

量子ソフトウェアシンポジウム

2026年2月6日

量子機械学習の理論的進展と応用の可能性

東京大学

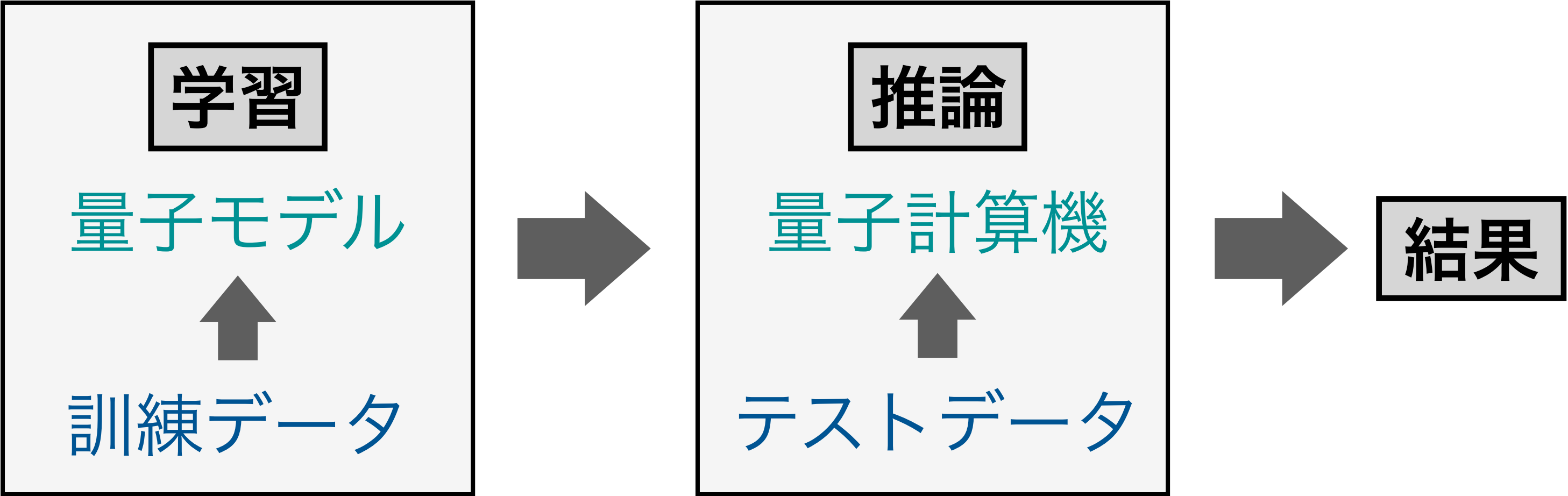
素粒子物理国際研究センター (ICEPP)

寺師 弘二

量子機械学習

ここでは

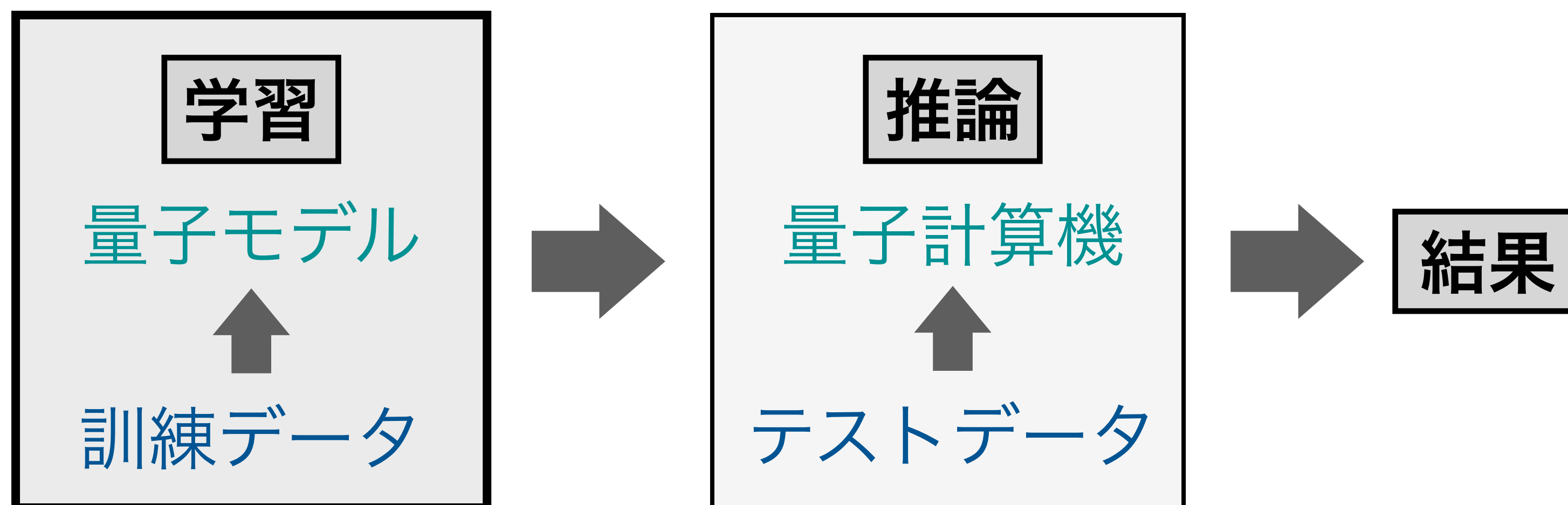
「量子機械学習 = 入力データの学習を量子モデルで行う機械学習」
としてお話しします



量子機械学習

ここでは

「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」
としてお話しします



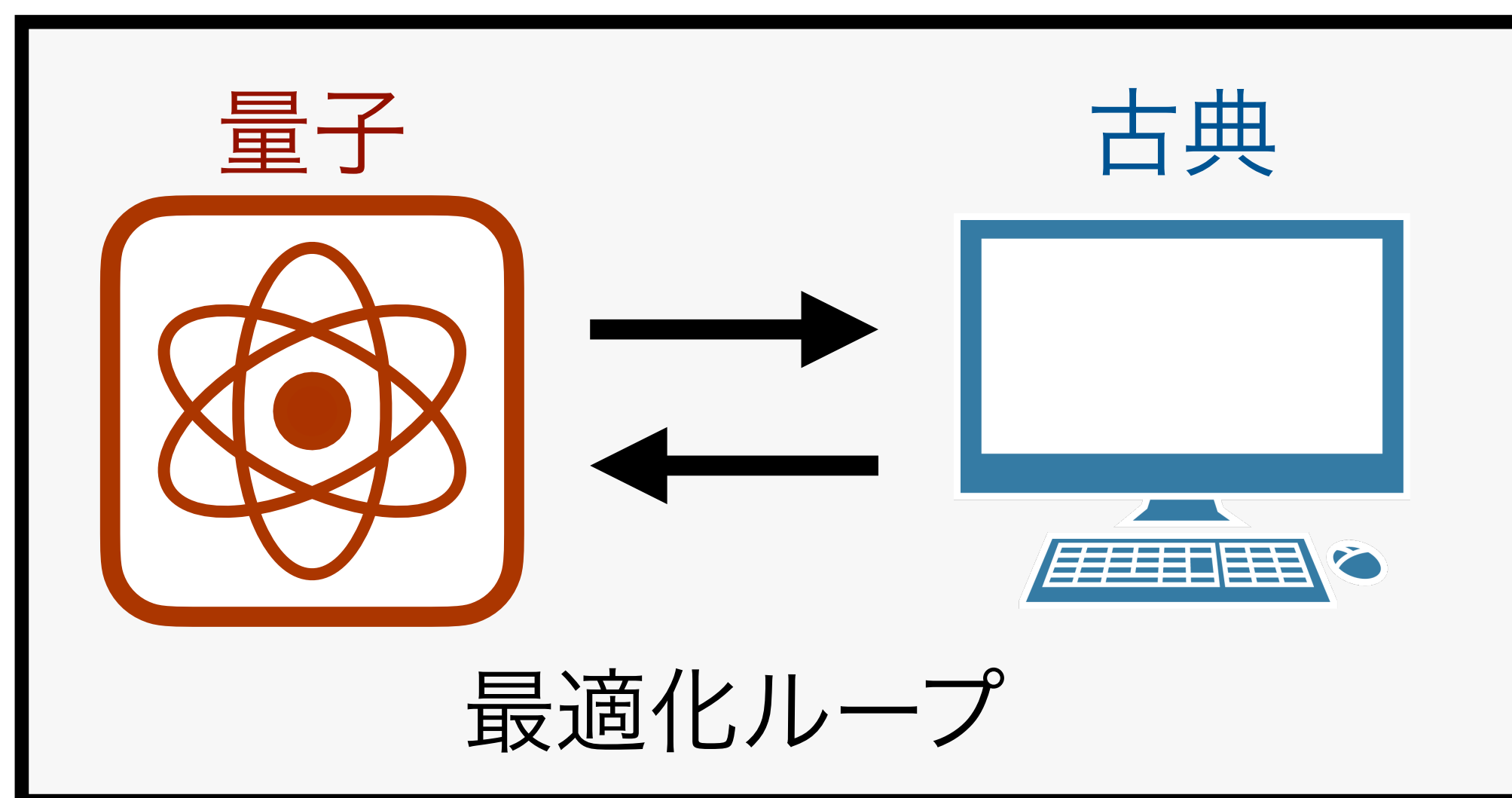
効率的な量子学習モデルを作るために

- 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

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 θ を持つユニタリー $U(\theta)$ を適用し、 $\rho(\theta) = U(\theta)\rho U(\theta)^\dagger$ を生成
- ▶ 観測量 O の期待値を計算し、損失関数 $C(\theta) = \text{Tr} [O\rho(\theta)]$ を決定
- ▶ 古典計算で損失関数を最小化し、学習パラメータ θ を最適化



最適化に必要なリソースのため、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 —

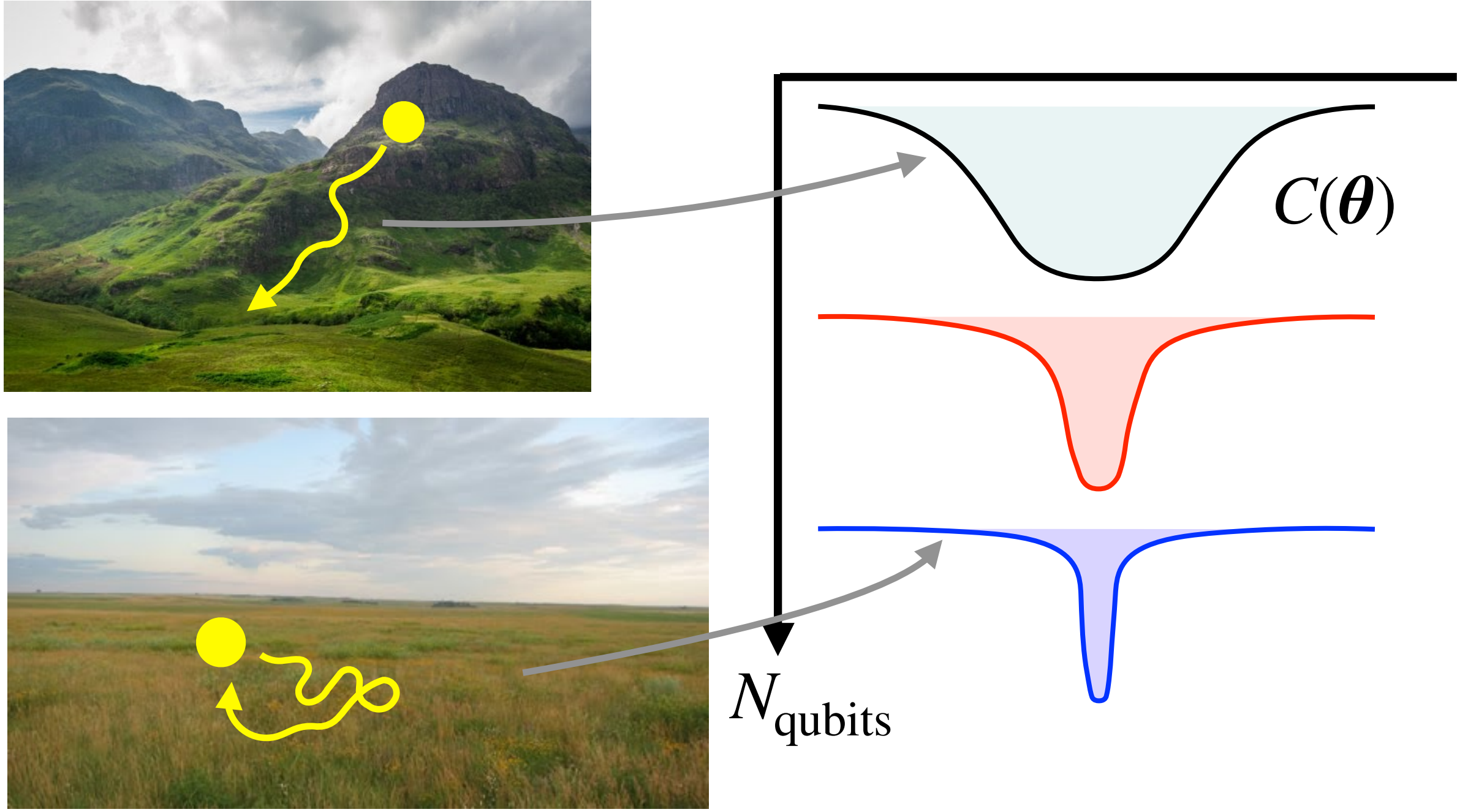
McClellan et al., [Nat. Commun. 9, 4812 \(2018\)](#)

損失関数

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

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

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

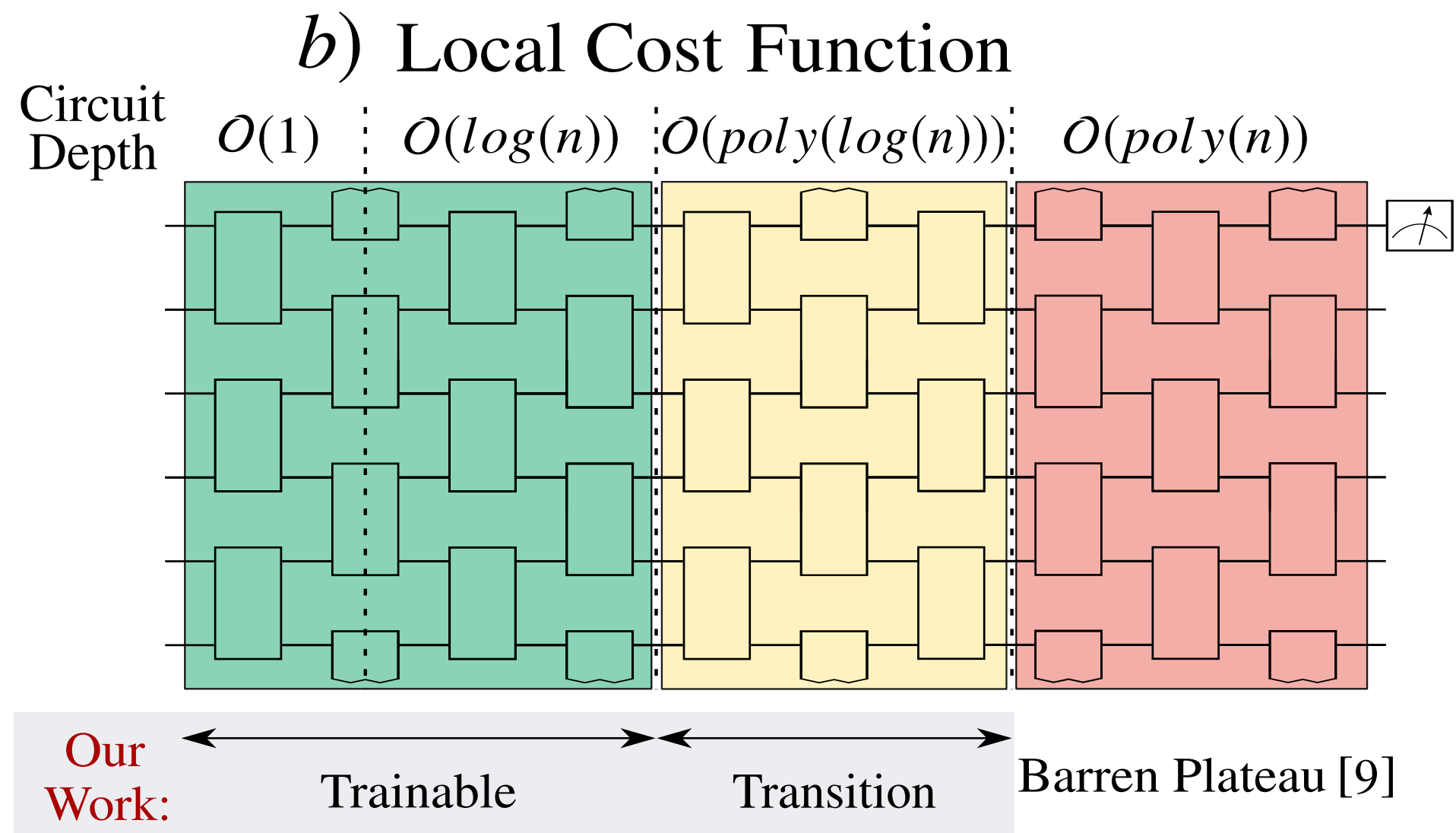


➡ バレンプラトー（勾配消失）問題

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 \(2021\)](#)

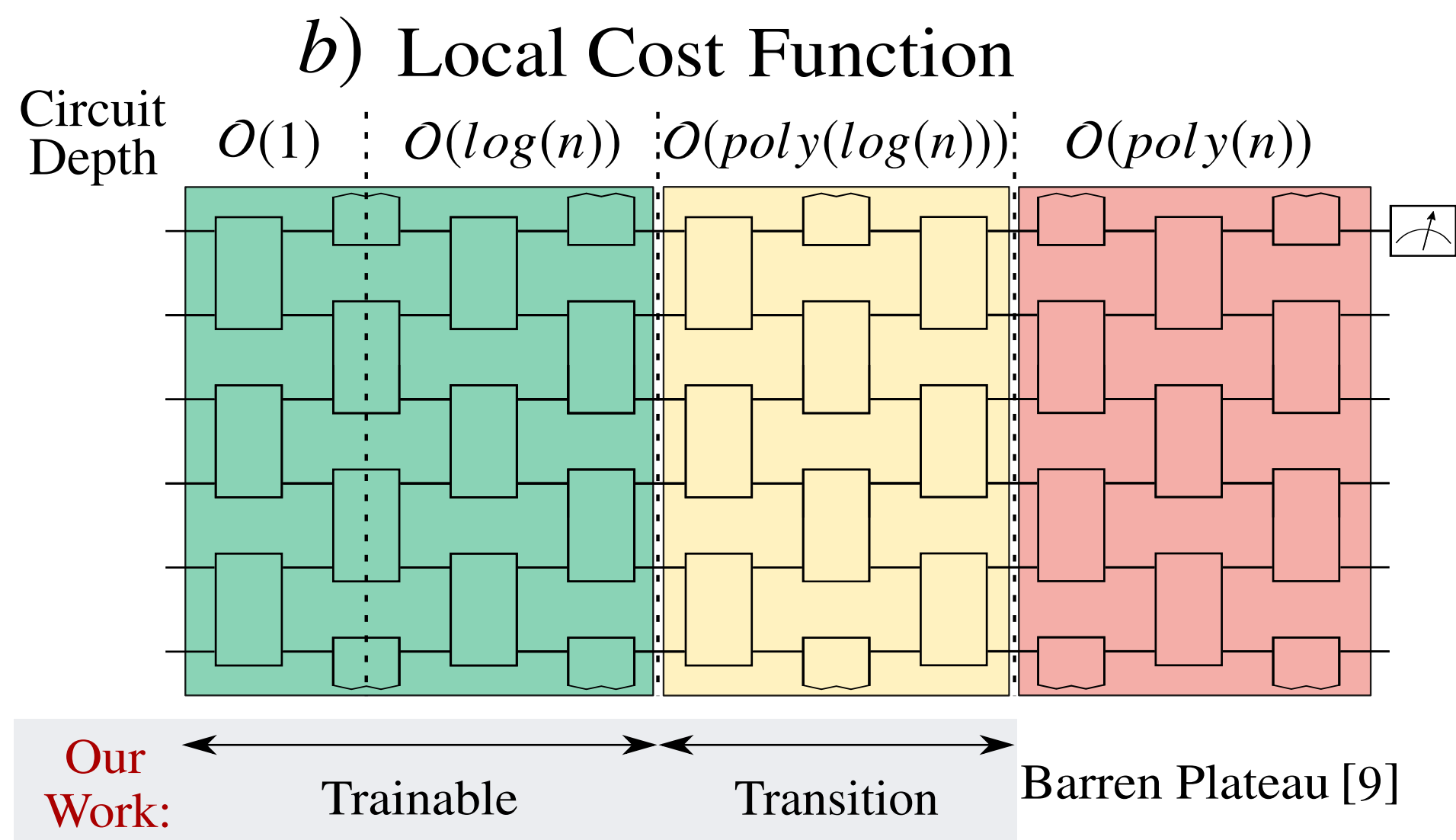
量子学習モデルの訓練可能性

量子学習モデルの学習性能をいかに向上させるか

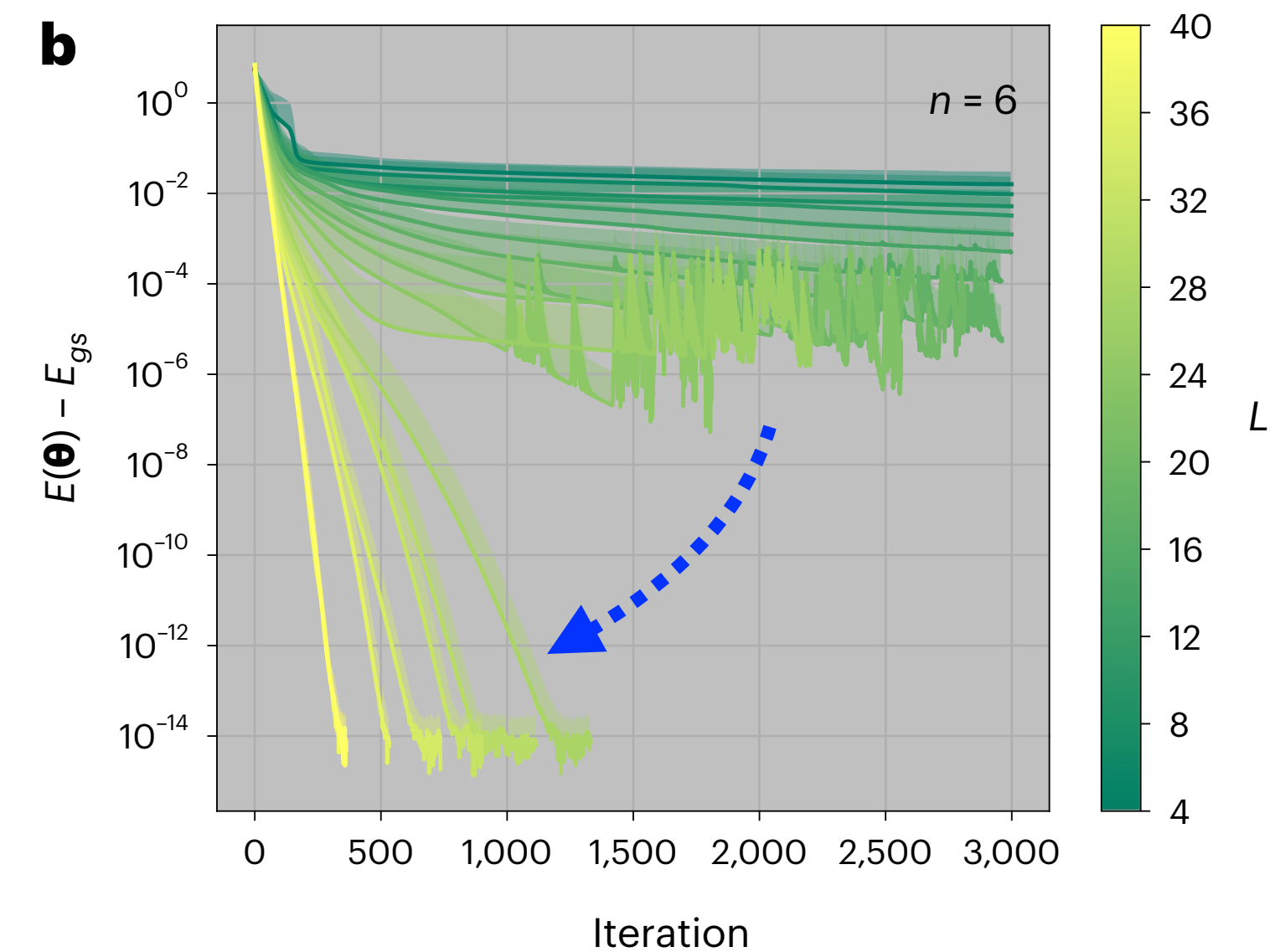
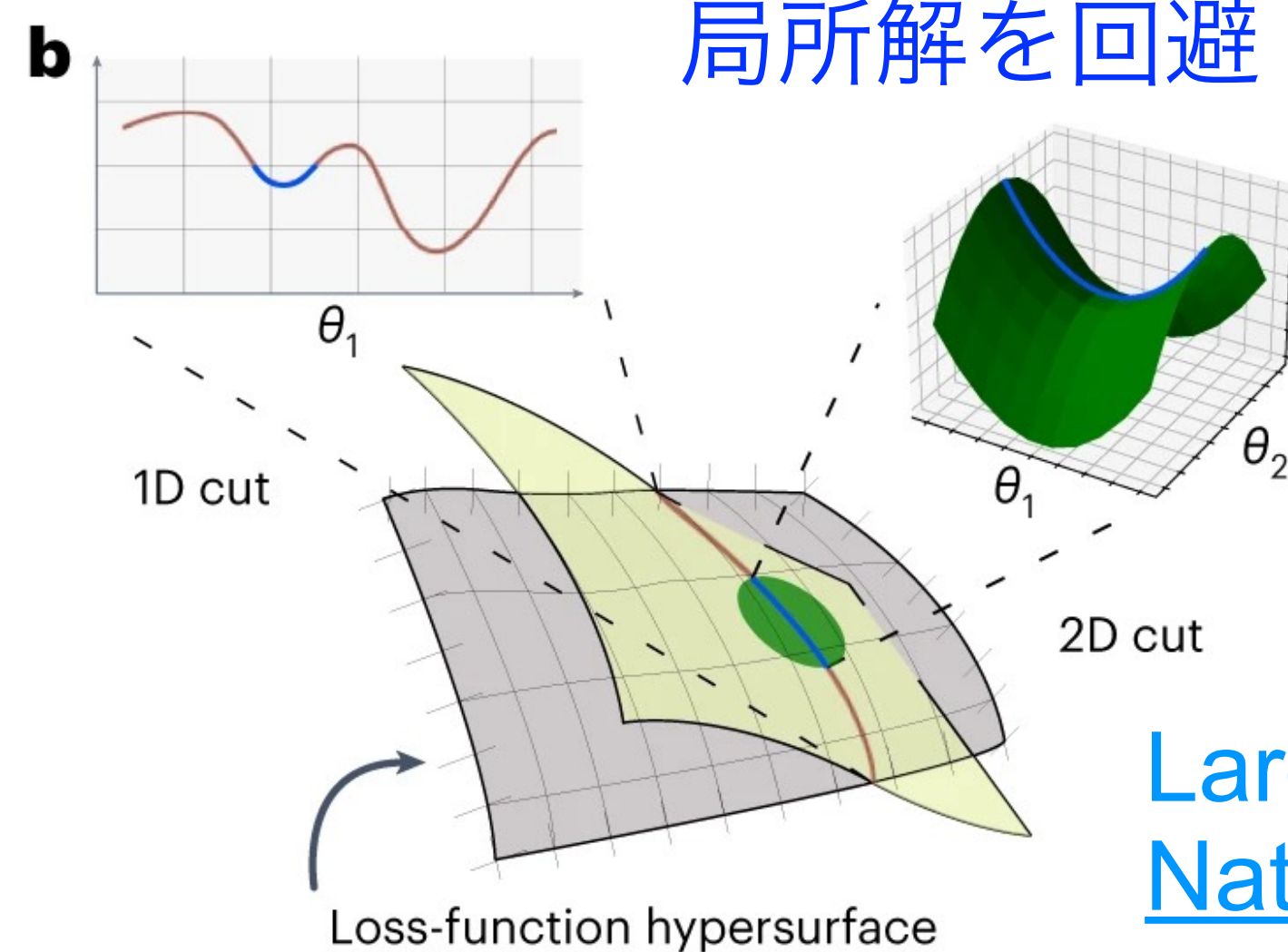
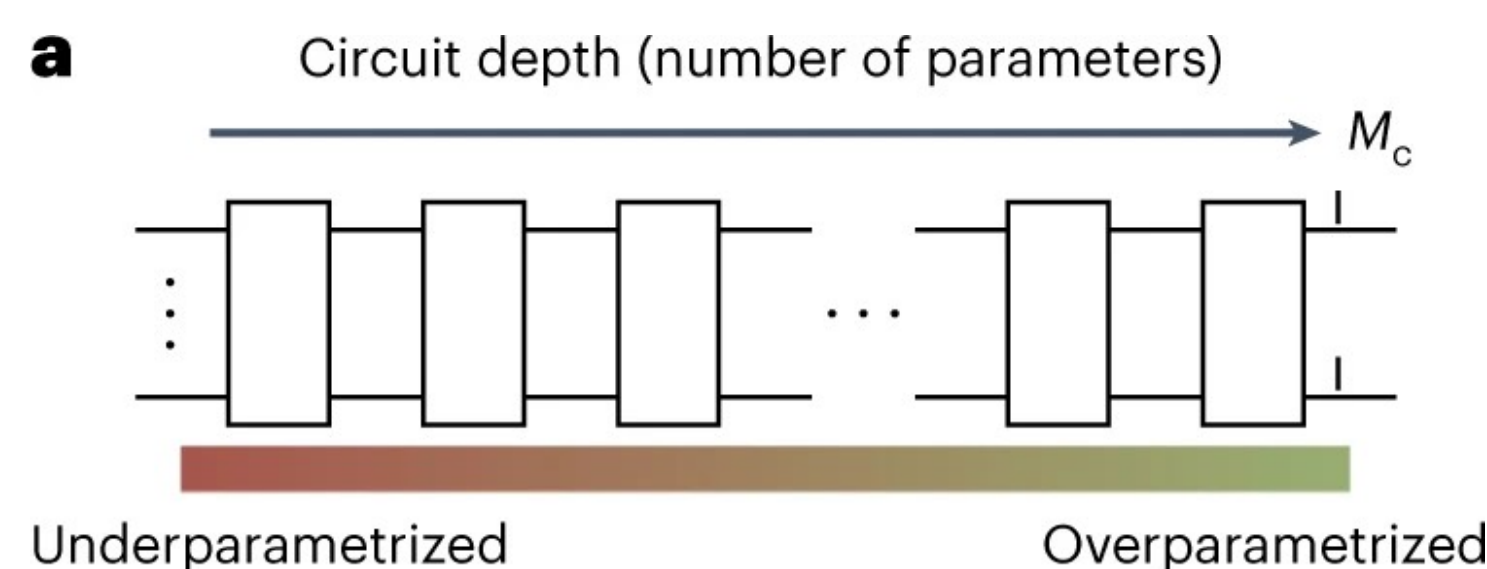
- ▶ 学習モデルの表現能力は学習パラメータ数とともに向上
- ▶ 回路が深くなると、勾配消失が起こりうる

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



Cerezo et al.,
[Nat. Commun. 12, 1791 \(2021\)](https://doi.org/10.1038/s41467-021-25888-4)



学習の収束性の向上

Larocca et al.,
[Nat. Computat. Sci. 3, 542 \(2023\)](https://doi.org/10.1038/s41534-023-00422-4)

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

Hashimoto, Nakabayashi, Nagano, Iiyama,
Sawada, Tanaka, Terashi, [arXiv:2602.03291](https://arxiv.org/abs/2602.03291)

VQEでの基底エネルギー探索

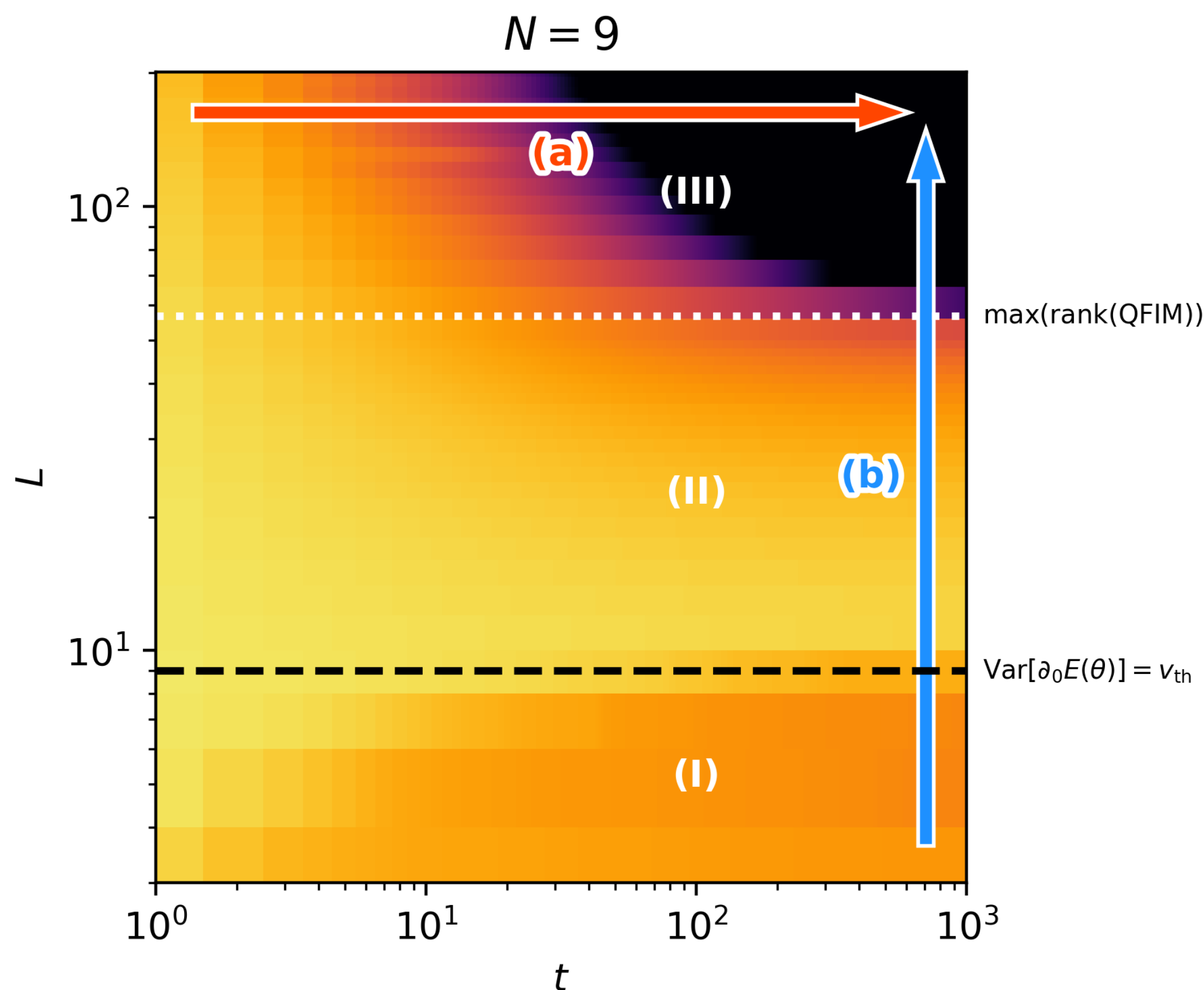
- ▶ 縦横磁場イジング模型（量子ビット数 $3 \leq N \leq 10$ ）
- ▶ Hardware-Efficient アンザッツ（HEA）
- ▶ 逐次最小問題最適化法（NFT）によるパラメータの最適化
 - パラメータ更新の順序をepoch毎にランダム化

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

量子状態のフィッシャー情報行列、コスト関数の数値勾配、アンザッツの動的Lie代数との比較によって、実問題に対する理論予想を検証

勾配消失と過剰パラメータ

厳密解からの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 ）、epoch数 t を変えて数値検証



エネルギー誤差 E の L -依存性：

L 大 過剰パラメータによる指数的収束

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

エネルギー誤差 E の t -依存性：

t 小 \longrightarrow t 大

- ▶ 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

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 大 過剰パラメータによる指数的収束

➡ QFIM計算と無矛盾

勾配消失による E の悪化

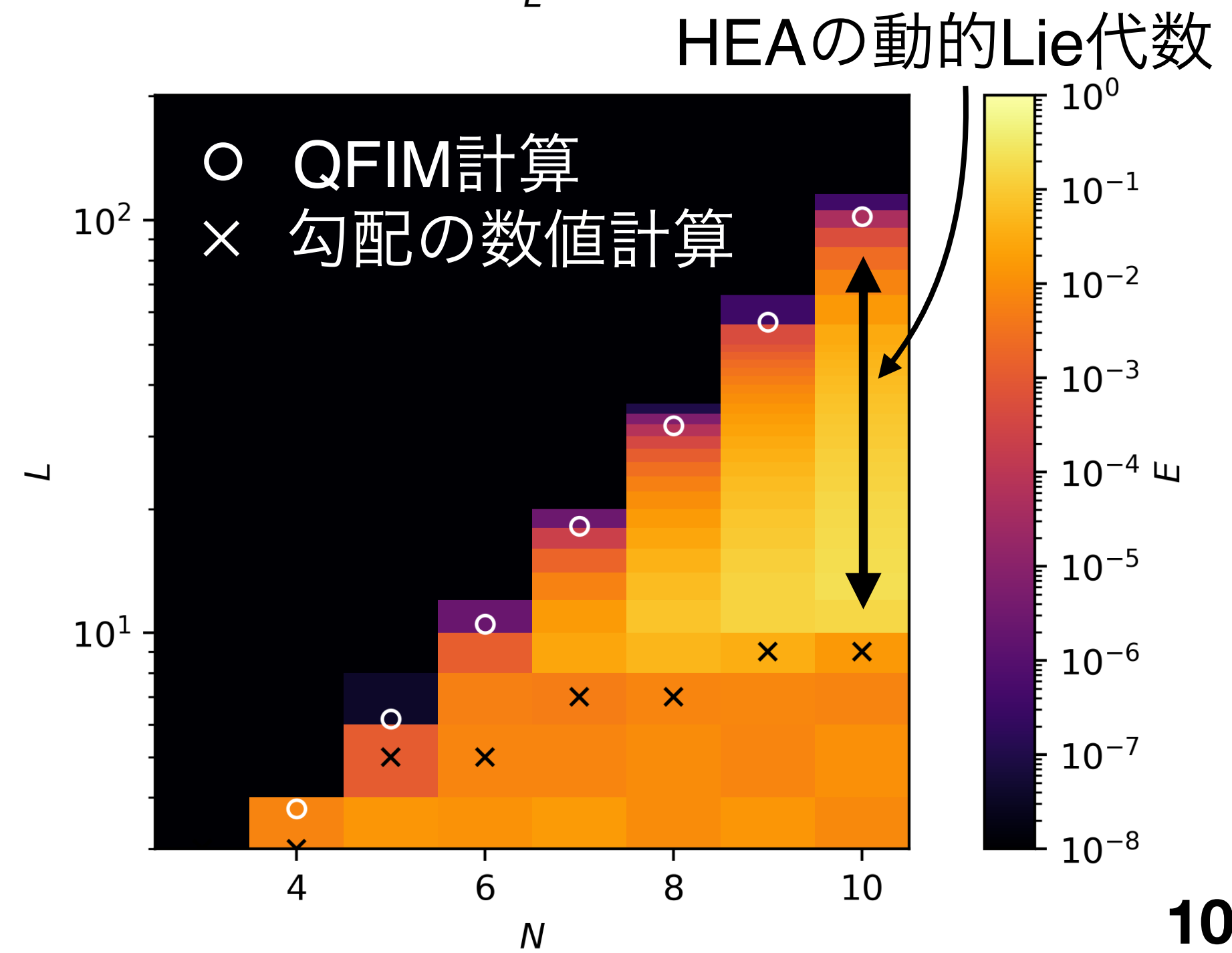
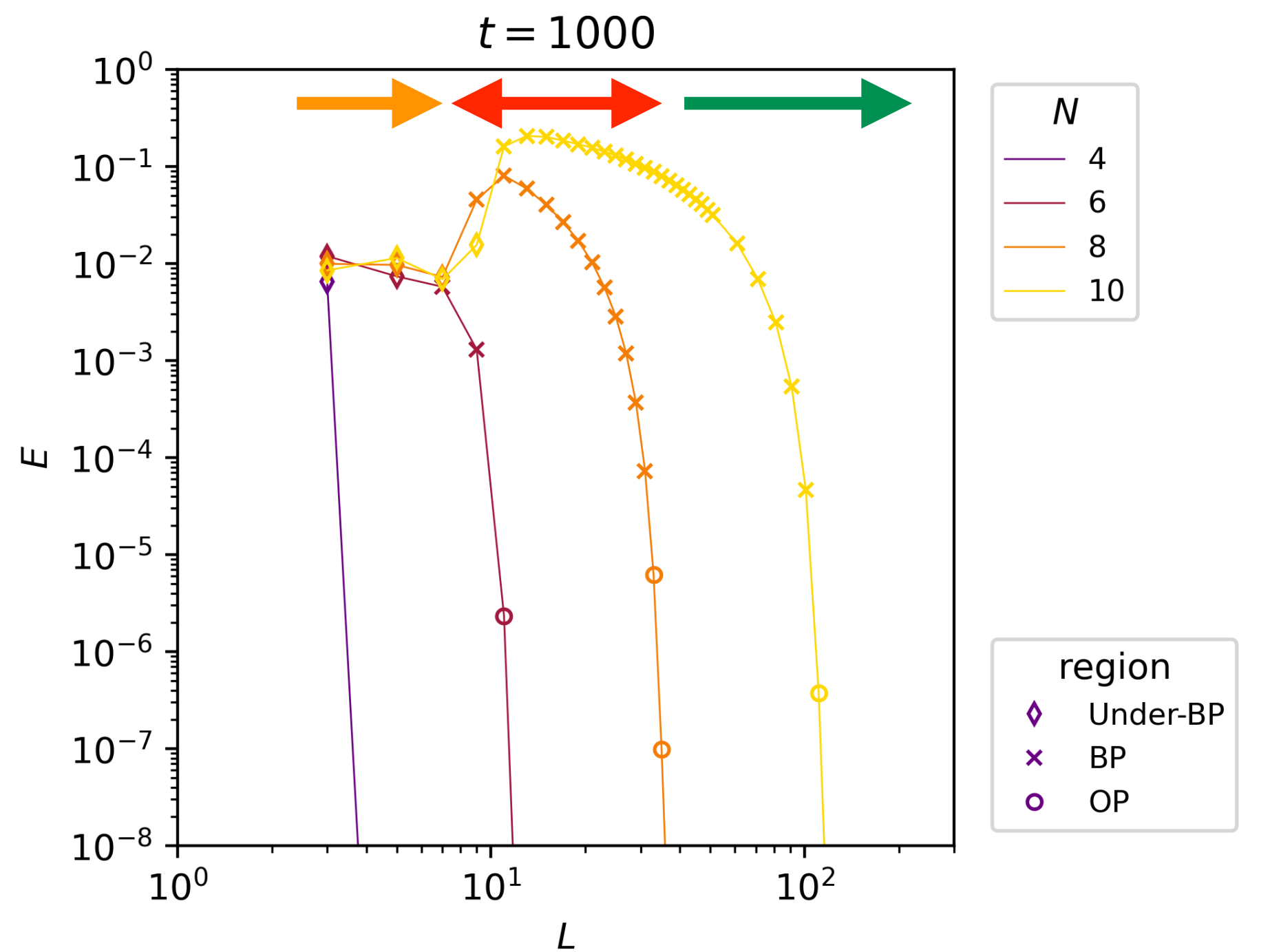
➡ HEAの動的Lie代数と無矛盾

Larocca et al.,
[Nature Computat. Sci. 3, 542 \(2023\)](#)

L 小 表現能力が小さく収束性は悪い

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



機械学習モデルの汎化性

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

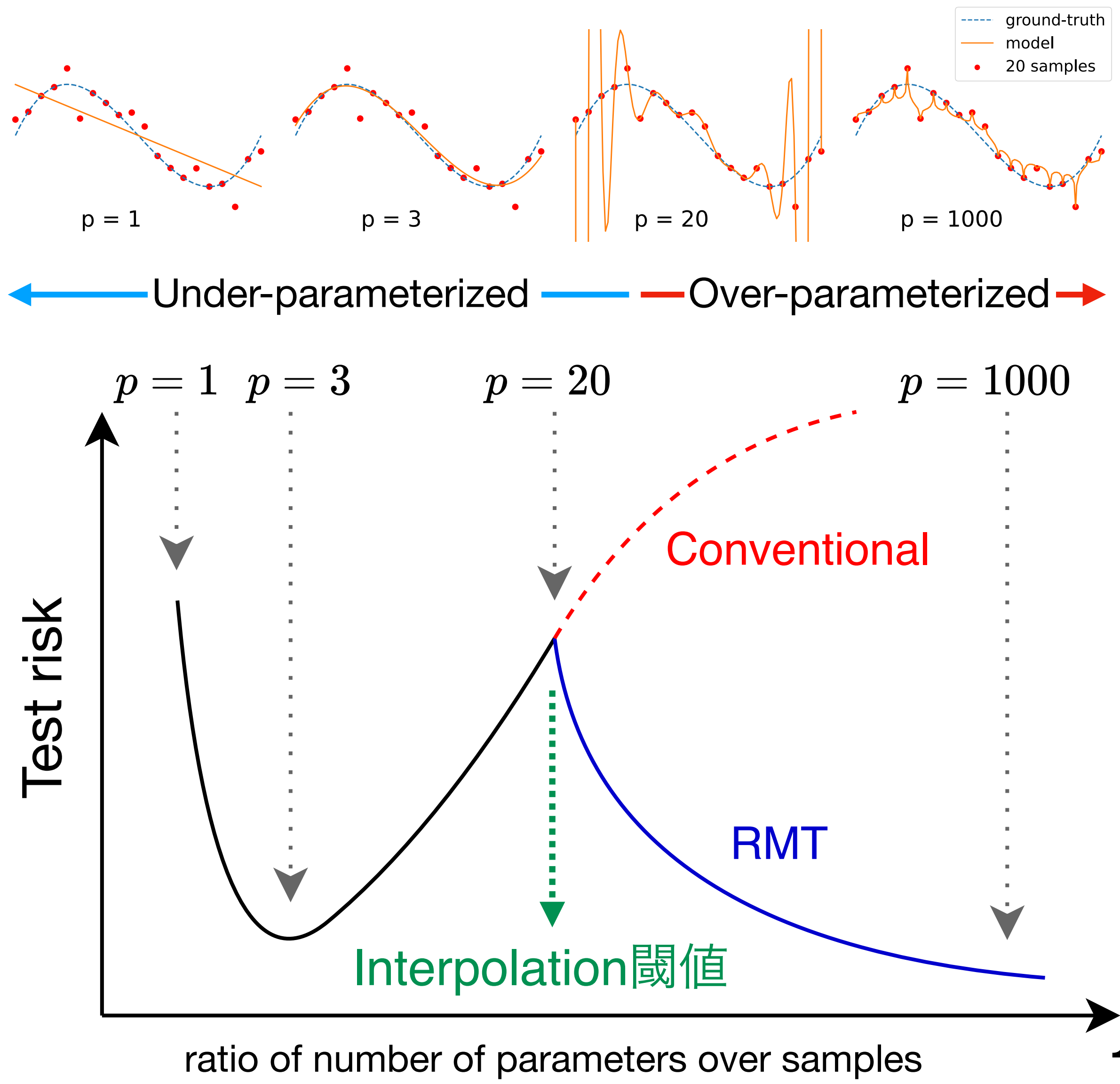
➡ 二重降下現象

量子学習モデルでも二重降下現象は起こるか？

ポスター発表予定



上曾山健介
(博士課程2年)



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**



Z. Li

(→ 民間企業)

Li, Nagano, Terashi, [Phys. Rev. Res. 6, 043028 \(2024\)](#)

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

変分量子回路を用いない状態識別

情報量を用いた量子状態識別を行うアルゴリズムを提案

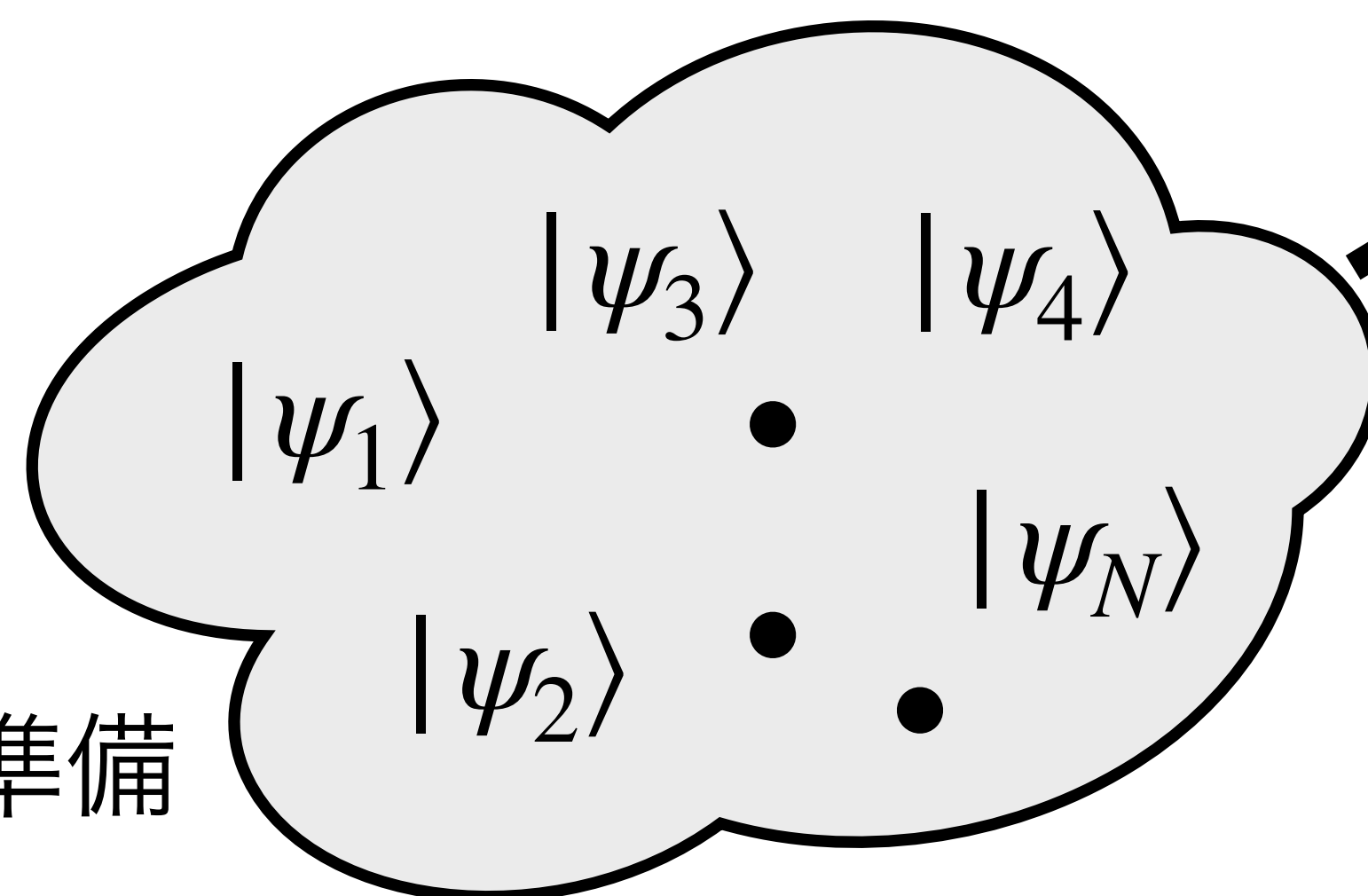
- ▶ 量子コンピュータはデータ収集のためだけに使用
- ▶ 収集したデータを使って古典的に状態識別を行う

学習タスク:

候補となる状態のセットから選んだ未知の状態を識別する

① 候補の状態

$\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$ を準備



② テスト状態 $|\psi_?\rangle$ を選別



③ テスト状態のラベルを $\{1, 2, \dots, N\}$ から決定

情報量とベイズ則による状態識別

提案する量子状態識別アルゴリズム

観測量の測定時に得られる情報量を活用した状態識別

- ▶ 最初に、テスト状態が*i*番目の候補状態である確率 $p(i)$ を評価
- ▶ 観測量のセット $\{\mathcal{O}_j\}$ を使ってテスト状態を単一ショットで測定、結果を元にベイズ則に従って $p(i)$ を更新
- ▶ 測定前後の情報エントロピーの差から情報の利得を計算
- ▶ 最も利得の大きな観測量を決定し、その測定から $p(i)$ を更新
- ▶ $p(i)$ が閾値に到達するまで繰り返す

$$p(i) \rightarrow p_j(i|\pm 1) = \frac{p(i)(1 \pm \langle \mathcal{O}_j \rangle_i)}{\sum_{k=0}^N p(k)(1 \pm \langle \mathcal{O}_j \rangle_k)}$$

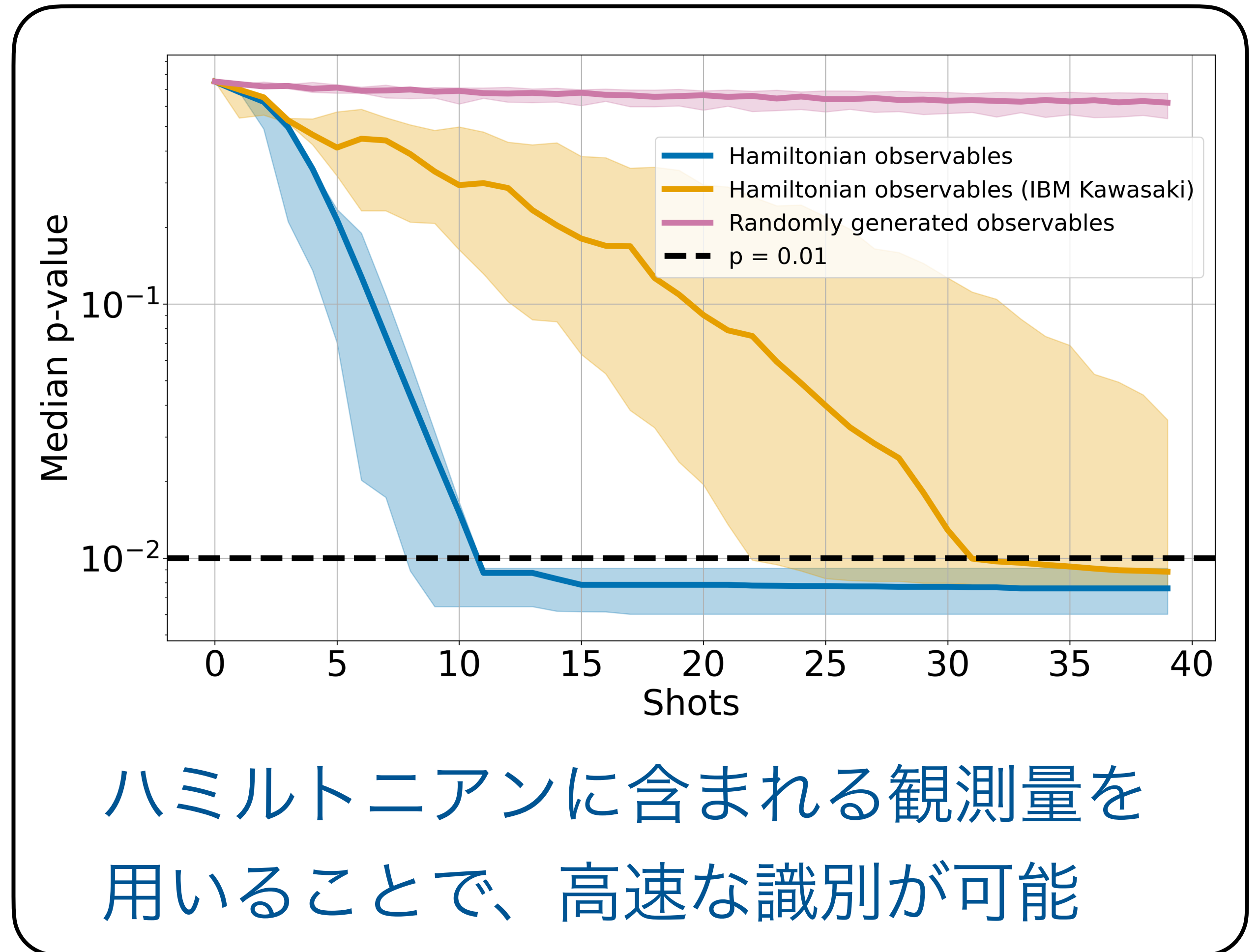
Li, Terashi, [arXiv:2502.11412](https://arxiv.org/abs/2502.11412)

Accepted by IEEE Transactions on Quantum Engineering

基底状態識別への応用

スピン系の基底状態識別を、量子コンピュータの実機を使って検証

- ▶ 4つのスピンモデル（10量子ビットシステム）
- ▶ ハミルトニアンパラメータを変え、VQEで基底状態を複数生成
- ▶ 観測量を変えてテスト基底状態を測定し、どのスピンモデルに属するかを判定



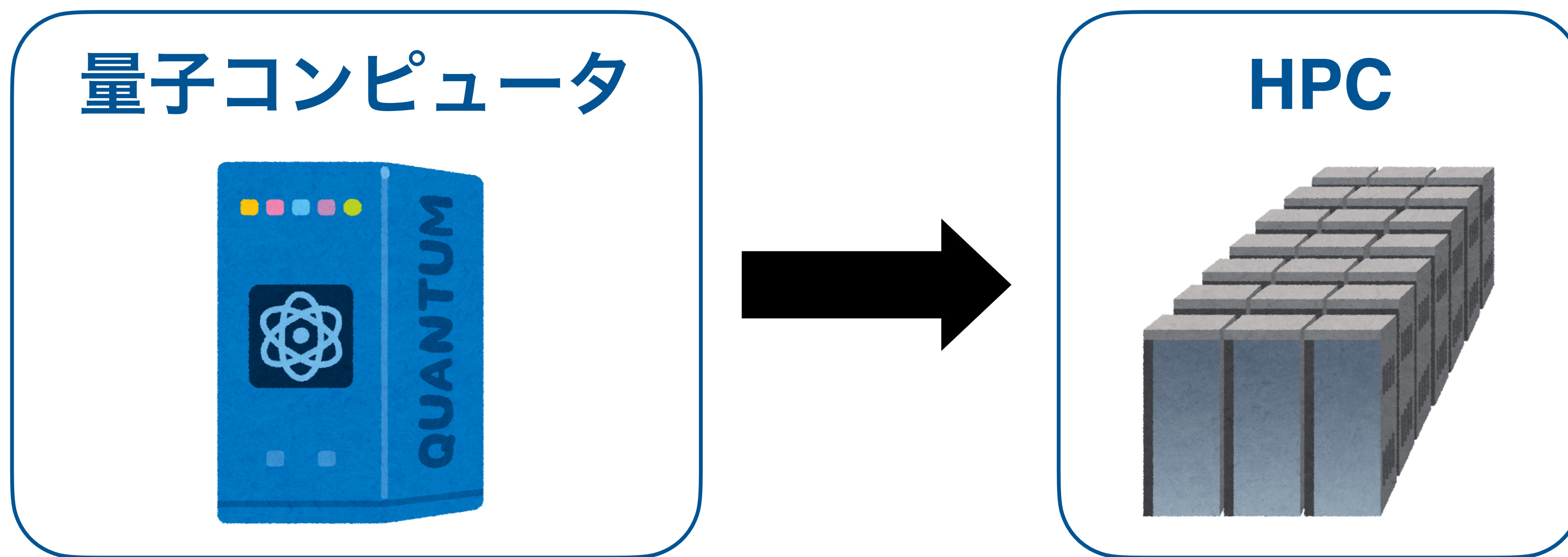
問題に適した観測量の選別によって、より複雑な量子系の識別も可能

量子・古典ハイブリッド計算

量子コンピュータで状態生成、古典コンピュータの後処理で物理量測定というアプローチを考える

量子・古典ハイブリッド計算

量子コンピュータで状態生成、古典コンピュータの後処理で物理量測定というアプローチを考える



量子状態の生成・サンプリング

エラーの訂正

ハミルトニアンの対角化

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

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

Shirakawa et. al, [arXiv:2511.00224](https://arxiv.org/abs/2511.00224)

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



IBM Quantum

- ▶ 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

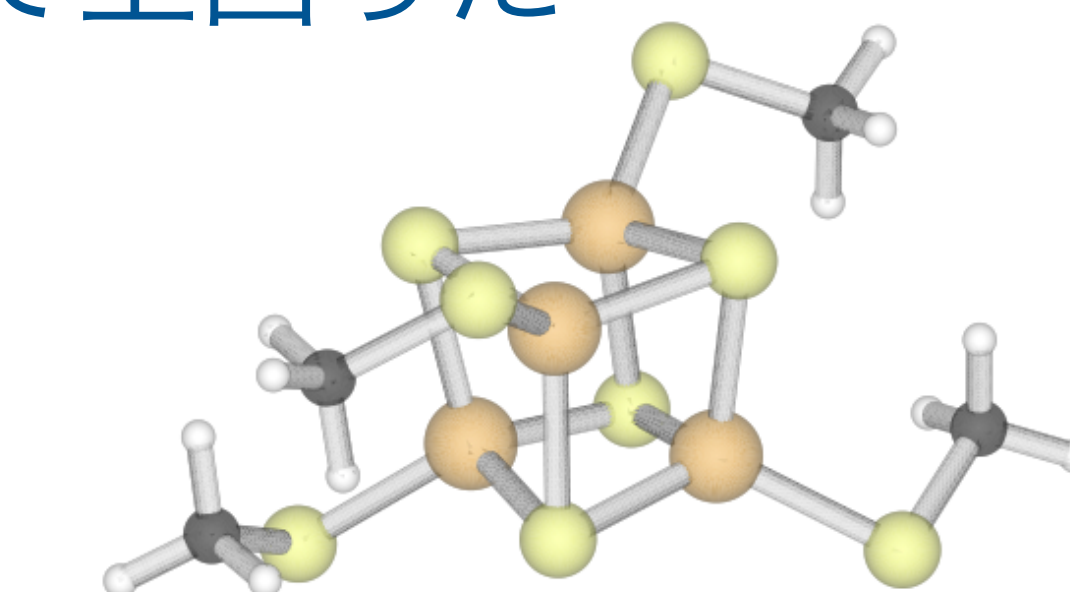
ibm_marrakesh



156量子ビット
Heron r2

+

富岳



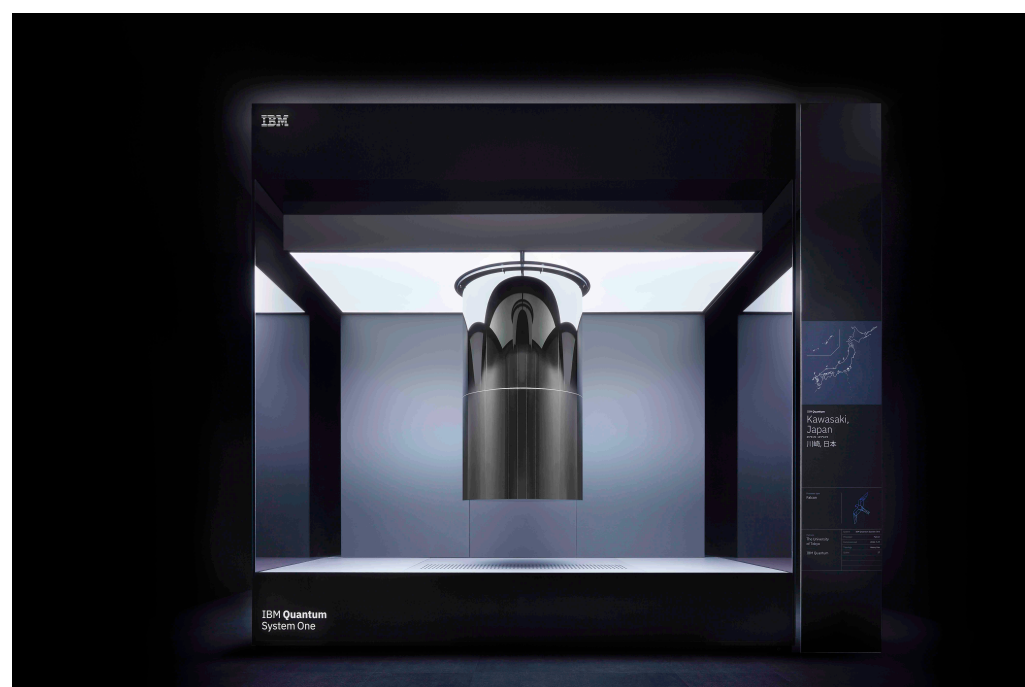
152,064ノード

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

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

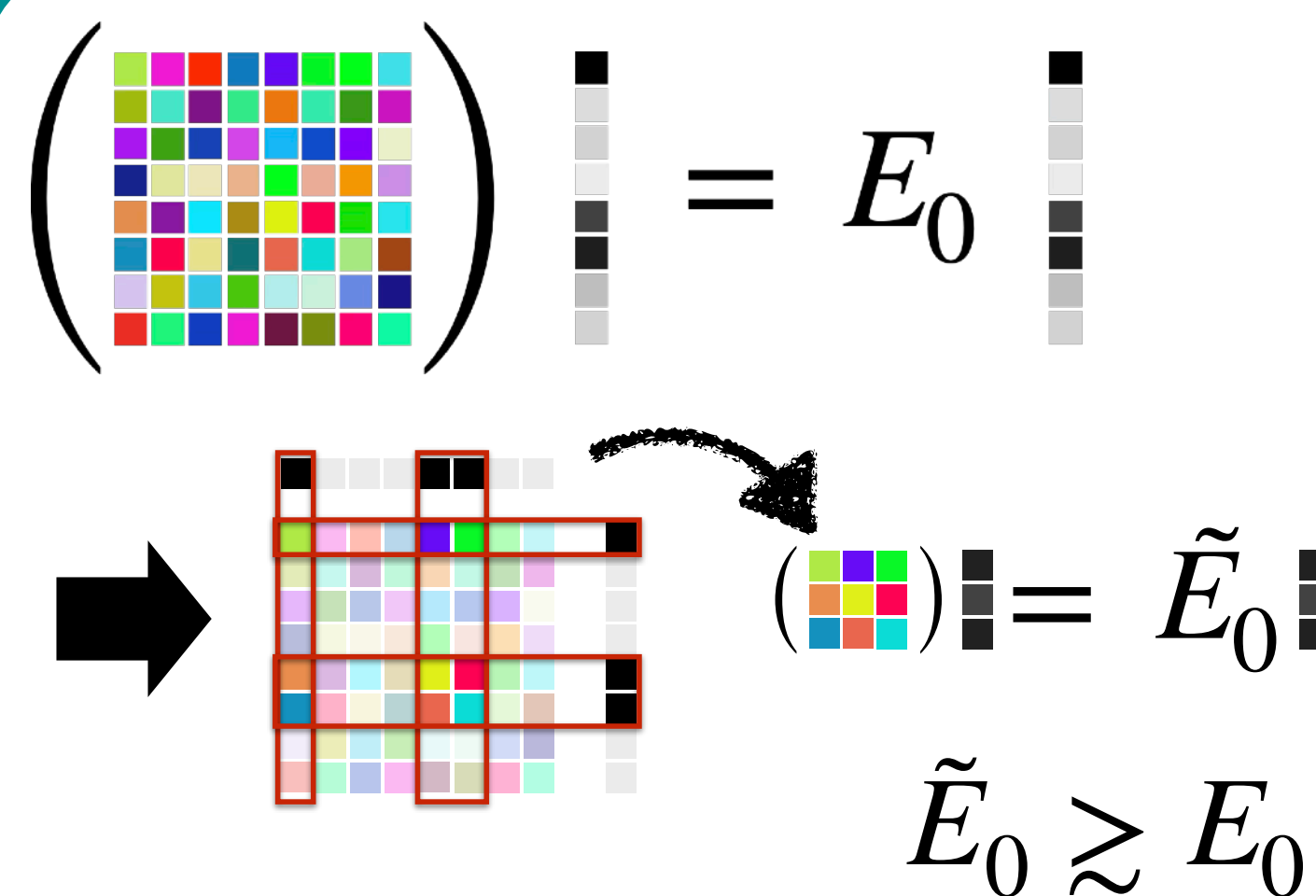
クリロフ部分空間で基底状態を表現し、そのサンプリングを元にハミルトニアンを対角化

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 Δt 、 $U = e^{-iH\Delta t}$ に対して
 $|\Omega\rangle \in \lim_{D \rightarrow \infty} \text{span}\{U^n |\psi_0\rangle\}_{n=0}^D$

➡ 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



- ▶ 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 $H = - \sum_{e \in \mathcal{E}} Z(e) - \lambda \sum_{p \in \mathcal{P}} \prod_{e \in \partial p} X(e)$

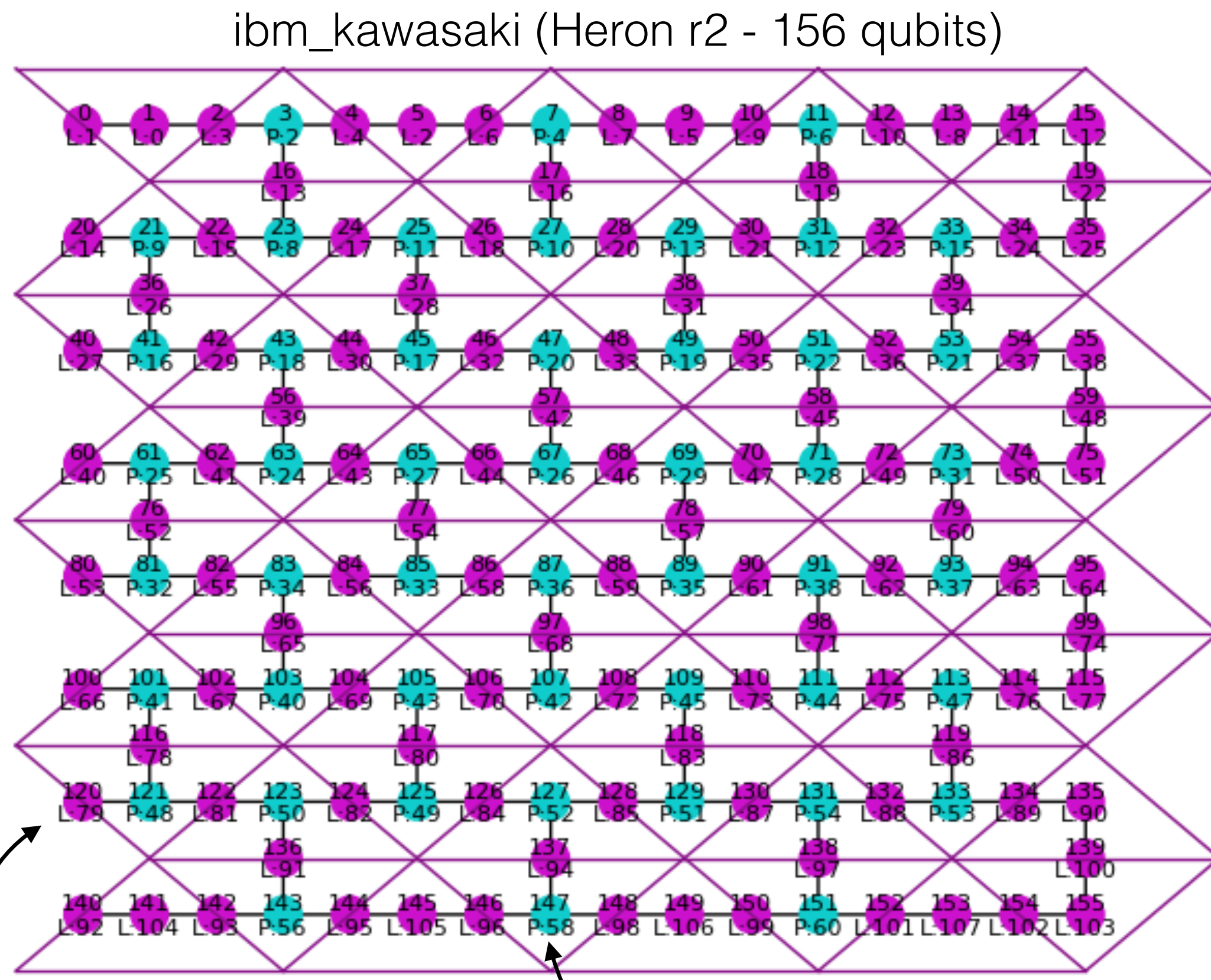
$e \in \mathcal{E}$ ← edges $p \in \mathcal{P}$ ← plaquettes

- ▶ ボソンのみのモデル
- ▶ 三角格子にボソンを配置

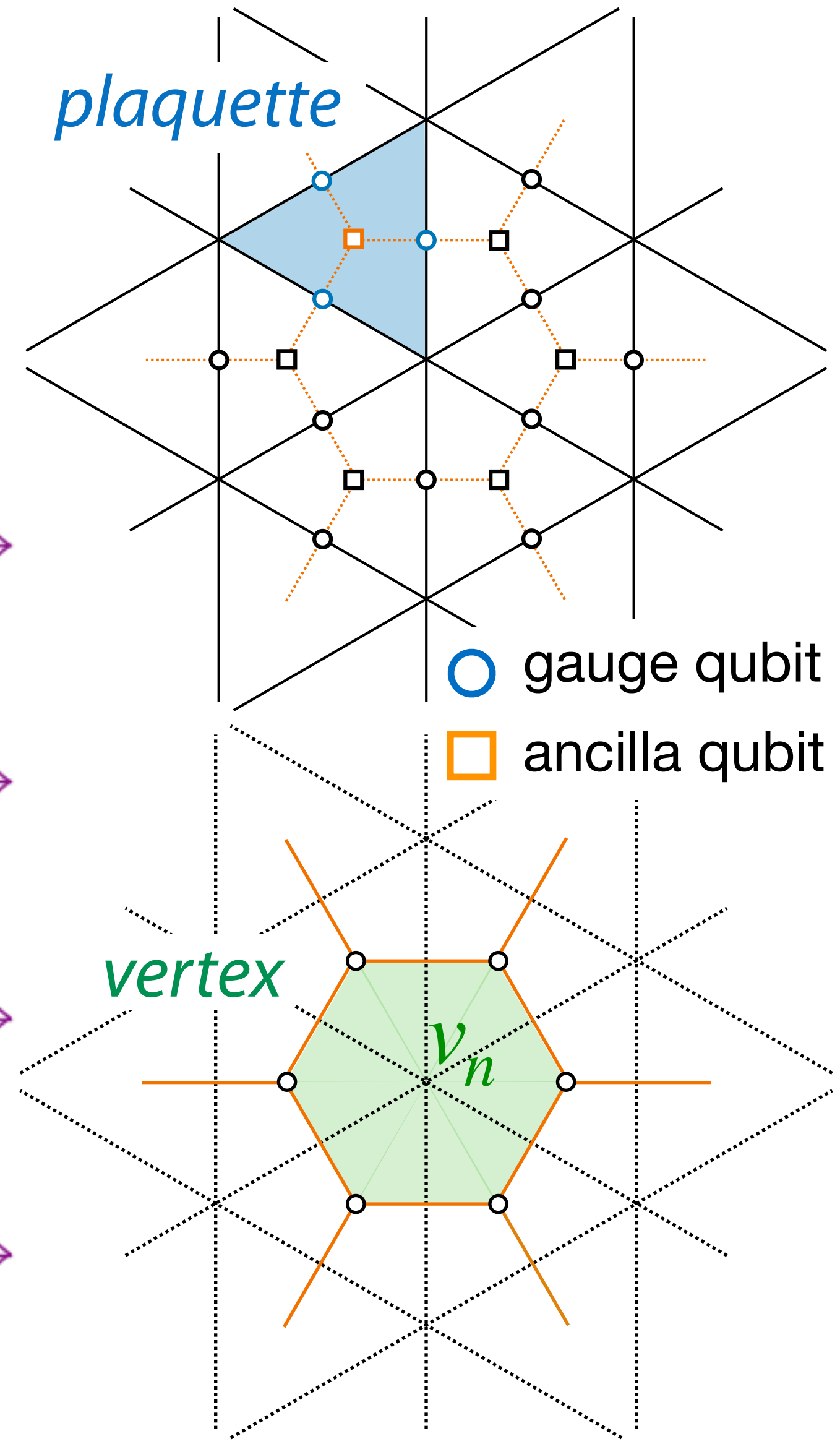
➡ Heronの全156量子ビットを利用

三角格子を用いた先行研究：

- ▶ Cobos et al., [arXiv:2507.08088](https://arxiv.org/abs/2507.08088)
- ▶ Banarjee et al., [Phys. Rev. Res. 4, 023176 \(2022\)](https://doi.org/10.1103/PhysRevRes.4.023176)



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



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 |

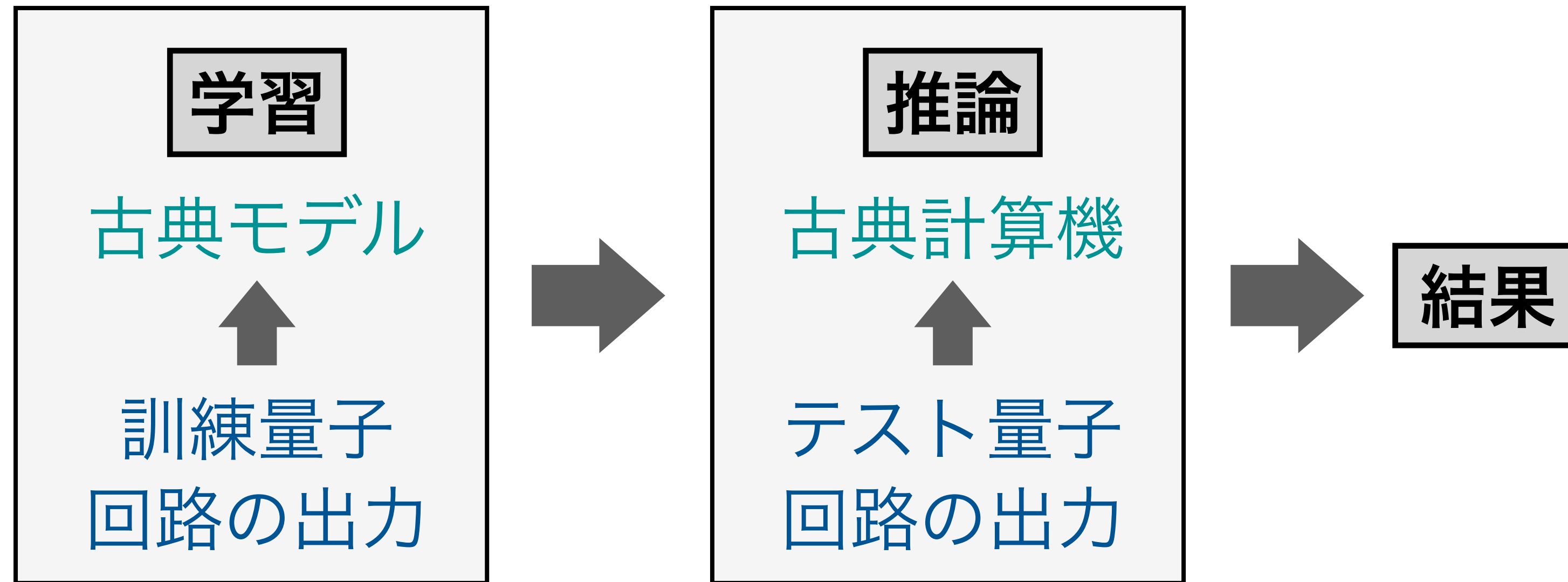
論文を準備中

量子コンピュータのダイナミクスを古典学習できるか

量子回路からの出力に対する古典学習の可能性

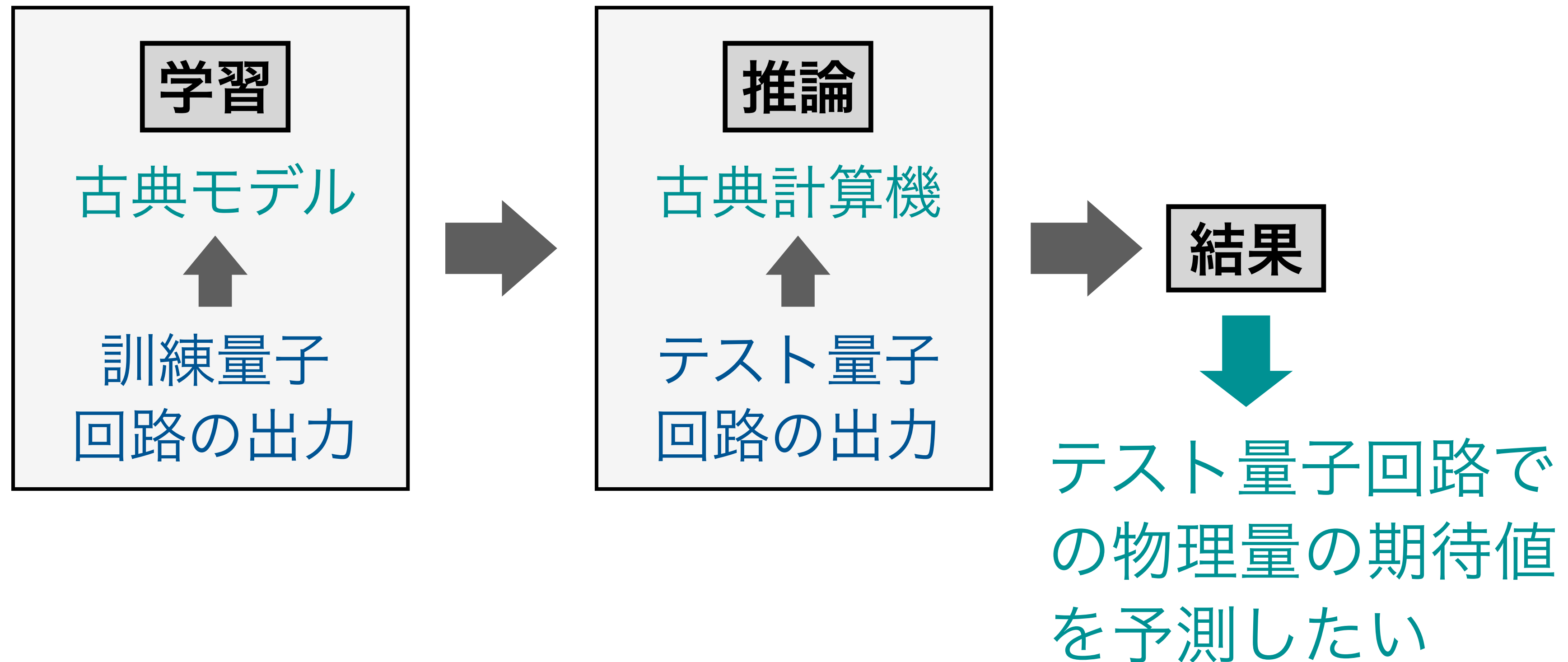
量子コンピュータのダイナミクスを古典学習できるか

量子回路からの出力に対する古典学習の可能性



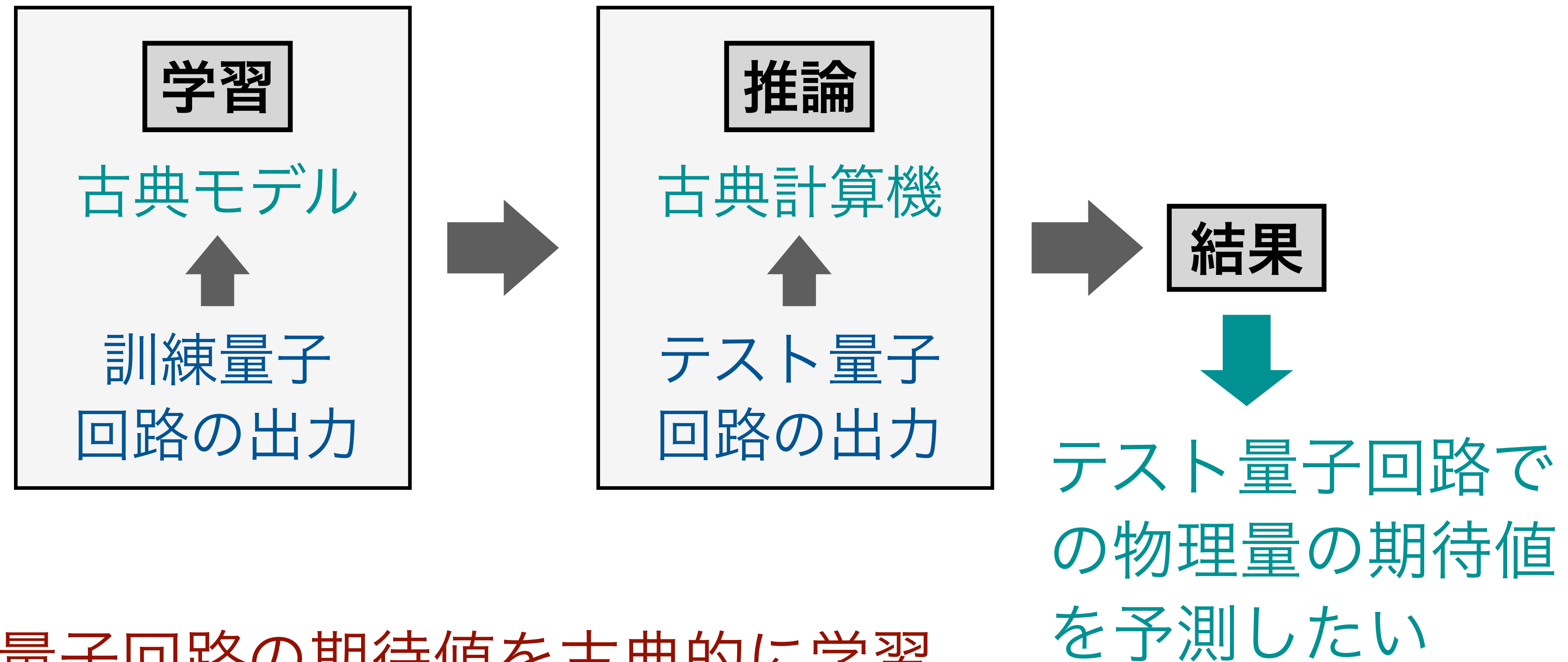
量子コンピュータのダイナミクスを古典学習できるか

量子回路からの出力に対する古典学習の可能性



量子コンピュータのダイナミクスを古典学習できるか

量子回路からの出力に対する古典学習の可能性



一般的な量子回路の期待値を古典的に学習するには、通常大きなコストがかかる

4) 現実的な有界ゲート量子回路の期待値計算に対する古典学習

量子回路の線形特性に対する古典学習

Du, Hsieh, Tao, [Nat. Commun. 16, 3790 \(2025\)](#)

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

- ➡ 量子状態の測定データから、期待値 $\text{Tr}[\rho(x)O]$ を古典的に学習
 - ▶ 必要な学習データ数は $R_Z(\theta)$ ゲート数 d に対して線形にスケール
 - ▶ 学習・予測にかかる計算時間が d に対して指数スケールする回路が存在する

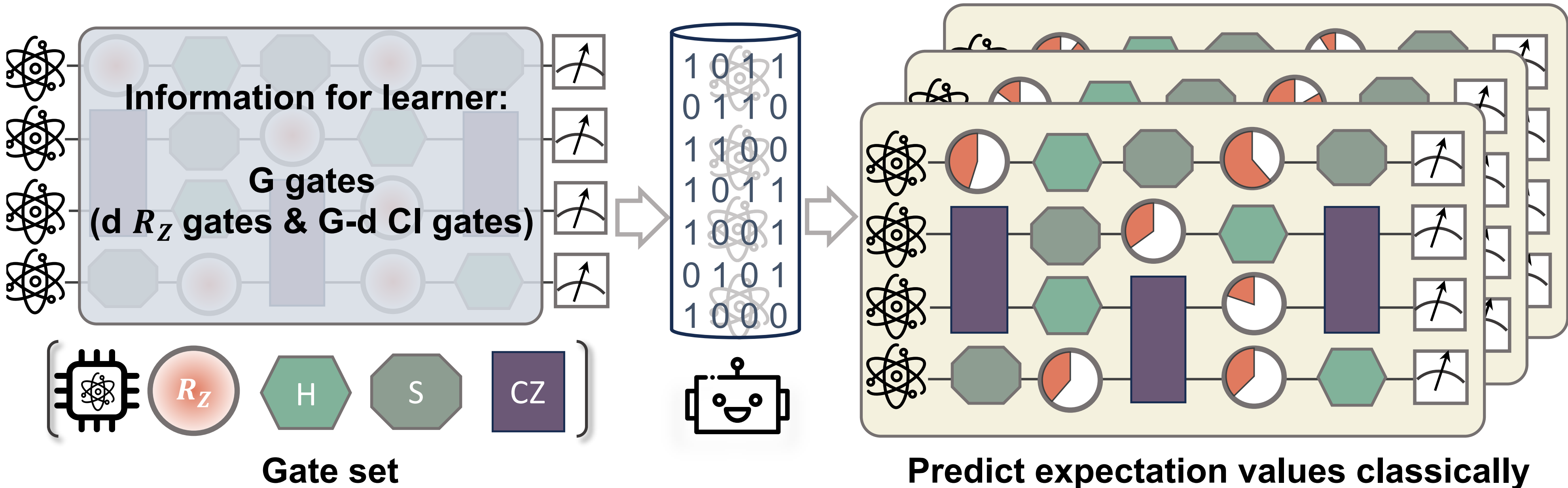


Fig. 1 of Du, Hsieh, Tao

量子回路の線形特性に対する古典学習

Du, Hsieh, Tao, [Nat. Commun. 16, 3790 \(2025\)](#)

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

- ➡ 量子状態の測定データから、期待値 $\text{Tr}[\rho(\mathbf{x})O]$ を古典的に学習
 - ▶ 必要な学習データ数は $R_Z(\theta)$ ゲート数 d に対して線形にスケール
 - ▶ 学習・予測にかかる計算時間が d に対して指数スケールする回路が存在する

➡ 古典シャドウとカーネルベースの学習モデル

- ▶ 古典シャドウを用いて求めた期待値を三角関数で展開、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

まとめ

量子機械学習の進展と応用可能性について、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) 現実的な有界ゲート量子回路の期待値計算に対する古典学習

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