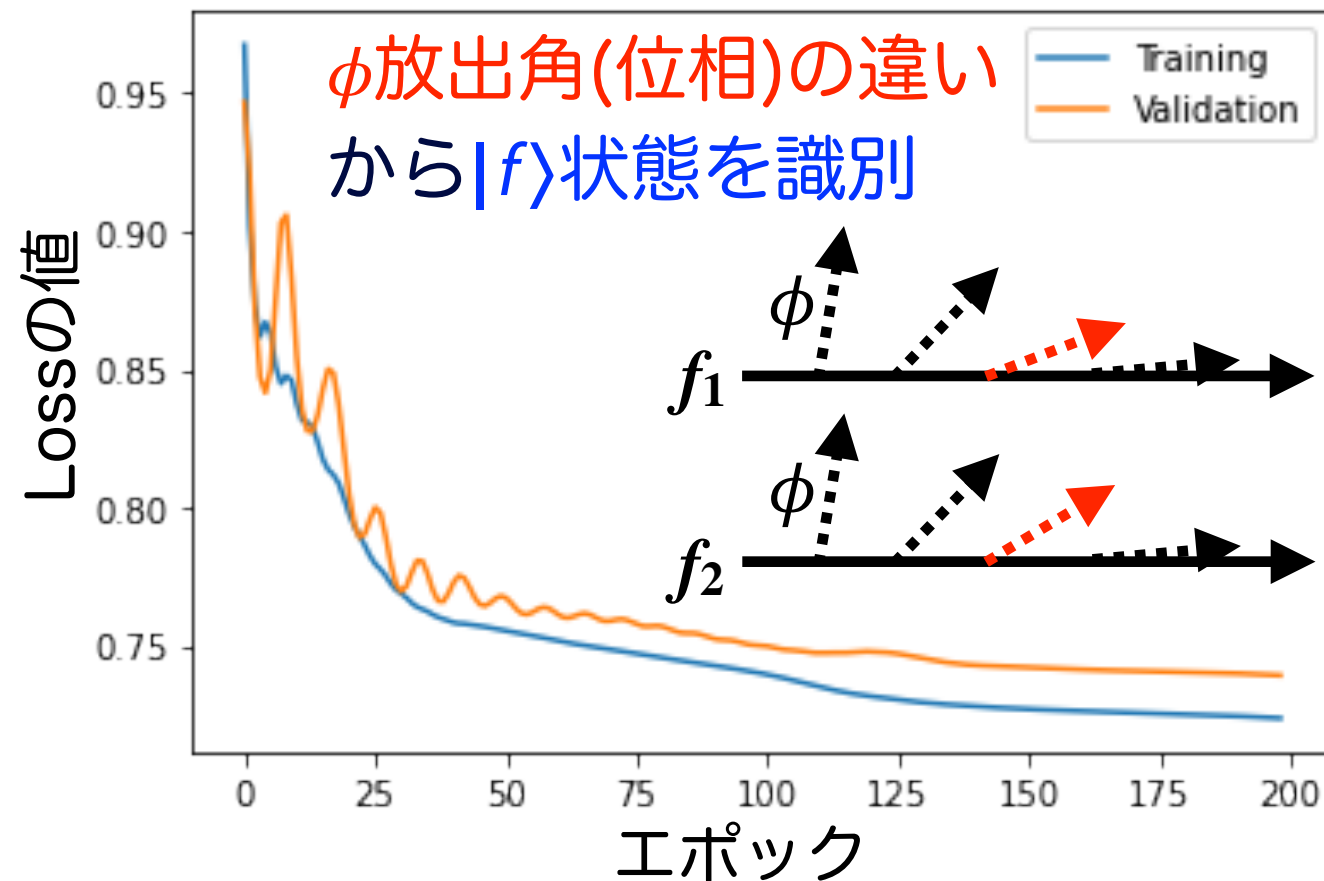
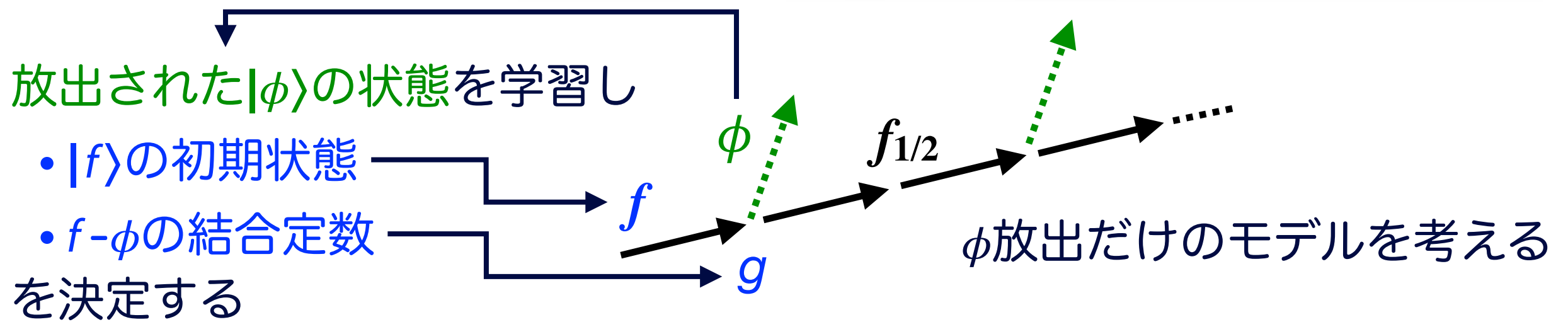


$\phi$ 放出のシミュレーション回路



$U(\theta)$ 回路の詳細はバックアップにあります

# フェルミオン状態・結合定数の決定 (2)



量子物理系の学習はさまざまな応用が可能  
面白いアイデアがあれば、是非一緒に研究しましょう!

# まとめ

- ▶ 量子コンピュータの高エネルギー物理への応用を見据え、量子機械学習を活用したデータ解析手法を研究している。
- ▶ 変分量子回路を超対称性粒子の分類に適用し、シミュレータと量子コンピュータの実機で初期的な検証を行った。
- ▶ 少ない入力変数・少量の学習サンプルの場合、量子機械学習は通常(古典)の機械学習手法と同等の性能を持ちうる。
- ▶ 量子物理系(パートンシャワー)を量子データとして学習する試みは有望に見える。他の量子系への拡張を試みる。

量子機械学習はNISQ量子コンピュータ活用の有望な応用の一つです。興味がある方はご連絡を。

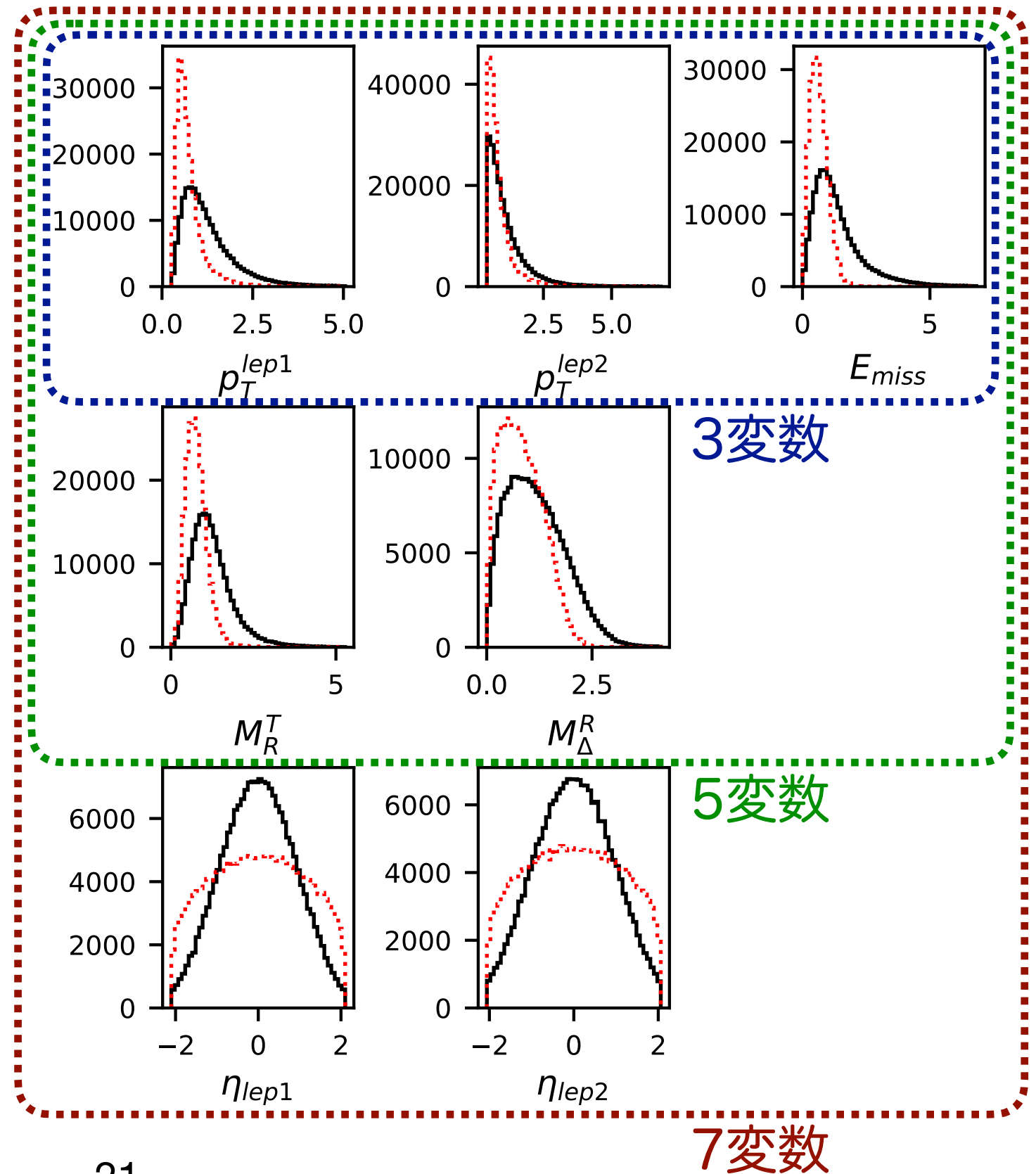
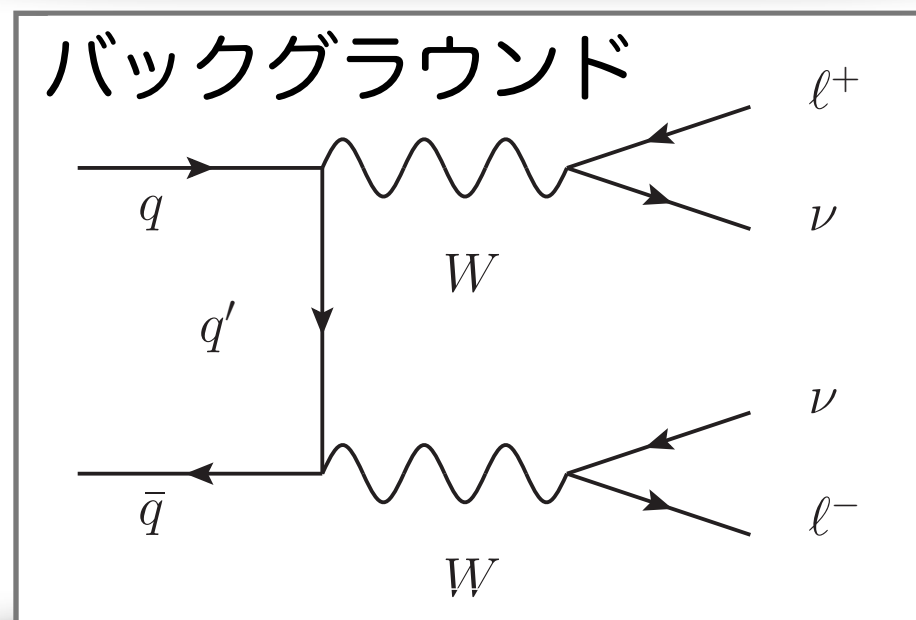
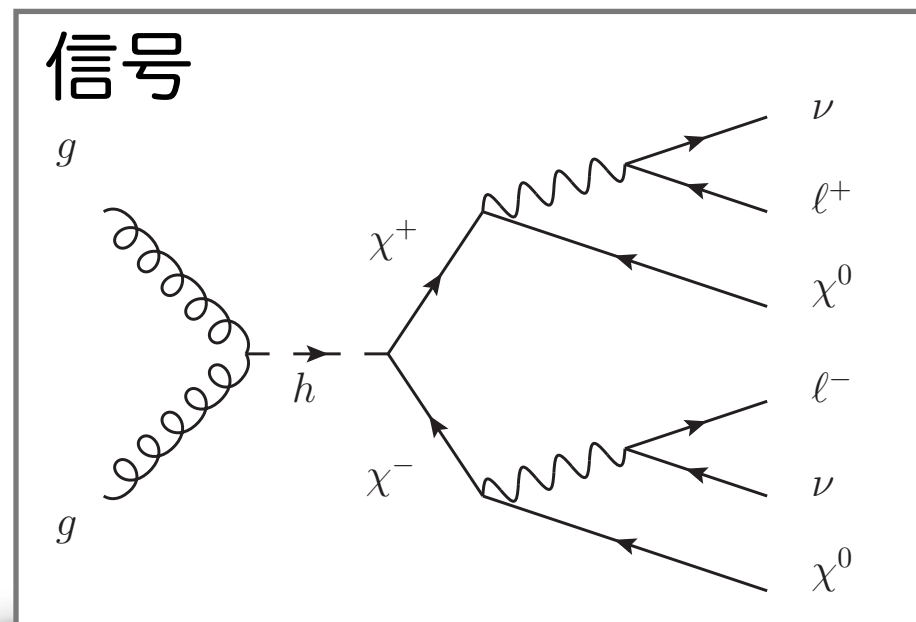
# バックアップ

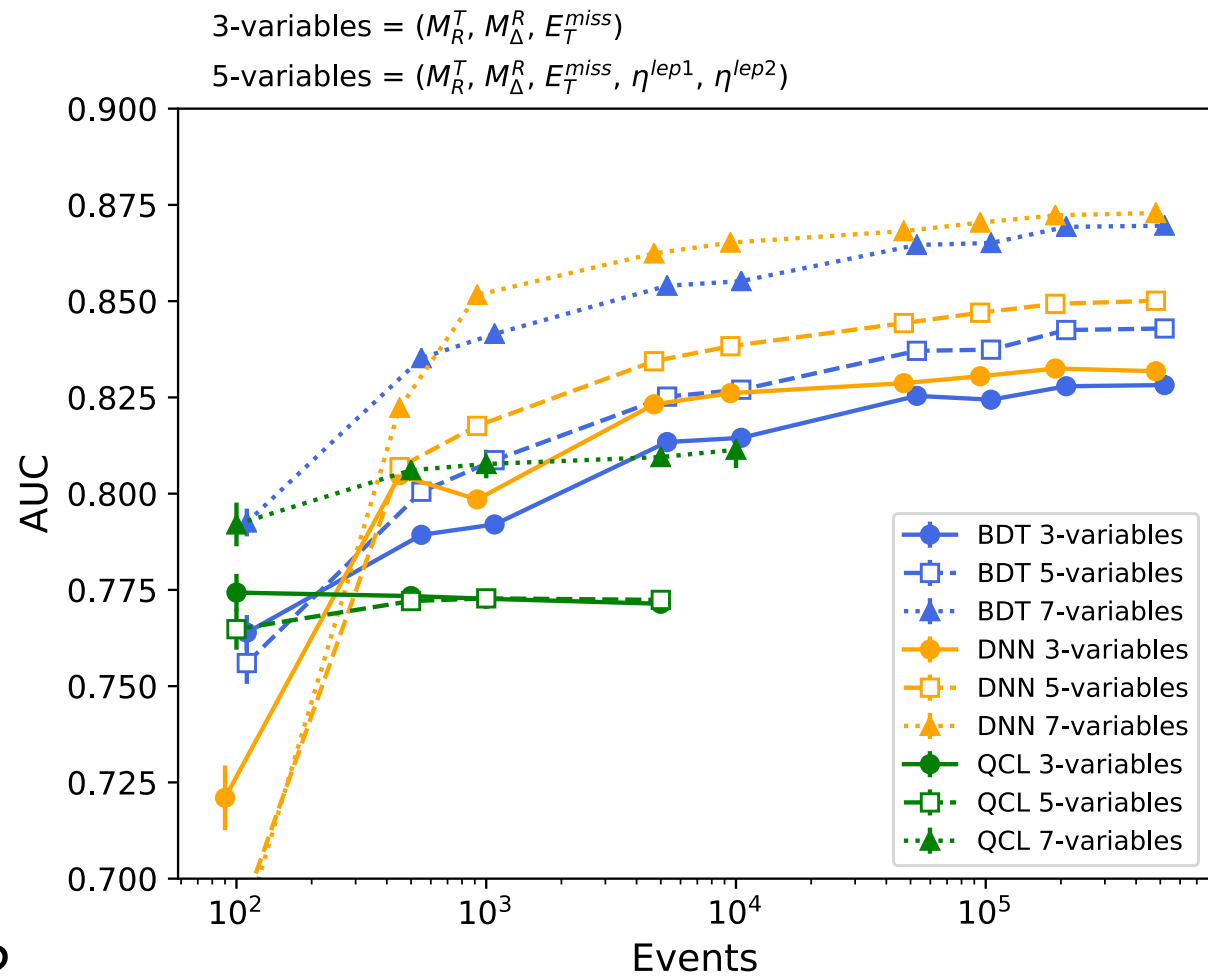
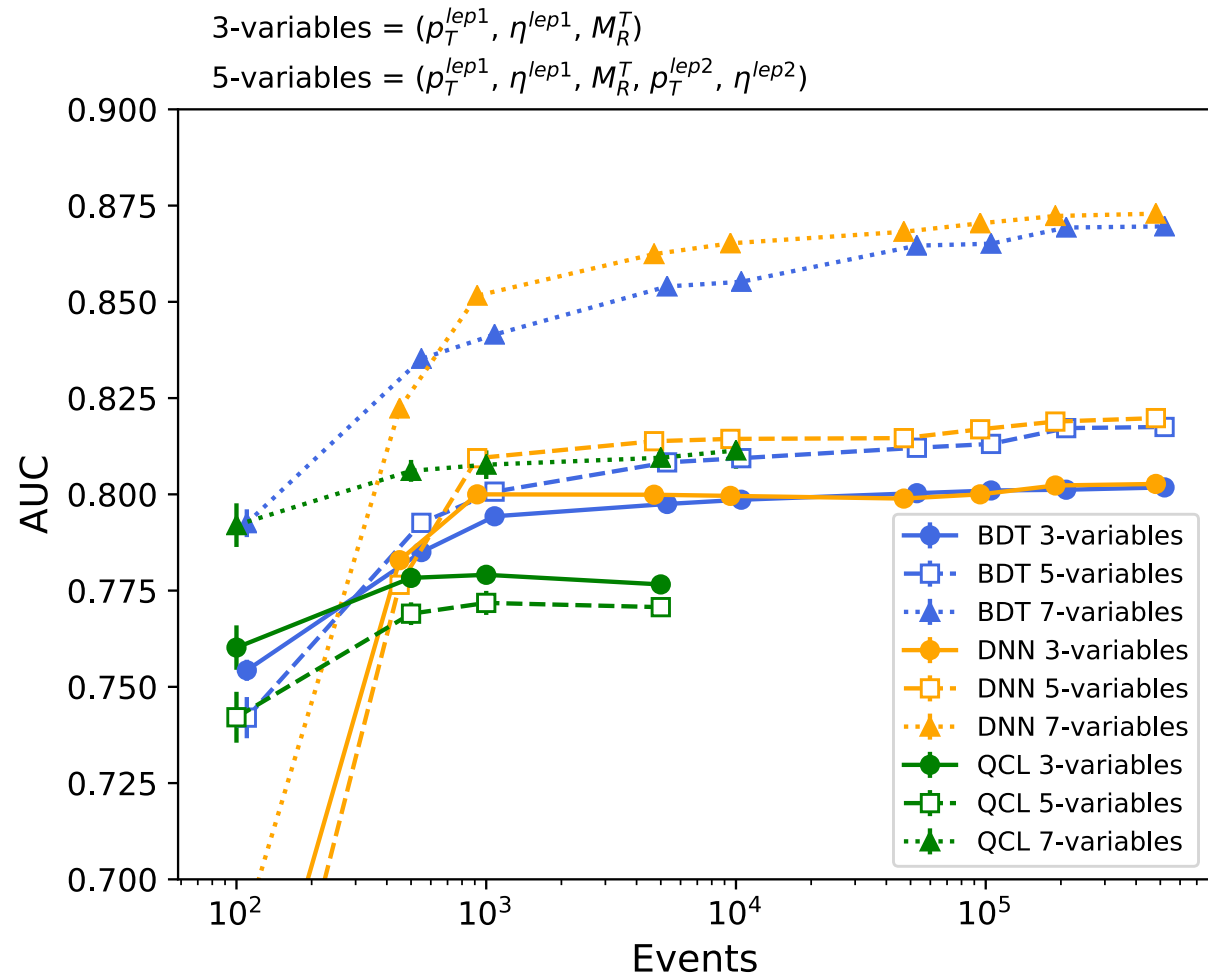
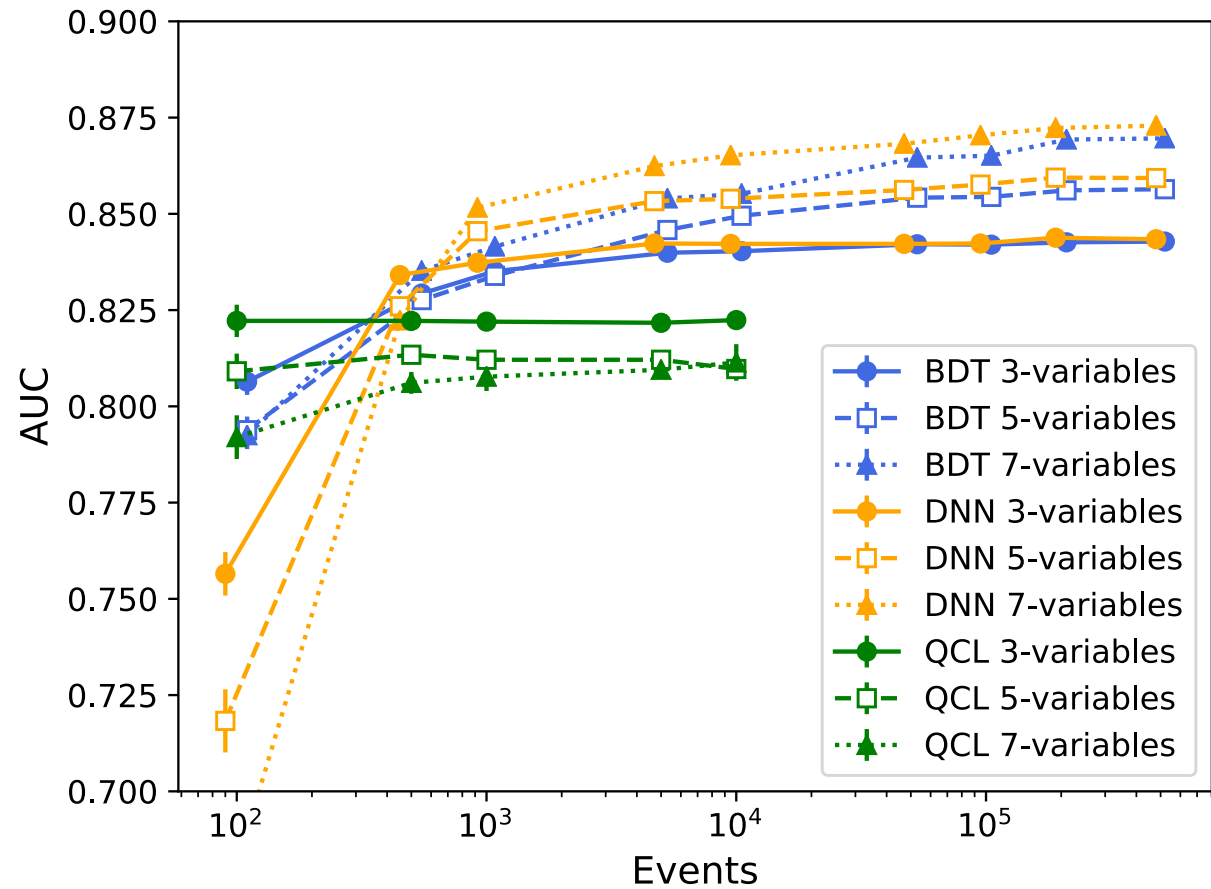


# 事象選別への応用

K. Terashi, M. Kaneda, T. Kishimoto,  
M. Saito, R. Sawada, J. Tanaka,  
arXiv:[2002.09935](https://arxiv.org/abs/2002.09935)

超対称性粒子と標準模型バックグラウンドの分類  
UCアーバイン校機械学習レポジトリの[SUSYデータセット](#)を使用

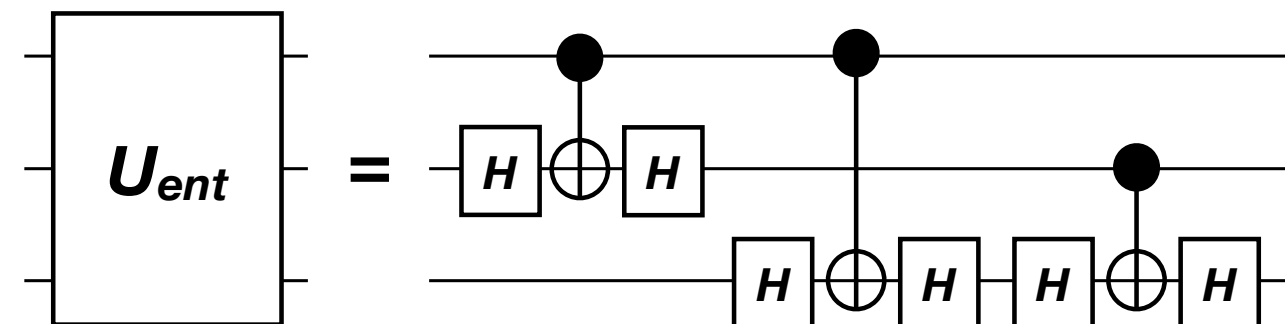
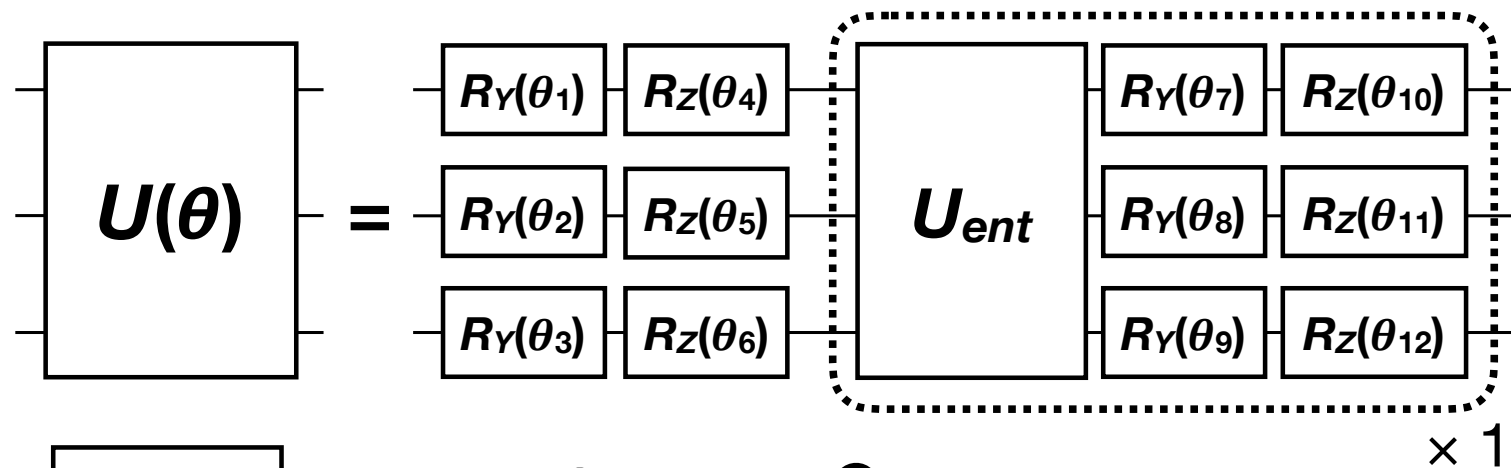
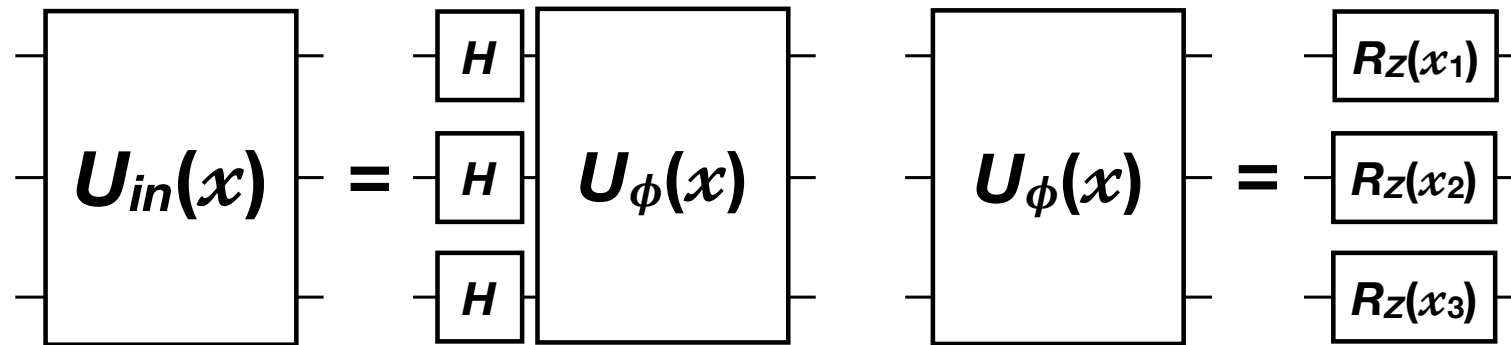




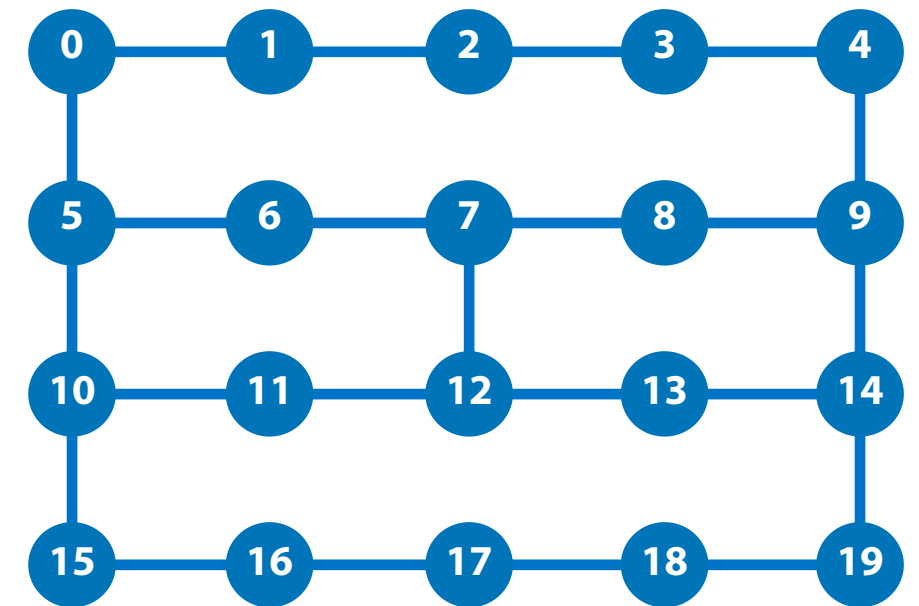
# 変分量子回路 - 実機 -

V. Havlicek *et al.*,  
arXiv:[1804.11326](https://arxiv.org/abs/1804.11326)

[Qiskit Aqua](#) フレームワークを使って実装



Johannesburg

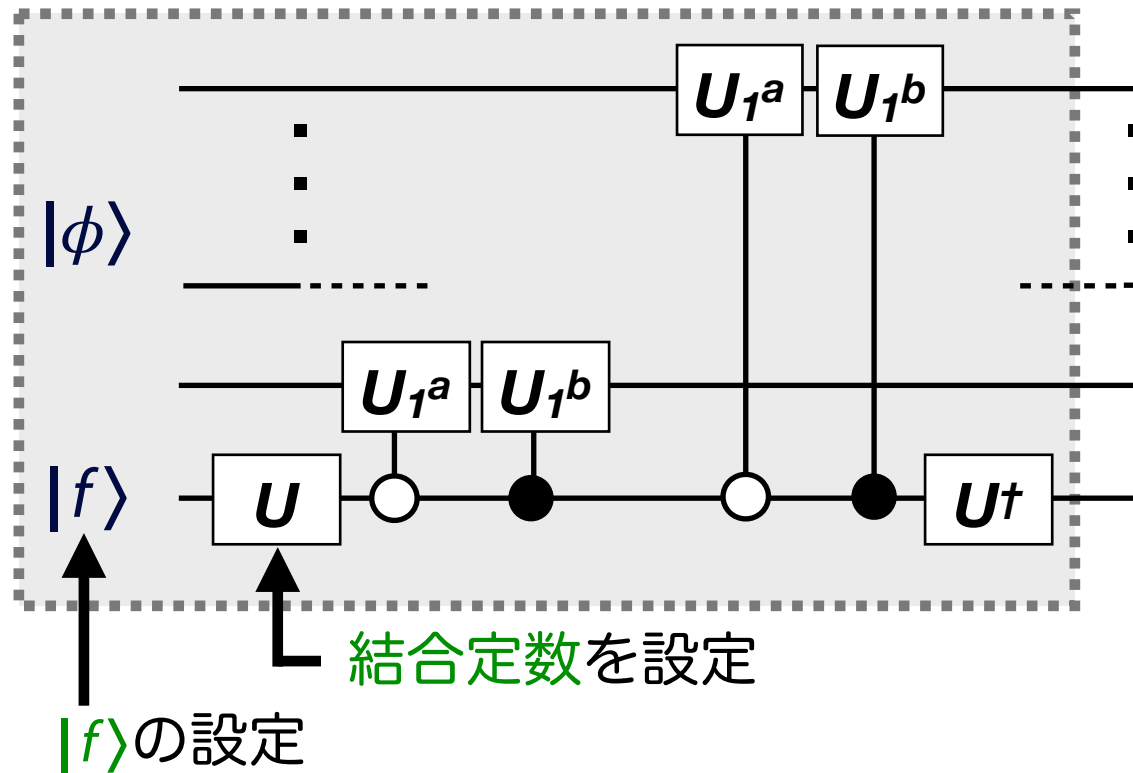


➔ 20量子ビットのIBM量子コンピュータとQASMシミュレータで検証

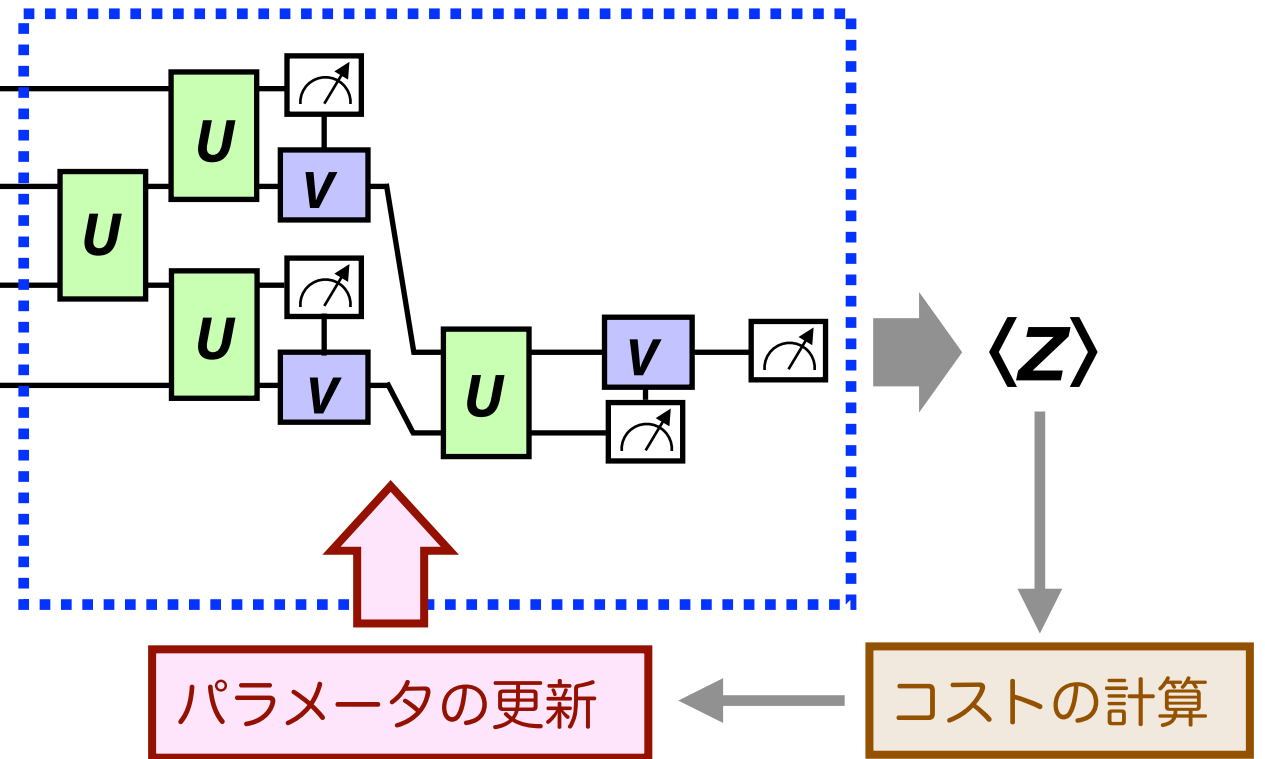
- ▶ 1量子ビットを使って $U_{in}(x)$ を実装
- ▶  $U(\theta) =$  エンタングルゲート( $U_{ent}$ ) + 回転ゲート
- ▶ クロスエントロピー + COBYLAでパラメータを最適化

# “量子データ”の学習

$\phi$ 放出のシミュレーション回路



量子CNN回路



量子パートンシャワーシミュレーションの出力を学習用回路に渡す

$|f\rangle$ の状態は学習に含めない

$|\phi_i\rangle$ の状態だけを学習して

- ▶ フェルミオン状態を決定する  $\rightarrow$   $|f\rangle$ のClassification
- ▶ 結合定数を決定する  $\rightarrow$   $g$ のRegression



# 量子CNNでのPS学習

Google Cirq +  
TensorFlow Quantumで実装

φ放出のシミュレーション回路

