

2026-02-06 @ 量子ソフトウェアシンポジウム
量子計算と機械学習の融合ー量子機械学習の現実社会への実装

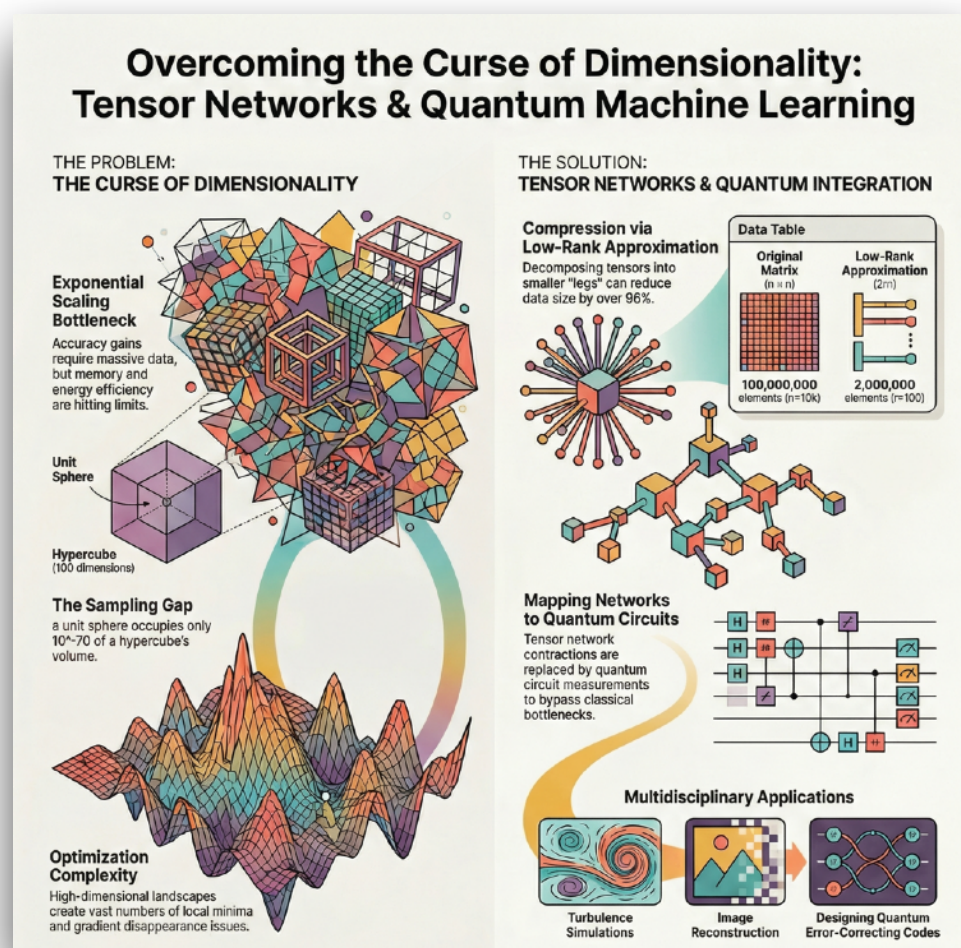


テンソルネットワークとサンプリングによる量子機械学習

Synge Todo / 藤堂眞治
Department of Physics, University of Tokyo
東京大学大学院理学系研究科

目次

- テンソルネットワークとは何か
- データ科学・機械学習への応用
- 生成モデルとしての量子状態
- テンソルネットワークとサンプリング
- 量子回路への埋め込み
- 教師あり学習とポストセクション問題
- 断熱エンコーディング
- まとめと今後の展望



AIの発展と課題

• AIの成功を支える3つの要素

- アルゴリズム: アテンション機構やU-NETなどの機械学習アーキテクチャ、バックプロパゲーションなどの最適化手法の発展
- ビッグデータ: インターネットを通じた豊富な学習データ
- ハードウェア: 並列化やGPGPUなどのコンピュータハードウェアの進歩

• AIの課題(限界)

1. アルゴリズムのスケーリングの課題

- 精度を上げるにはより大量の学習データと複雑な学習モデルが必要

2. ビッグデータの課題

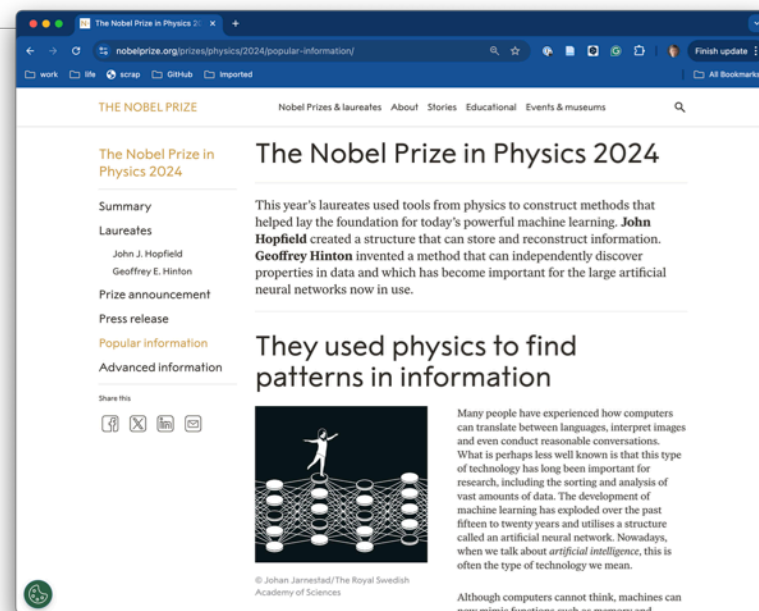
- 良質な学習データ(テキスト、画像、実験、シミュレーションデータなど)の枯渇

3. ムーアの法則の終焉

- HPC技術における微細化・エネルギー効率の限界

4. 最適化における困難

- 非凸性の高いランドスケープにおける膨大な数の局所最小解の存在、勾配消失



量子回路

- 量子回路 = 量子ビットに演算するゲート操作の回路図

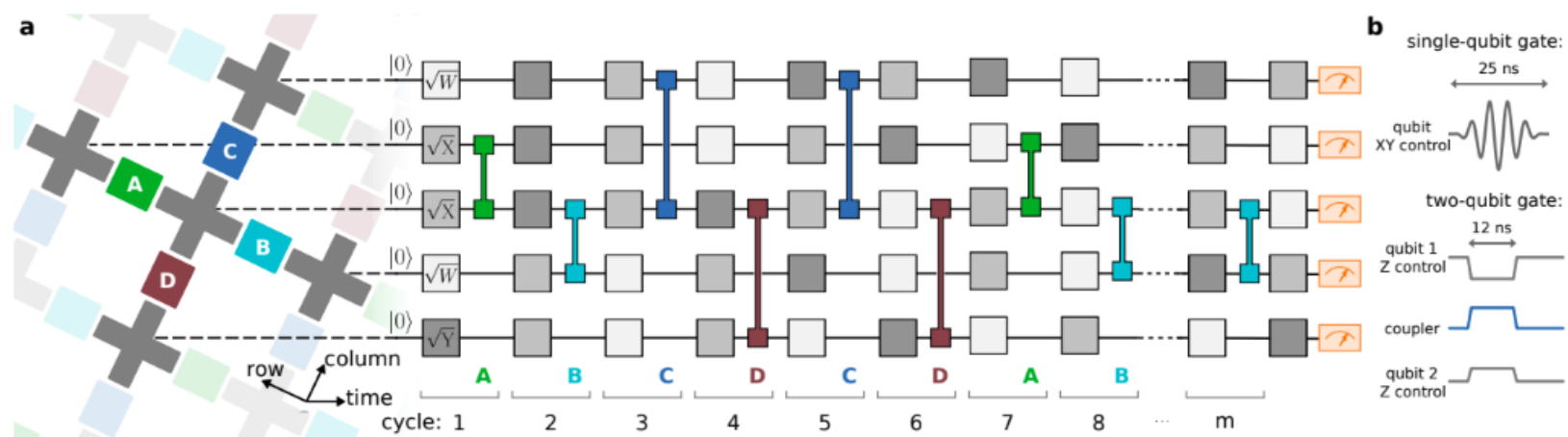
- 量子ビット(qubit)

- $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせの状態をとる

- N -qubitの量子回路 $\rightarrow N$ 個の $S = 1/2$ スピン

- ヒルベルト空間の次元: 2^N

- 量子計算 = 重ね合わせ + 並列性 + 干渉 + 測定による収縮



Arute, F., Arya, K., Babbush, R. et al. Nature 574, 505 (2019)

量子多体系の波動関数

- 量子多体状態 $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

- N スピン系
 - ハミルトニアン $\rightarrow 2^N \times 2^N$ の行列
 - 波動関数の係数
 - $\rightarrow 2^N$ の長さのベクトル (or N 本足のテンソル)
- N が大きくなると行列の次元、波動関数のサイズは指数関数的に増加
 - 古典計算は困難



次元の呪い (curse of dimensionality)

- 高次元でサンプル数が爆発
- n 元超立方体(1辺の長さ 2, 体積 2^n)に対する n 次元単位球の体積の割合

$$q = \frac{\pi^{n/2} / \Gamma(\frac{n}{2} + 1)}{2^n} \sim (\pi/n)^{n/2}$$

- $n = 10$ で 0.2%, $n = 20$ で 10^{-8} , $n = 100$ で 10^{-70}
- サンプルングで球の体積を計算しようとする時、標準偏差に対する平均値の割合は指数関数的に小さい

$$\frac{q}{\sqrt{q(1-q)}} \sim \sqrt{q}$$

- 次元が高くなるにつれて指数関数的に大きな M が必要となる
- 通常の数値積分などでも同様

テンソルとテンソルのダイアグラム表記

- テンソル: n 次元的な数字の並び (=多次元配列)
- ベクトル

$$\vec{v} : v_i \quad \text{●} \text{---} \overset{i}{}$$

- 行列

$$M : M_{i,j} \quad \text{---} \text{●} \text{---} \overset{j}{}$$

- 3階テンソル

$$T : T_{i,j,k} \quad \text{---} \text{●} \text{---} \overset{j}{} \underset{k}{}$$

- n 階テンソル $\rightarrow n$ 本の足

- スカラー(数字) \rightarrow 足なし



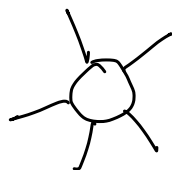
テンソルのデータ量

- 全ての足の次元を χ と仮定すると

- 2本足テンソル = $\chi \times \chi$ 行列

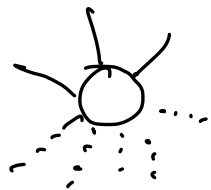
$$O(\chi^2)$$

- 5階テンソル



$$T_{ijkln} \quad O(\chi^5)$$

- n 階テンソル



$$O(\chi^n)$$

- 足の本数が増えるにつれて、データ量(=要素数)は指数関数的に増える

- 注: 足の次元(ボンド次元と呼ぶ)は χ あるいは D であらわすことが多い

テンソルの縮約

- テンソルの縮約 (contraction)

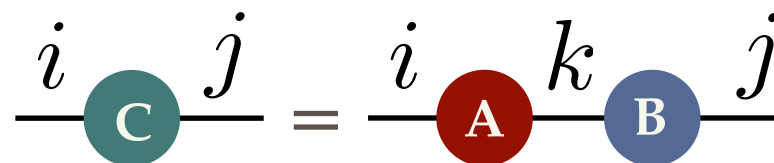
- 共通する足について和を取る

- 2階テンソル同士の縮約 → 結果は2階テンソル

- 行列行列積

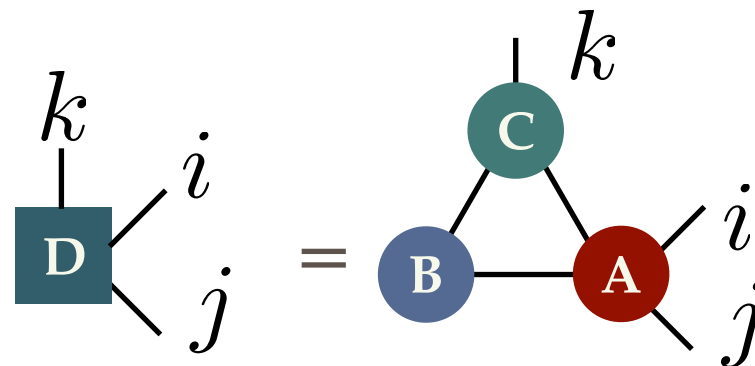
$$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$$

$$C = AB$$



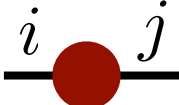
- 一般のテンソルの縮約も同様に表現できる

$$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$

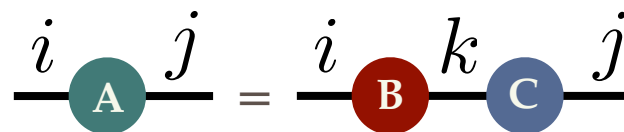


行列のテンソル表現と低ランク近似

- 行列 $A : A_{ij}$ (二次元データ) = 2本足テンソル

- ダイアグラム表現 

- 行列を2つの行列の積への分解



$$A_{ij} = \sum_k B_{ik} C_{kj}$$

- k の次元を「行列のランク」と呼ぶ

- 低ランク近似

- $n \times n$ 行列を分解すると通常ランク = n

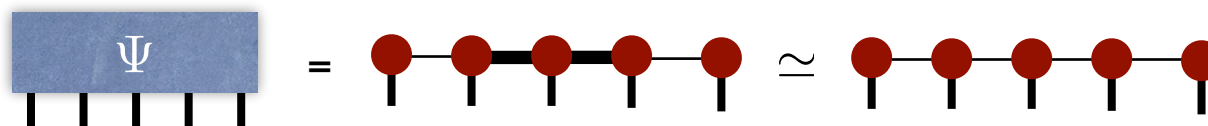
- 重要な r 個 ($r \ll n$) の情報のみ残す

- データサイズ: $n^2 \rightarrow n \times r + r \times n = 2rn$

- 例: $n = 10000, r = 100$ のとき: $n^2 = 100000000 \rightarrow 2rn = 2000000$ (98%削減)

- 「低ランク近似」による情報圧縮

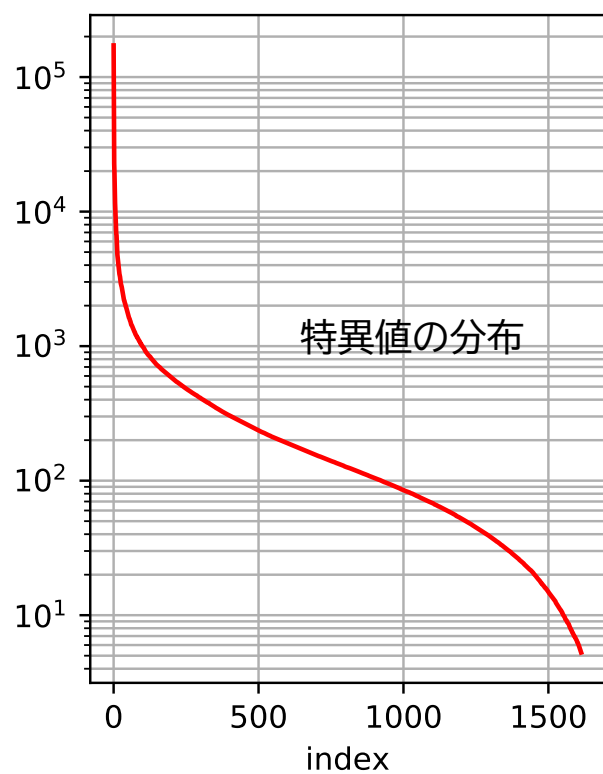
- たくさんの足のあるデータ(=テンソル)も同様に分解・低ランク近似可能



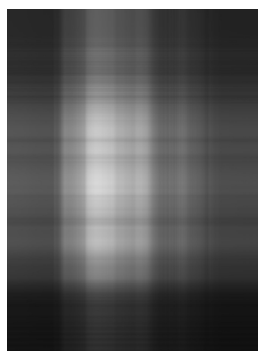
特異値分解による画像圧縮

$$\underset{i}{\overset{j}{\text{---}}} \text{C} \underset{j}{\overset{i}{\text{---}}} = \underset{i}{\overset{i}{\text{---}}} \text{A} \underset{k}{\overset{j}{\text{---}}} \text{B} \underset{j}{\overset{k}{\text{---}}}$$

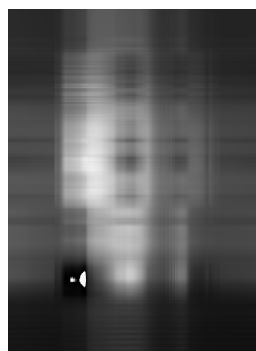
- グレースケール画像(1614 x 2178)を行列とみなして低ランク近似



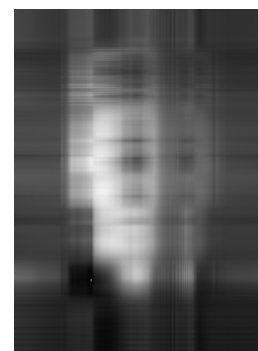
$r = 1$



$r = 2$



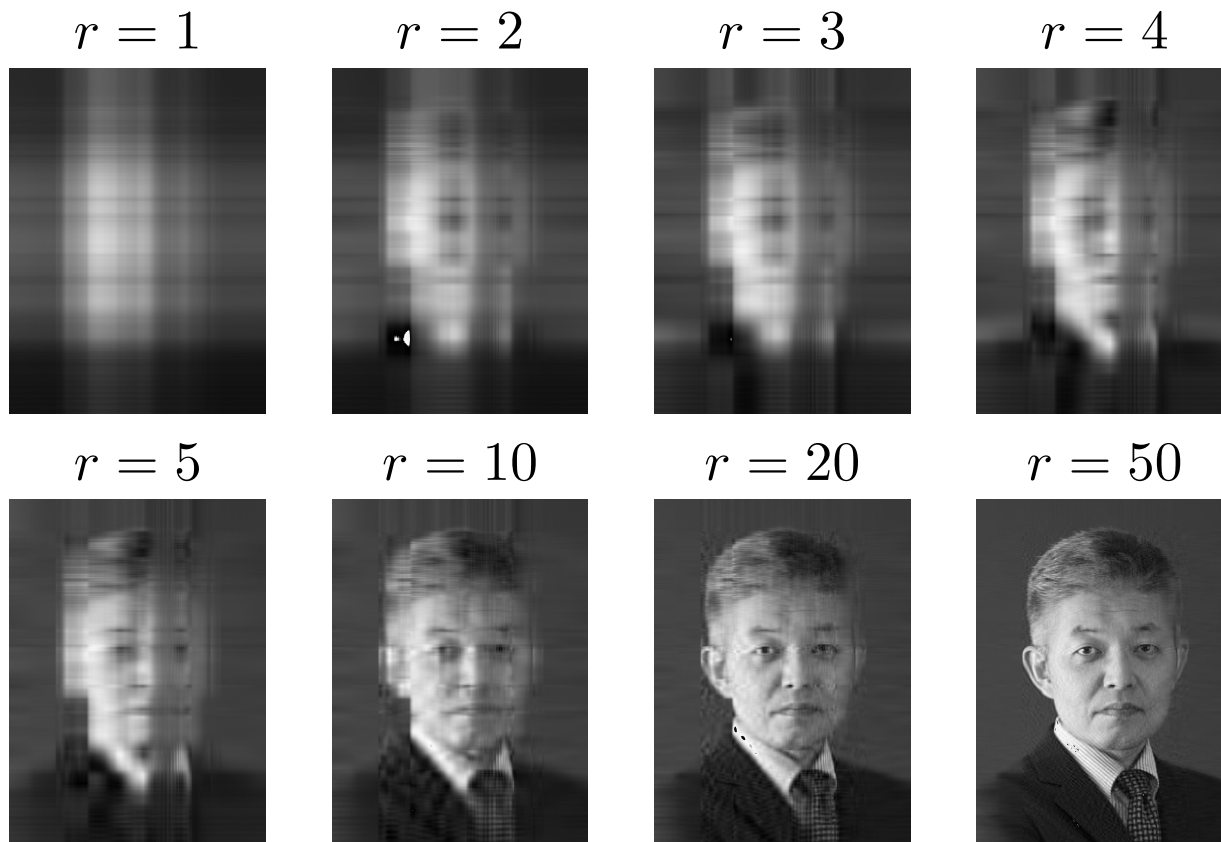
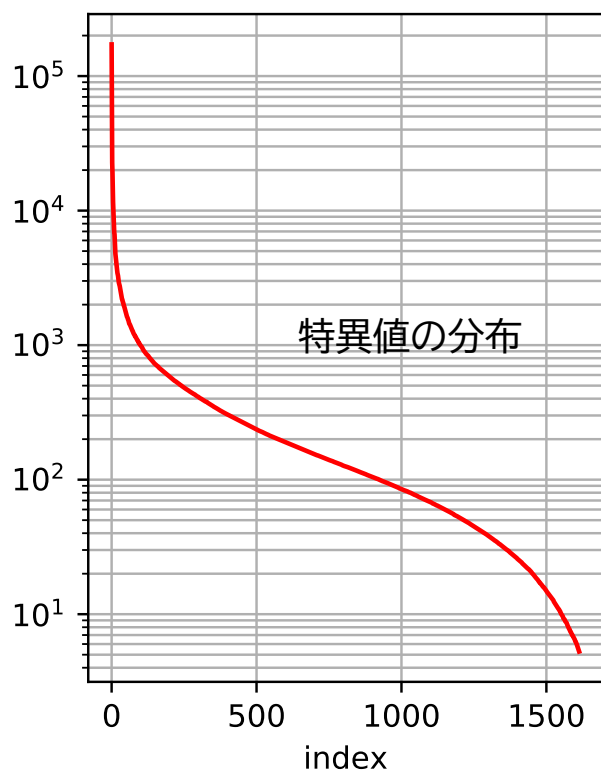
$r = 3$



特異値分解による画像圧縮

$$\begin{array}{c} i \\ \hline \text{C} \\ \hline j \end{array} = \begin{array}{c} i \\ \hline \text{A} \\ \hline k \end{array} \begin{array}{c} k \\ \hline \text{B} \\ \hline j \end{array}$$

- ・グレースケール画像(1614 x 2178)を行列とみなして低ランク近似



様々なテンソルネットワーク表現

• 量子多体系の量子状態: $|\Psi\rangle = \sum \Psi_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle$

• F. Verstraete, J. I. Cirac, arXiv, cond-mat/0407066 (2004)

• G. Vidal, Phys. Rev. Lett. 101, 110501 (2008)

• R. Orús, Ann. Phys. 349, 117 (2014) $Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\})}$

• 統計力学模型の分配関数:

• M. Levin and C. P. Nave, Phys. Rev. Lett. 99, 120601 (2007)

• G. Evenbly and G. Vidal, Phys. Rev. Lett. 115, 180405 (2015)

• 量子回路

• F. Arute, et al., Nature 574, 505 (2019)

• Y. Lie, et al., SC '21 Proceedings, 3 (2021)

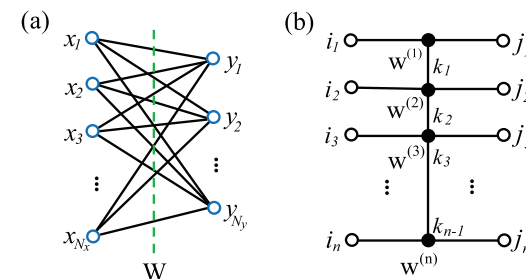
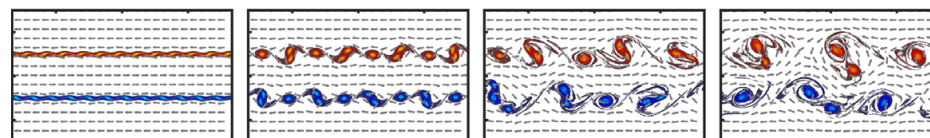
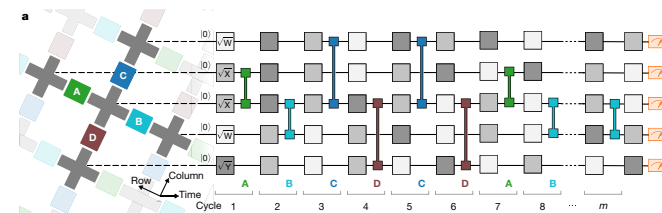
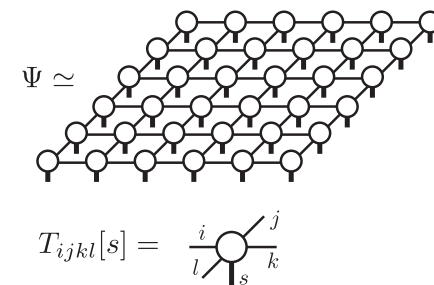
• データ科学・機械学習

• E. Stoudenmire and D. J. Schwab, NIPS 29, 4799 (2016)

• Z.-F. Gao et al., Phys. Rev. Research 2, 023300 (2020)

• Gourianov et al., Nat. Comput. Sci. 2, 30 (2022)

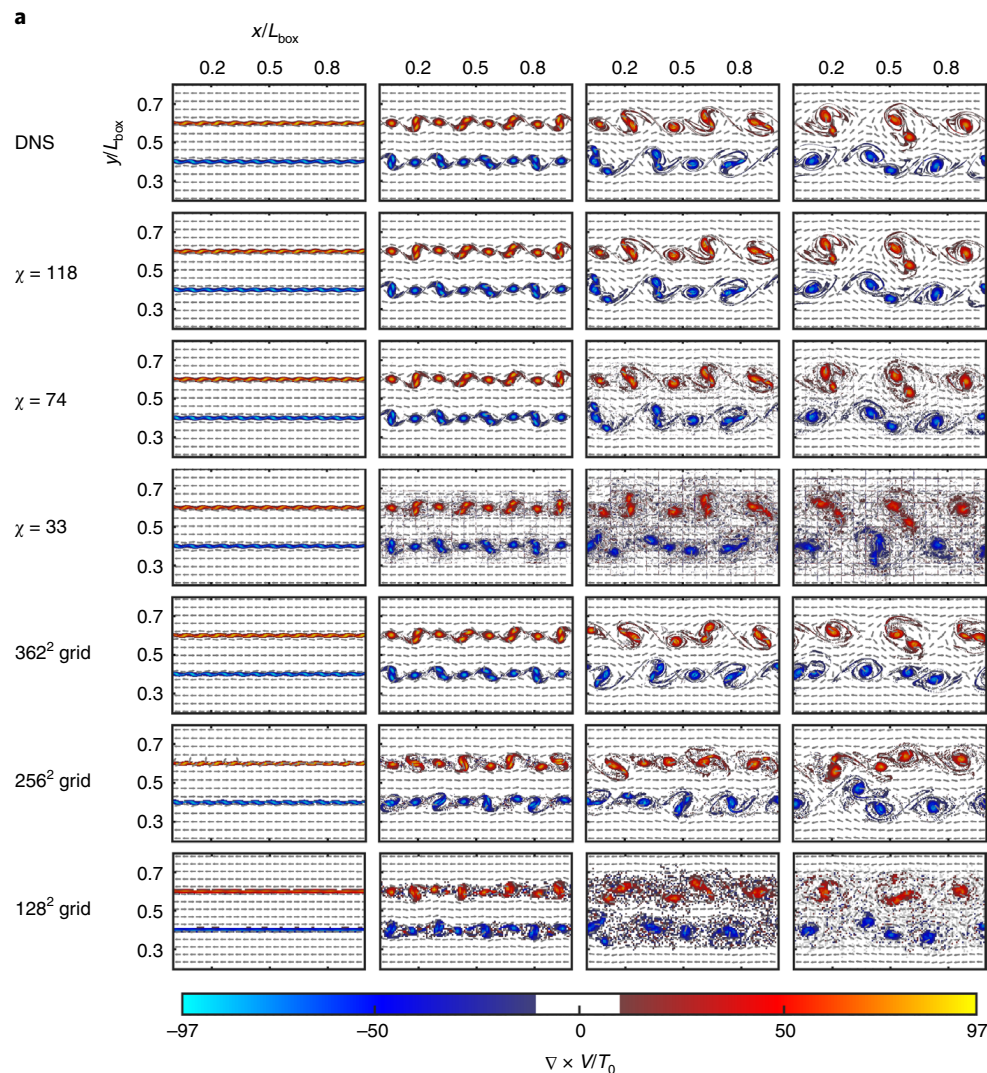
TPS(PEPS)



偏微分方程式のシミュレーション

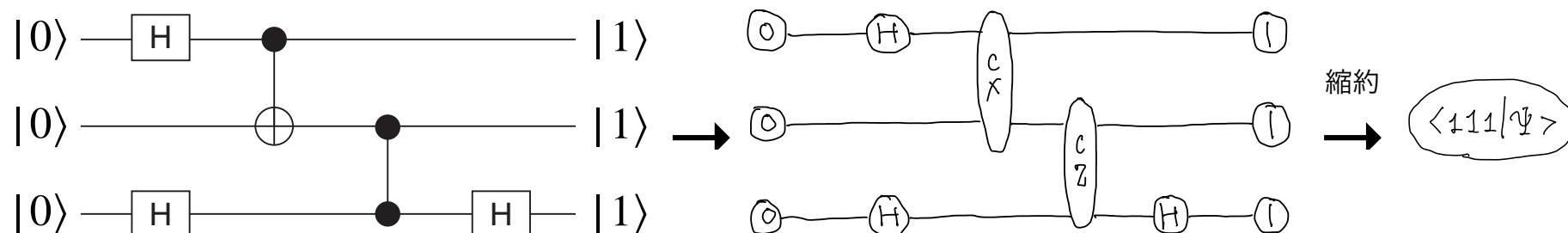
場のテンソルネットワーク表現

- 流れの場、密度の場
 - 同次多項式表現 (quantics tensor train (QTT) representation)
 - 長い空間スケールと短い空間スケールの分離 (低ランク近似)
 - 乱流のように無数の長さスケールが混合場合に有効
-
- テンソルネットワークで圧縮したままでシミュレーションを実行
 - テンソルネットワークを使うことで、乱流を正しく捉えたまま、効率的なシミュレーションが可能



量子回路とテンソルネットワーク

量子回路 ⇒ テンソルネットワーク



- 任意の量子回路はテンソルネットワークとして表現可能

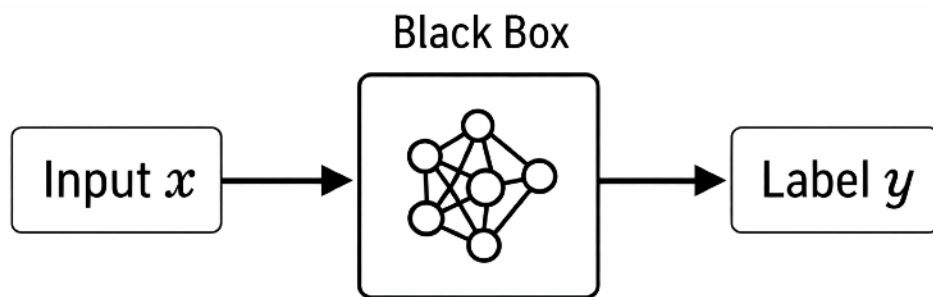
テンソルネットワーク

⇒ 「量子状態・回路を“構造付き”で理解・計算・評価するための共通言語」

- 量子回路の古典シミュレーション（テンソルネットワークシミュレータ）
- 多体量子状態の圧縮表現（変分波動関数）
- 量子誤り訂正コードの設計・解析
- 量子優位性・古典困難性の評価

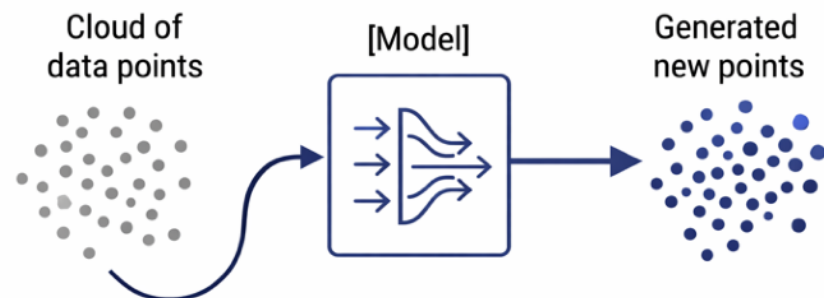
教師あり学習と教師なし学習

教師あり(supervised)



入力からラベルを予測(識別)

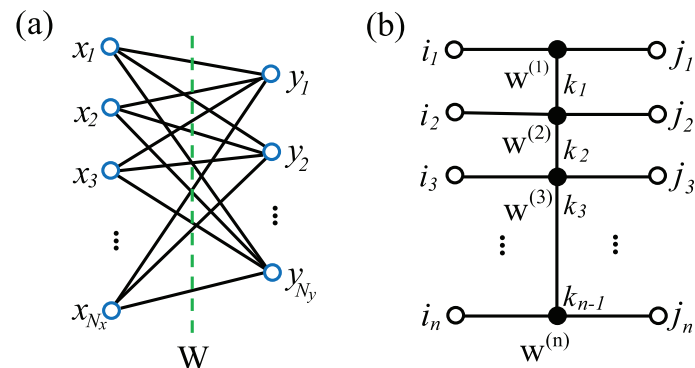
教師なし(unsupervised)



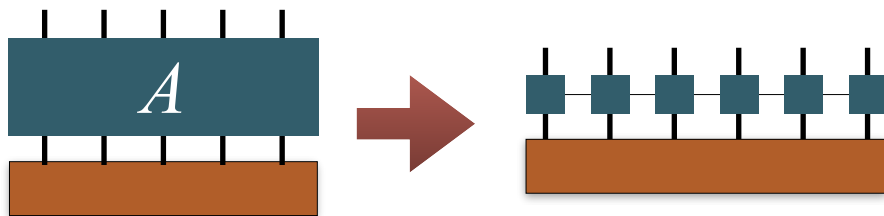
データ分布そのものを学ぶ

機械学習における行列圧縮

- 行列の情報を蓄えるためのデータ量を大幅に圧縮できる
 - テンソルの行列積分解と同様
- 行列の演算コストの低下
 - 大きな行列を直接かける代わりに、小さいテンソルを順番にかけることでコストが低下



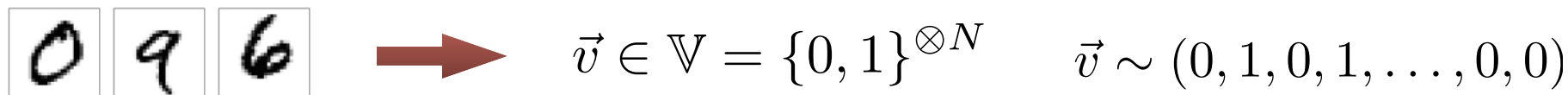
Z.-F. Gao et al, Phys. Rev. Research 2, 023300 (2020)



- 訓練・予測時間の低減
- 無駄な自由度の削減による最適化(訓練)の効率アップ
 - テンソルネットワーク近似で性能が変わらないことは、元の表現には「無駄」が多いことを示唆
 - 過学習の抑制、汎化性能の向上も期待できる

教師なし学習 - 生成モデル

• 手書き数字画像



• 数字として意味のある画像の確率分布: $P(\vec{v})$

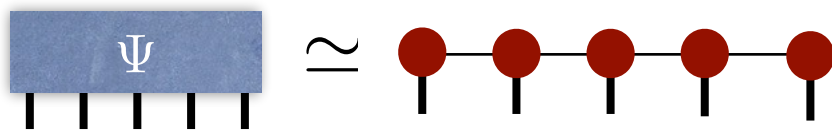
• Born機械 (Born-machine) 表現

• 確率分布を量子状態と対応づける

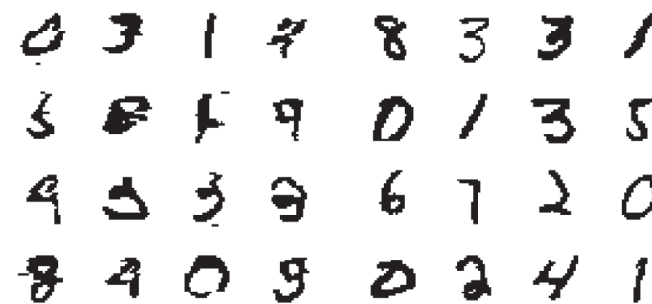
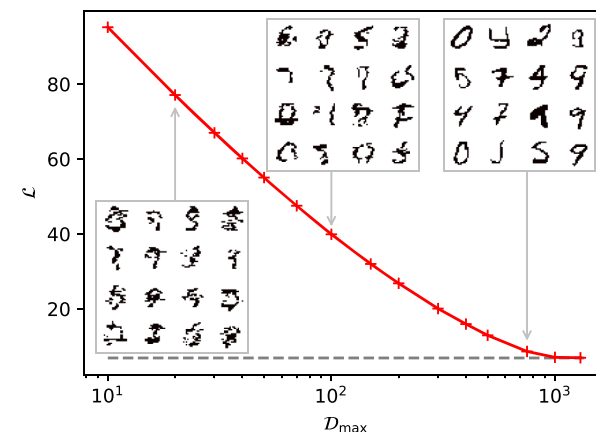
$$|\Psi\rangle = \sum_i \Psi(\vec{v}_i) |\vec{v}_i\rangle \quad P(\vec{v}) = \frac{|\Psi(\vec{v})|^2}{Z}$$

• この量子状態に対して測定を行うと $P(\vec{v})$ の確率で \vec{v} が得られる

• 量子状態のテンソルネットワーク表現



• 負の対数尤度を最小化するようにテンソルを最適化



(a) Generated

(b) Original

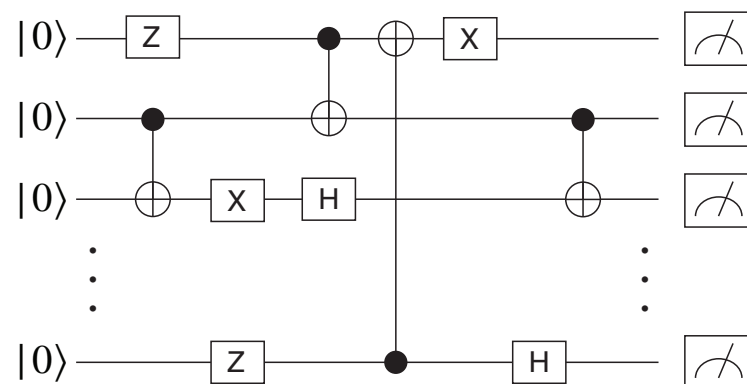
量子回路への埋め込み

• 発想

- テンソルネットワークの計算(縮約)を「量子回路+測定」で置き換える

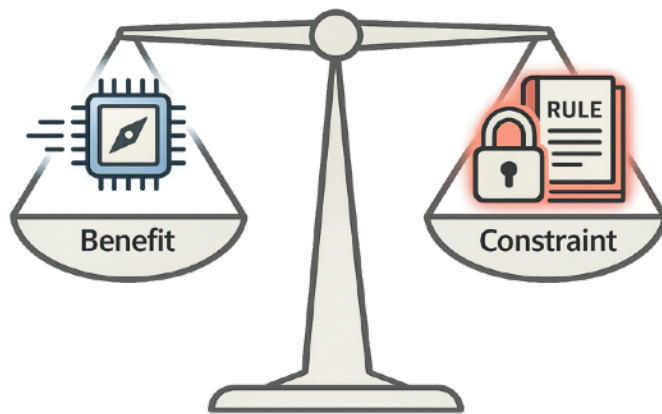
• 量子回路による量子計算

- 状態準備→測定→サンプル生成(ビット列)
- 量子回路は、確率的にビット列を吐き出す「サンプリングマシン」と見なせる



• 「ユニタリ制約」

サンプル生成を量子回路+測定で高速に実行可能
(古典計算のボトルネック回避)



量子操作は「ユニタリ」でなければならない

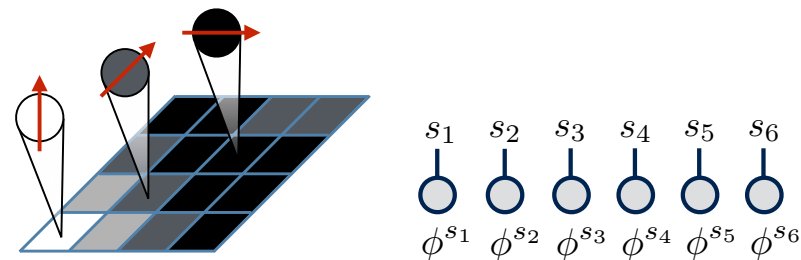
• 一般のテンソルネットワーク

- 非ユニタリな行列を含むため、単純な変換では量子回路に埋め込めない

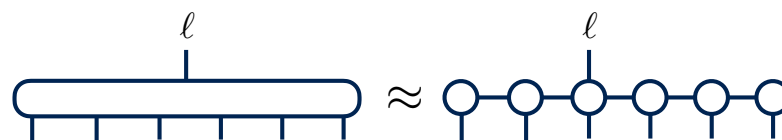
教師あり学習の埋め込み

• テンソルネットワークによる教師あり学習

- 教師あり学習もテンソルネットワークで実現可能
- 入力データ: 量子回路の 初期状態 として符号化
- ラベル: 量子状態の 一部を測定して取得
- 分類問題を「状態準備 + 測定」として定式化



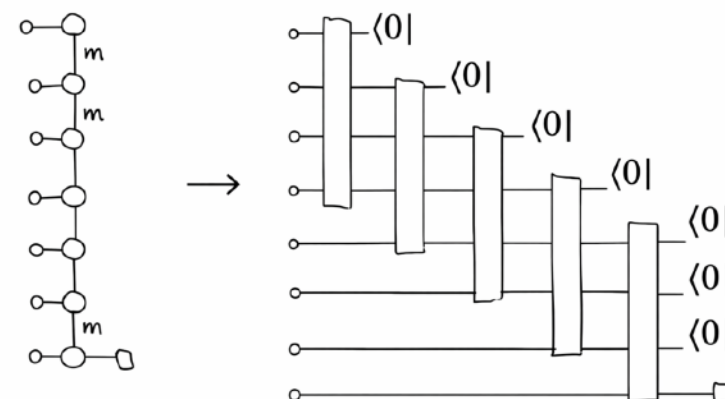
$$\text{Tensor Network Diagram} \stackrel{W^\ell}{=} \square f^\ell(\mathbf{x})$$



Stoudenmire, E. M., & Schwab, D. J. (2016)

• ループのないテンソルネットワーク

- 行列積状態 MPS、ツリーテンソルネットワーク TTN
- 葉から順次「アイソメトリ(isometry)」に変換
- 変換後のテンソルを「ユニタリ」の一部として量子回路に埋め込み



Sugawara, Inomata, Okubo, Todo (2025), Inomata (2026)

ポストセレクション問題

• ポストセレクション

- 一般のテンソル(線形写像)は ユニタリではない
- 回路化の典型的な方法
 - ユニタリの一部に埋め込み
 - 測定により写像を実装
 - 成功=補助量子ビットの測定結果が全て0
 - 成功の場合のみ採用(post-selection)

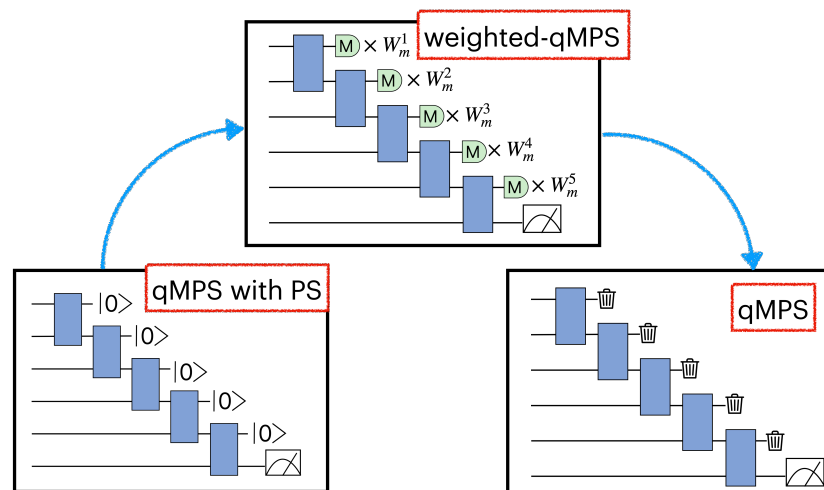
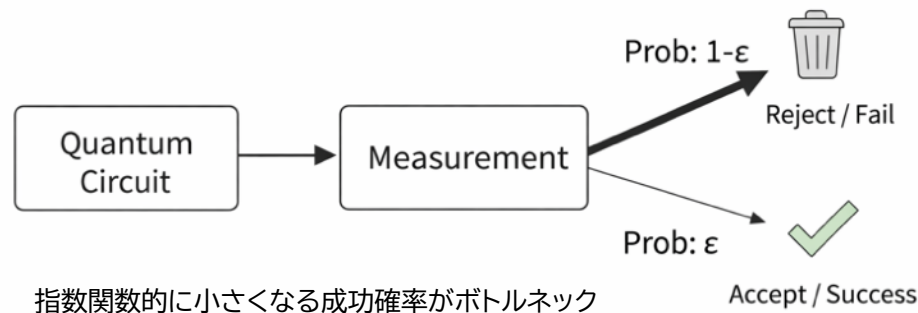
• 問題点

- 成功確率が小さいとサンプル効率が著しく低下

• 断熱エンコーディング

- MPS を断熱的に変形
- 補助量子ビットの状態に依らず分類結果がほぼ同一になるよう設計

- 「MPSで(古典)学習 → ポストセレクションあり量子回路 → 断熱エンコーディング → ポストセレクションなし量子回路」により、「バレンプラトール問題」も回避できると期待



まとめ

- テンソルネットワークはいたるところに現れる
 - 様々なデータをテンソルネットワークで厳密あるいは近似的に表現できる
 - 低ランク近似による情報圧縮
- テンソルネットワーク形式
 - データ(=要素数)の削減
 - 計算量の削減
- Born-machine + テンソルネットワークによる教師なし学習
 - 量子状態 $|\phi\rangle$ が確率分布 $p(x) = |\langle x | \phi \rangle|^2$ を定め、測定は $p(x)$ からのサンプリング
- 量子回路への埋め込み
 - TNの計算(縮約)を「回路+測定」に置き換え、サンプル生成を量子側で実行
- 今後の展望
 - 測定(=サンプリング)では量子情報の多く(位相情報)を捨てている
 - サンプリングをせずに「量子 → 量子」ができるか？
 - 量子デバイスからの直接量子機械学習(Q→Q learning)
 - 量子生成モデルが生成した初期量子状態からの直接量子シミュレーション