

## 位相変化を含めた量子状態異常検知

## Quantum-state anomaly detection for arbitrary errors

原 聡<sup>\*1\*2</sup> 小野 貴史<sup>\*3</sup> 岡本 亮<sup>\*4</sup> 鷲尾 隆<sup>\*5</sup> 竹内 繁樹<sup>\*4</sup>  
 Satoshi Hara Takafumi Ono Ryo Okamoto Takashi Washio Shigeki Takeuchi

<sup>\*1</sup>国立情報学研究所 <sup>\*2</sup>JST, ERATO, 河原林巨大グラフプロジェクト  
 National Institute of Informatics JST, ERATO, Kawarabayashi Large Graph Project

<sup>\*3</sup>ブリストル大学 <sup>\*4</sup>京都大学 <sup>\*5</sup>大阪大学  
 University of Bristol Kyoto University Osaka University

*Density matrix* describes the state of quantum systems. In quantum informatics, it is crucial to verify whether the density matrix of the target system is in an aimed state. We present a machine learning approach to find matrices that are away from the aimed state. With a help of the sparse regularization technique, we can find matrices with arbitrary errors including decoherences and phase errors.

## 1. はじめに

精緻な処理が必要となる量子情報処理では所望の量子状態からのずれ、すなわち異常の検出が重要な課題である。しかし、異常の検知は量子系が持つ本質的なゆらぎや統計的なゆらぎのために困難な課題の一つでもある。通常、量子系の状態を表現する密度行列は量子トモグラフィ [1] を用いて推定される。この際、実験で得られる観測の総数は限られているために、推定された密度行列には統計的なゆらぎが生じる。この統計的なゆらぎと量子系の変化とを区別することが異常検知における技術的な課題である。

本稿では機械学習を用いて密度行列の異常検知を行う方法 GED<sup>3</sup> (Generalized Erroneous Deviation Detector for Density matrices) [2] を紹介する。GED<sup>3</sup> は密度行列の各要素の絶対値が変化するデコヒーレンスに特化した異常検知手法 ED<sup>3</sup> [3] を一般化した手法となっている。GED<sup>3</sup> はデコヒーレンスに限らず位相角の変化など多様な異常を検知することができる。量子もつれ光子対の量子トモグラフィにおいて GED<sup>3</sup> と単純な手法及び ED<sup>3</sup> とを比較したところ、物理実験データにおいて異常検知性能の大きな向上が見られた。GED<sup>3</sup> は密度行列を扱う問題には全て適用できるため、量子光学系に限らず超伝導回路やイオントラップを用いた系にも適用できる。このため、GED<sup>3</sup> は密度行列の異常が問題となる多くの局面において有用な解決手段を提供すると考えている。

## 2. 密度行列の異常検知手法

量子トモグラフィにより  $K$  個の観測密度行列  $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \dots, \hat{\rho}_K \in \mathbb{C}^{d \times d}$  が得られているとする。ただし  $d$  は密度行列のサイズである。以下では  $k$  番目の観測密度行列の  $(i, j)$  要素を  $\hat{\rho}_{k,ij}$  と表記する。本稿では、これら  $K$  個の観測密度行列  $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \dots, \hat{\rho}_K$  から異常な行列のインデックス集合  $S \subseteq \{1, 2, \dots, K\}$  を探す問題を対象とする。ただし、異常行列のインデックス集合  $S$  の補集合  $S^c$  においては行列  $\hat{\rho}_{k'}$  ( $k' \in S^c$ ) は全て正常であるとし、また異常行列は  $K$  個の行列のごく一部、つまり  $|S| \ll K$  であると仮定する。このような問題は機械学習において異常検知や外れ値検知として知られている [4]。

連絡先: 原 聡 [satohara@nii.ac.jp](mailto:satohara@nii.ac.jp)

異常検知を最も直接的に実現する方法は、計測された密度行列を“正しい”密度行列と比較することである。量子トモグラフィ装置を物理モデルに基づいて表現することができれば、その物理モデルから“正しい”密度行列を計算することができる。そしてその“正しい”密度行列と各観測密度行列がどの程度異なるかを評価することで異常な行列を見つけることができる。このためには、量子トモグラフィ装置内の各光学素子に関する正確なパラメータを用いて物理モデルを計算する必要がある。しかし、現実的には実験装置の正確なパラメータを知ることが困難であり、その近似値を用いざるをえない。つまり、近似的なパラメータから計算された“正しい”密度行列は、量子トモグラフィにより実際に得られる観測密度行列とは必ずしも一致せず、妥当な異常検知ができるとは限らない。そのため、以下では物理モデルを仮定せず、統計的な手法を用いて異常検知を行うことを考える。

## 2.1 平均行列を使う手法 (平均値法)

物理モデルを用いずに正しい密度行列を観測密度行列から近似的に表現することを考える。最も単純な方法の一つとして  $K$  個の観測密度行列の平均値  $\bar{\rho} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \hat{\rho}_k$  を使う方法が考えられる。 $K$  個の観測密度行列のうち大半は正常な行列だと仮定しているため、この平均行列を正しい密度行列の近似値として使うことができる。そして、各行列のこの平均行列からの偏差  $\tilde{\omega}_k = \hat{\rho}_k - \bar{\rho}$  に基づいて、異常の度合いを評価する。ここでは量子力学的な差異を測る一般的な方法としてトレース距離 [5]  $\tilde{e}_k = \|\tilde{\omega}_k\|_{\text{tr}}$  を用いる。ここで、 $\|\cdot\|_{\text{tr}}$  は行列の特異値の和 (トレースノルム) である。計算された  $\tilde{e}_k$  が一定値以上大きければ、密度行列は正しい密度行列からの乖離が大きい、つまり異常だと判定できる。

平均行列を使う方法は単純で直感的にもわかりやすいが、問題点として平均行列  $\bar{\rho}$  の計算に数が少ないとは言え異常な行列が混入して偏りを生じさせていることがあげられる。この偏りが異常検知の性能を低下させてしまう要因となる。

2.2 デコヒーレンスを検知する手法 ED<sup>3</sup> [3]

ED<sup>3</sup> は密度行列の各要素の絶対値の変化、いわゆるデコヒーレンスを検知する手法である。ここでは、各観測密度行列  $\hat{\rho}_k$  の各要素をその絶対値に置き換えた行列  $|\hat{\rho}_k| \in \mathbb{R}^{d \times d}$  を考える。 $k$  番目の絶対値の密度行列の真の値を  $|\rho_k|$  とすると、これ

は“正しい”密度行列  $\theta \in \mathbb{R}^{d \times d}$  とそこからの偏差  $\omega_k \in \mathbb{R}^{d \times d}$  を使って  $|\rho_k| = \theta + \omega_k$  と表現できる。また、観測密度行列  $|\hat{\rho}_k|$  はこの  $|\rho_k|$  に観測に伴う統計的ゆらぎが加わったものとして解釈できる。このとき、正常な行列については“正しい”密度行列  $\theta$  からの偏差については  $\omega_k \approx 0$  と想定できる。他方、異常な行列については  $\omega_k \neq 0$  となる。そのため、偏差の行列の集合  $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_K\}$  は多くが零行列となるスパースな構造を持つと仮定できる。このようにデータの背後にスパースな構造が隠れている場合には機械学習のスパース推定の技術が有効である [6, 7]。そこで、ED<sup>3</sup> では以下の正則化つきの最小二乗問題を解くことで、このスパースな偏差行列の集合を推定する。

$$\min_{\theta, \{\omega_k\}_{k=1}^K} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \|\hat{\rho}_k - (\theta + \omega_k)\|_F^2 + \gamma \sum_{k=1}^K \|s \odot \omega_k\|_F. \quad (1)$$

ここで  $\|\cdot\|_F$  は行列のフロベニウスノルム、 $\odot$  はアダマール積、 $\gamma$  は非負のパラメータである。また、行列  $s \in \mathbb{R}^{d \times d}$  は  $s_{ij} = \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \tilde{\omega}_{k,ij}^2\right)^{-1/2}$  により定義される。式 (1) の第一項は各観測密度行列  $|\hat{\rho}_k|$  に近い  $\theta + \omega_k$  を推定すること、第二項は行列の各要素の大きさを正規化したうえでできる限りスパースでありゼロに近い偏差行列の集合を推定することに対応する。最後に問題 (1) を解くことにより得られる  $\omega_k$  からトレース距離  $e_k = \|\omega_k\|_{\text{tr}}$  を計算し、 $e_k$  が一定値以上大きければ異常と判断する。式 (1) による推定では、 $\theta$  と  $\omega_k$  の同時推定により平均行列を使う場合に比べて“正しい”密度行列  $\theta$  の偏りが抑えられること、スパースな偏差行列を推定できることの2点により、精度の高い異常検知が期待できる。

問題 (1) の各項は凸関数なので全体としても凸関数であり、各種凸最適化アルゴリズムによって  $\theta, \{\omega_k\}_{k=1}^K$  の大域最適解を得ることができる。本研究では最適化手法として交互方向乗数法 [8] を用いた。このアルゴリズムは問題 (1) の構造を活用することで効率的に大域最適解を求めることができる。

### 3. 提案法 GED<sup>3</sup> [2]

本研究では ED<sup>3</sup> を位相変化をも検知できるように一般化した GED<sup>3</sup> を提案する。ED<sup>3</sup> は密度行列の絶対値を計算の対象としているため行列の各要素の位相成分の変化の情報が欠落しており、位相変化を検知することができない。

GED<sup>3</sup> では位相変化を検知するために、絶対値を扱う ED<sup>3</sup> とは異なり元の密度行列、つまり複素行列を計算の対象とする。そのため、ED<sup>3</sup> の場合と同様に正則化つきの問題として定式化するには、実数行列を対象とした従来の正則化技術を複素行列まで拡張する必要がある。

GED<sup>3</sup> では複素行列を実数行列へと変換することで、複素行列に正則化技術を適用可能にする。具体的には、以下の2つのステップにより正則化つきの問題として定式化する。

1) 複素行列の実数行列への変換: まず初めに、ED<sup>3</sup> と同様にして、真の密度行列  $\rho_k$  を“正しい”密度行列  $\theta \in \mathbb{C}^{d \times d}$  とそこからの偏差  $\omega_k \in \mathbb{C}^{d \times d}$  を使って  $\rho_k = \theta + \omega_k$  と表現することを考える。次に、観測密度行列  $\hat{\rho}_k$  及び  $\theta, \omega_k$  を実数行列へと変換する。具体的には、観測密度行列  $\hat{\rho}_k$  の実部と虚部をそれぞれ取り出した行列  $\text{Re}(\hat{\rho}_k), \text{Im}(\hat{\rho}_k) \in \mathbb{R}^{d \times d}$  を考える。そして、これらの行列を用いて新しい実数行列  $\hat{\zeta}_k = [\text{Re}(\hat{\rho}_k), \text{Im}(\hat{\rho}_k)] \in \mathbb{R}^{d \times 2d}$  を定義する。 $\theta, \omega_k$  についても同様に  $\mu = [\text{Re}(\theta), \text{Im}(\theta)] \in \mathbb{R}^{d \times 2d}$ ,  $\eta_k = [\text{Re}(\omega_k), \text{Im}(\omega_k)] \in \mathbb{R}^{d \times 2d}$  を定義する。

2) 正則化つきの問題としての定式化: ED<sup>3</sup> と同様の議論により、正常な行列については  $\eta_k \approx 0$  と想定できる。他方、異常な行列については  $\eta_k \neq 0$  となる。そのため、行列の集合  $\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_K\}$  は多くが零行列となるスパースな構造を持つと仮定できる。これら  $\eta_k$  は実数行列であるため、従来のスパース正則化の技術を使うことができる。そこで、GED<sup>3</sup> では以下の正則化つきの最小二乗問題を解くことで、このスパースな行列の集合を推定する。

$$\min_{\mu, \{\eta_k\}_{k=1}^K} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \|\hat{\zeta}_k - (\mu + \eta_k)\|_F^2 + \gamma \sum_{k=1}^K \|t \odot \eta_k\|_F. \quad (2)$$

ここで、行列  $t = [u, v] \in \mathbb{R}^{d \times 2d}$  ( $u, v \in \mathbb{R}^{d \times d}$ ) は  $u_{ij} = \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \text{Re}(\tilde{\omega}_{k,ij})^2\right)^{-1/2}$  及び  $v_{ij} = \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \text{Im}(\tilde{\omega}_{k,ij})^2\right)^{-1/2}$  により定義される。

GED<sup>3</sup> では密度行列の実部及び虚部の両方の変化を検知の対象としているため、デコヒーレンスに限らず位相変化をも検知することができる。実際、問題 (2) は“正しい”密度行列  $\theta$  と偏差行列  $\omega_k$  の実部及び虚部を推定する問題と見ることができる。そのため、トレース距離  $e_k = \|\omega_k\|_{\text{tr}}$  は密度行列の実部だけでなく虚部の変化をも考慮した指標となる。そして、 $e_k$  が一定値以上大きければ密度行列の実部または虚部（もしくはその両方）に異常があったと判断できる。

### 4. 評価実験

GED<sup>3</sup> と平均値法、ED<sup>3</sup> との性能比較実験を行った。本実験では光子対、つまり2個の光子を用いた系を対象とした。そのため、本実験で対象とする密度行列のサイズ  $d$  は  $d = 2^2 = 4$  である。実験では図1に概要を示した量子トモグラフィ装置を用い、1個の観測密度行列を16000回の量子もつれ光子対入射の計数から推定した。様々な設定で実験を繰り返すことで、250個の正常な密度行列及び各 Error1 ~ 8 について異常な密度行列50個を得た。表1に正常及び異常密度行列の(1, 4)成分の平均値を記す。8種類の異常は以下の3つのパターンに分類される。

- a Error1 ~ 4: デコヒーレンス（絶対値の変化）がほぼなく、位相変化だけが起きている。
- b Error5 ~ 7: 位相変化が小さく、デコヒーレンスが大きい。
- c Error8: デコヒーレンス、位相変化が両方起きている。

実験ではランダムに選んだ正常な密度行列40個と、同じくランダムに選んだ15個の密度行列を合わせた55個の密度行列に対して平均値法、ED<sup>3</sup>、及びGED<sup>3</sup>を適用した。ED<sup>3</sup>とGED<sup>3</sup>については正則化パラメータ  $\gamma$  を以下により設定した。まず初めに、正常行列と異常行列のラベルがすでに与えられている55個の行列のデータセットを10個用意した。次に、これら10個のデータセットそれぞれにED<sup>3</sup>及びGED<sup>3</sup>を適用し、正常行列と異常行列が正しく識別されるような  $\gamma$  の値を選んだ。

図2に各種の異常データに平均値法、ED<sup>3</sup>、及びGED<sup>3</sup>を適用した結果を記す。実験では行列の選択をランダムに100回繰り返し、これら100個のデータセットに各手法を適用した。なお、異常検知性能の評価指標としてはAUC (ROC曲線下の面積)を用いた。図2からは以下の3点を読み取ることができる。

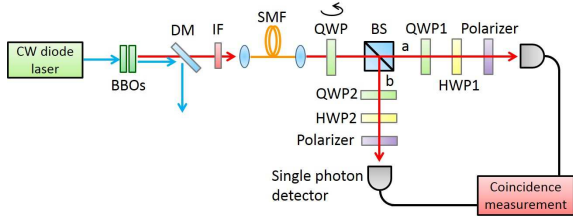


図 1: 量子もつれ光子対の量子トモグラフィ装置

表 1: 実験で得られた観測密度行列の (1, 4) 成分の平均値

	$\arg(\bar{\rho}_{14})$	$ \bar{\rho}_{14} $	$\arg(\bar{\rho}_{14})$	$ \bar{\rho}_{14} $
Normal	0.016	0.421		
Error1	0.046	0.416	Error5	0.040
a Error2	0.063	0.416	b Error6	0.044
Error3	0.108	0.415	Error7	0.048
Error4	0.120	0.416	c Error8	0.050
				0.340

- a ED<sup>3</sup> はデコヒーレンスがなく位相変化のみの場合に異常を検知できなかった。他方、GED<sup>3</sup> は高い精度で異常が検知できた。
- b 位相変化が小さくデコヒーレンスが大きい場合でも GED<sup>3</sup> は高い精度で異常が検知できた。
- c デコヒーレンス、位相変化が両方起きている場合においても GED<sup>3</sup> は高い精度で異常が検知できた。

これら 3 点は全て、ED<sup>3</sup> が位相変化を捉えられないのに対し GED<sup>3</sup> は位相変化をも捉えることができる、という各手法の直感的な性質に合致したものである。これらの結果から、位相変化をも捉えることができるという GED<sup>3</sup> の ED<sup>3</sup> に対する優位性が確認できる。

## 5. まとめ

本稿では密度行列の任意の異常を検知する方法 GED<sup>3</sup> について紹介した。GED<sup>3</sup> はデコヒーレンスしか検知できなかった従来手法 ED<sup>3</sup> を位相変化をも捉えられるように拡張したものである。GED<sup>3</sup> では初めに複素行列である密度行列をその実部と虚部に分解することで複素行列を実数行列へと変換する。そして変換された実数行列に対して機械学習のスパース正則化の技術を適用することで異常な密度行列を検知する。実際の物理実験データでの検証により、GED<sup>3</sup> が ED<sup>3</sup> よりも優れていること、特に ED<sup>3</sup> が検知できなかった位相変化が検知できることを確認した。

## 参考文献

- [1] Daniel FV James, Paul G Kwiat, William J Munro, and Andrew G White. Measurement of qubits. *Physical Review A*, 64(5):052312, 2001.
- [2] Satoshi Hara, Takafumi Ono, Ryo Okamoto, Takashi Washio, and Shigeki Takeuchi. Quantum-state anomaly detection for arbitrary errors using a machine-learning technique. *Physical Review A*, 94(4):042341, 2016.
- [3] Satoshi Hara, Takafumi Ono, Ryo Okamoto, Takashi Washio, and Shigeki Takeuchi. Anomaly detection in

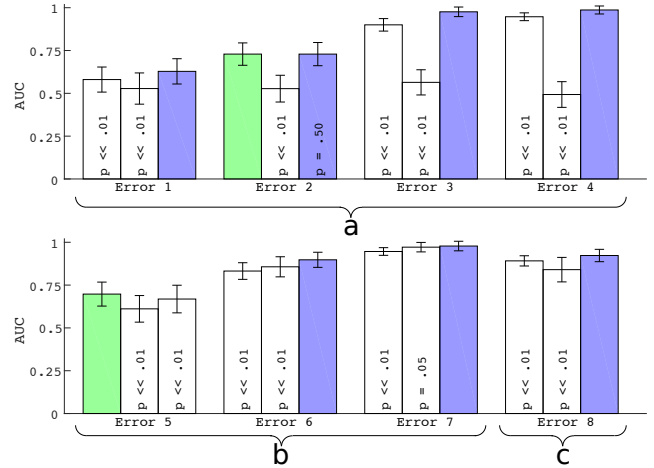


図 2: AUC の平均値と標準偏差: 各異常の結果のバーについて左から平均値法、ED<sup>3</sup>、GED<sup>3</sup> である。t 検定により最大平均 AUC の結果と 5% の統計的有意差が認められなかった結果は色付きのバーによりハイライトされている。

reconstructed quantum states using a machine-learning technique. *Physical Review A*, 89(2):022104, 2014.

- [4] Victoria J Hodge and Jim Austin. A survey of outlier detection methodologies. *Artificial Intelligence Review*, 22(2):85–126, 2004.
- [5] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge university press, 2010.
- [6] Robert Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, pages 267–288, 1996.
- [7] Ali Jalali, Sujay Sanghavi, Chao Ruan, and Pradeep K Ravikumar. A dirty model for multi-task learning. *Advances in Neural Information Processing Systems*, pages 964–972, 2010.
- [8] Stephen Boyd, Neal Parikh, Eric Chu, Borja Peleato, and Jonathan Eckstein. Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 3(1):1–122, 2011.