

量子ニューラルネットワーク

- 量子限界で動作する光ニューラルネットワーク -

序文

この白書は、新しい計算原理である量子散逸計算とこれを物理的に実現する量子ニューラルネットワークの基本概念、動作原理、期待される性能について述べたものである。

現在、少なくとも3つの量子計算モデルが提案されている。それらは、量子ユニタリ計算、量子断熱計算、量子散逸計算である。表1にまとめたように、量子ユニタリ計算[1]は外界（熱浴）から完全に遮断された孤立系に実現されるマシンである。この条件が満たされた時、この量子計算機は計算を妨げるデコヒーレンス効果から解放される。そして、全ての計算過程が量子基盤の中で終了した後、計算結果は量子フーリエ変換などの量子干渉過程を経て、最終的に射影測定により読み出される[1,2]。量子ユニタリ計算の理論的記述は十分に確立されており、物理的描像は明確である。この量子計算モデルはゲート型量子コンピュータ（1ビットゲートと2ビットゲートを時系列的に並べる手法）により実装できるが、雑音とエラーに弱い。この弱点をカバーするため量子誤り訂正を繰り返しながら計算が実行される。量子ユニタリ計算は、本質的に線形干渉計であり、与えられた問題に隠れた周期性や特殊な構造がある場合、この周期や構造を見つけ出すことが得意である。有名な P. Shor の因数分解や離散対数アルゴリズム[2]や Deutsch-Jozsa アルゴリズム[1]がこれに相当する。量子断熱計算は量子ユニタリ計算と等価であることが証明されている[3]。

表1：2つの量子計算モデル。

	量子ユニタリ計算[1,2]	量子散逸計算[5,6]
物理系	孤立系（ゲート型）	開放系（ネットワーク型）
原理	外界から遮断された孤立系での状態ベクトルのユニタリ回転	外界からの励起、への散逸のある開放系での自己秩序形成
提案	Deutsch (1985) : 量子並列探索 Shor (1994) : 量子アルゴリズム	Zurek (2003) : 量子カオス, 量子ダーウィニズム Verstraete, Wolf and Cirac (2009) : 開放系（散逸）
長所	理論がシンプル、物理が明確	雑音やエラーに対して強靱
短所	雑音やエラーに対して脆弱	理論が複雑、物理が見えにくい
応用分野	隠れた周期性や特殊な構造のある問題 (現代暗号の解読など)	周期性や構造のない問題 (組合せ最適化など)

しかし、組合せ最適化問題のように隠れた周期性や特殊な構造が問題自体に存在しない場合、量子ユニタリ計算で最適解を求めるのは必ずしも効率的ではない。巡回セールスマン問題、2次割当て問題、充足可能性問題、最大カット問題といった組合せ最適化問題にはそのような周期性や構造はなく、これらの問題を解くためには、Grover アルゴリズム [4] という手法を採用しなければならない (図 1(a))。この量子計算においては、まず 2^N 個ある解の候補全ての線形重ね合わせ状態を準備して、各々に対して等しい確率振幅 $1/\sqrt{2^N}$ を割り当てる。その後、何らかの方法で最適解を同定し、この状態に対する確率振幅を Grover アルゴリズムを用いて $2/\sqrt{2^N}$ だけ増加させる。このプロセスを合計 $\sqrt{2^N}$ 回繰り返すと (Grover iteration)、最適解の確率振幅を 1、その他の状態の確率振幅を 0 にすることができ、その後の射影測定により計算結果 (最適解) が読み出せる。

Grover アルゴリズムを N 量子ビットに作用させるためには、 $128(N-3)$ の 2 ビットゲート (C-NOT) と $64(N-3)$ の 1 ビットゲートを順次実装しなければならない [7]。仮に、将来デコヒーレンスがゼロで、ゲートエラーもゼロで、量子ビット間に全結合が実装され、これらのゲートが 1 GHz のクロック周波数で動作するような理想的な量子プロセッサができたとする。その時、Grover アルゴリズムを 1 回実装するために必要な時間は $2 \times 10^{-7}N$ (sec) となる。従って、量子計算にかかる全計算時間は、 $T = 2 \times 10^{-7}N\sqrt{2^N}$ (sec) となる。この式に従って、 $N = 20, 50, 100, 150$ ビットの組合せ最適化問題にかかる計算時間を見積った結果 (それぞれ 4 ミリ秒、600 秒、700 年、200 億年) を表 2 に示してある。 $\sqrt{2^N}$ という指数発散が深刻な限界を量子ユニタリ計算に与えていることがわかる。Grover アルゴリズムは組合せ最適化問題の最適解の確率振幅を増幅するアルゴリズムとして最適であることが既に理論的に証明されているため [7]、計算時間のこれ以上の改善は望めない。しかしながら、この量子計算モデルによれば、与えられた問題がいかに難しくても厳密解をユニバーサルに求めることができる。これは、計算量理論の立場からは重要な結論である。

(ゲート型) 量子コンピュータを用いて近似解を探索するアルゴリズムも研究されている [8]。しかし、近似精度と計算時間の問題サイズ依存性はまだ明らかになっていない。最近、Rigetti Computing は、この近似アルゴリズム (Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA) を 19 ビット・ゲート型量子コンピュータに実装し、 $N = 19$ の最大カット問題を計算時間 600 秒で解いた [9]。

量子ユニタリ計算との等価性が証明されている量子断熱計算 [10,11] を実行する D-WAVE System 社の量子アニールマシン (2000Q) においては、2000 ビットがキメラグラフというスパースな結線につながっている。このマシンでは $N = 64$ ビットまでの最大カット問題を解くことができる [12]。表 2 に示すように $N = 20, 50$ ビットに対する実測値 (計算時間 = 1.1×10^{-5} , 50 秒) が得られている。問題サイズ N が 50 以上の MAX-CUT 問題は、スパースな量子ビット間の結線しか持たない D-WAVE 2000Q では解けない。仮に将来 10,000 ビット、20,000 ビットを実装したキメラグラフ構造を持つマシンが

開発されたとすれば、予想される計算時間はそれぞれ $10^{17}(s)$ (35 億年)、 $10^{32}(s)$ と予想される。 $N \leq 50$ の時、計算時間は $\exp(cN^2)$ というスケール則に従う (c は定数) ことが実験で確認されており[12]、これは問題サイズ N のランダムグラフをキメラグラフへ埋め込むためには、 $\sim O(N)$ の物理ビットを使って 1 論理ビットを実現する必要があるためと考えられている。表 2 の $N=100, 150$ に対する数値はこのトレンドを拡張して得た予測値である。

表 2：組合せ最適化問題（ここでは、エッジ密度 50%のランダムグラフの MAX-CUT 問題）にかかる計算時間。

問題サイズ (ノード数)	ユニバーサル 量子計算*	ヒューリスティック量子計算		
		ゲートモデル 量子コンピュータ**	量子アニーラ***	量子ニューラル ネットワーク****
$N = 20$	$4 \times 10^{-3} (s)$	600 (s)	$1.1 \times 10^{-5} (s)$	$1.0 \times 10^{-4} (s)$
$N = 50$	$6 \times 10^2 (s)$	---	$5.0 \times 10 (s)$	$3.7 \times 10^{-4} (s)$
$N = 100$	$2 \times 10^{10} (s)$ (~ 700 年)	---	$\left(\begin{array}{c} \sim 10^{17} (s) \\ \sim 35 \text{億年} \end{array} \right)$	$2.5 \times 10^{-3} (s)$
$N = 150$	$6 \times 10^{17} (s)$ (~ 200 億年)	---	$(\sim 10^{32} (s))$	$5.4 \times 10^{-2} (s)$

* 理論限界値 (デコヒーレンス無、ゲートエラー無、ビット間全結合、1 nsecゲート時間)

** Rigetti Computingの19ビットマシンでの実測値 (QAOA実装)

*** D-WAVE 2000Qにおける実測値 ($N = 20, 50$) と予測値 ($N = 100, 150$)

**** NTT 2000 CIMにおける実測値 ($N = 20, 50, 100, 150$)

今世紀 (21 世紀) に入って、量子ユニタリ計算に代わる新しい量子計算モデルの模索が始まった。そのひとつが量子散逸計算[5,6]の考え方である。

量子散逸計算は外界 (熱浴) と強く結合した非平衡開放系に実装される。そのため、この計算機は量子基盤の奥深くで動作するのではなく、量子-古典クロスオーバーの物理を利用して計算を実行する (表 1)。通常、量子系の外界 (熱浴) への結合は、デコヒーレンスを引き起こし有用な量子効果を壊してしまうが、特別なケースでは絶対零度の熱浴への散逸は強力な計算リソースとなる。

図 1(b)に示した量子ニューラルネットワークでは、組合せ最適化問題のコスト関数は、光パラメトリック発振器 (OPO) ネットワークの損失にマッピングされ、OPO ネットワークの発振しきい値利得が最も小さいモード (組合せ最適化問題の最適解) が単一モードで発振する臨界現象を動作原理として利用している[13,14]。Grover アルゴリズムを利用する量子ユニタリ計算と異なり、最適解の確率振幅が光子の誘導放出現象により指数的に増幅され、短時間で 1 に漸近する点に特徴がある。

量子系と外界 (熱浴) がお互いを安定化する量子状態を定常状態として協同的に選択するプロセスは “einselection” と呼ばれ、量子開放系における自己秩序形成過程 (量子ダ

ーウィニズム) の中心概念である[5]。この原理を用いて、NP 困難問題のひとつであるイジングモデルを解くコヒーレント・イジングマシン (Coherent Ising Machine, CIM) を実現することができる[13,14]。

古典的なりカレントニューラルネットワークでは、系が正解にたどり着くのを邪魔するカオストラップの存在が知られている。一方、量子系では古典カオスが抑圧されることが知られている[5]。この原理を用いて、NP 完全問題のひとつである充足可能性 (k -SAT) 問題を解くコヒーレント SAT マシン (Coherent SAT Machine, CSM) を実現することができる。量子ニューラルネットワークは、この2つのマシン (イジングマシン、SAT マシン) を柱とする量子散逸計算モデルの実現手法のひとつである。量子散逸計算は、本質的に非平衡開放系における自己秩序形成を利用して実装されるものであり、このため雑音やエラーに耐性があり、問題の最適解を膨大な数の候補の中から見つけ出すのが得意である。

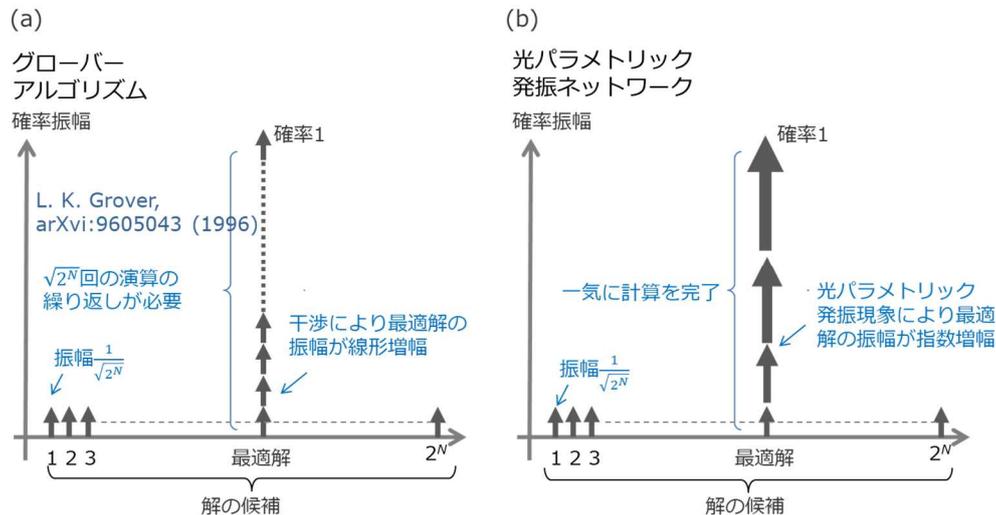


図1: (a)量子ユニタリ計算で Grover アルゴリズムを使って組合せ最適化問題を解くプロセス、(b) 量子ニューラルネットワークで OPO 発振現象を使って組合せ最適化問題を解くプロセス。

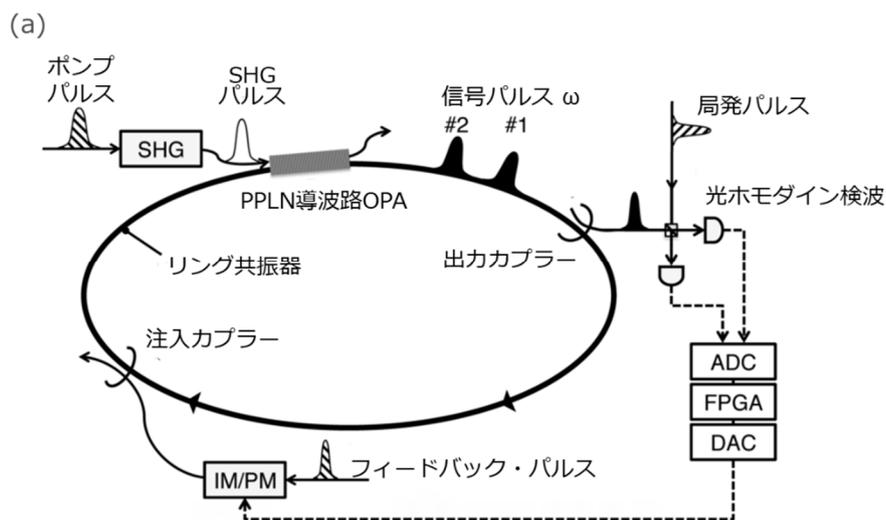
この量子ニューラルネットワークの前身 (古典バージョン) は、注入同期レーザを用いたレーザ・イジングマシンとして 2011 年に提案された[15]。そのマシンは、発振しきい値以上でレーザに生成されるコヒーレントな (平均) 光電場がレーザネットワーク全体の最小損失モードを探索し、そのモードで単一モード発振するという現象を利用してイジング・ハミルトニアン基底状態を探し出す。その後、この概念は縮退光パラメトリック発振器 (Degenerate Optical Parametric Oscillator: DOPO) ネットワークに拡張され、発振しきい値以下で DOPO に形成される真空スクイーズ状態の量子不確定性 (振幅固有状態 $|X\rangle$ の線形重ね合わせ) を利用した量子並列探索で、解の候補を絞り込み、臨界点

(DOPO 発振しきい値) での対称性の破れ (ピッチフォーク分岐現象) を利用して最終解

を決定するという新しい原理に拡張された[13]。表 2 には、 $N = 20, 50, 100, 150$ ビットのランダムグラフ（エッジ密度 50%）の MAX-CUT 問題を量子ニューラルネットワーク実機に解かした時の正解に至るまでの計算時間を示している[12]。

量子ニューラルネットワークには 2 つの実装法がある（図 2）。光遅延線結合型（Delay Line: DL-QNN）[16-18]と測定フィードバック型（Measurement Feedback: MF-QNN）[19,20]であり、それぞれ異なる量子力学的リソース（前者はエンタングルメント、後者は量子トンネリング）が計算結果を得るための要として利用される。量子ニューラルネットワークの構成要素のひとつである量子ニューロンは、縮退光パラメトリック発振器（Degenerate Optical Parametric Oscillator, DOPO）で構成され、以下の特性を有している。

1. 量子ニューラルネットワークを構成する量子ニューロンは、計算に使われる基底（例えば、CIM では直交位相振幅 \hat{X} の固有状態 $|X\rangle$ ）の線形重ね合わせ状態に準備され、エンタングルメントや量子トンネリングを介して解の量子並列探索を可能にする。
2. 多数の量子ニューロンを相互結合で結んだ量子ニューラルネットワークは、外部からのポンプパワーの増加や相互結合の増加により DOPO 相転移臨界点に達し、ここで自発的な対称性の破れ（ピッチフォーク分岐）により、計算結果を 1 つだけ選択する。
3. 量子ニューラルネットワークは、選択された正解の確率振幅をボゾン粒子の誘導放出現象を利用して短時間で指数的に増幅し、古典情報へ変換する。



(b)

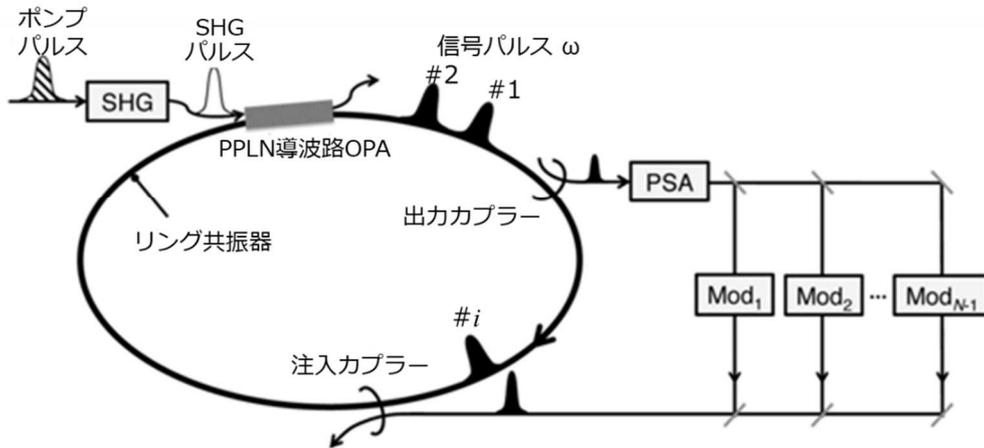


図2：(a) 測定フィードバック型 CIM の構成。(b) 光遅延線結合型 CIM の構成。

量子ニューラルネットワークのもうひとつの構成要素である量子シナプスの実現には2つの異なった手段が用いられる。1つは N 本の光遅延線を用いた光直接結合方式であり[16-18]、2つ目は光ホモダイン検波器と FPGA と光変調器からなる測定フィードバック回路を用いた光電変換結合方式[19,20]である。それぞれ、以下の特徴を有している。

1. 光遅延線結合方式では、光遅延線に取り出された光を介して DOPO 内を周回する光パルス間に量子相関（エンタングルメント）が形成される [21,22]。光パルス間に量子相関が存在していることにより、DOPO ネットワークは発振しきい値（臨界点）で 2^N 個ある全てのスピン配列の中から、イジングハミルトニアン基底状態を選択して、それに向けて自発的に対称性を破ることになる。
2. 測定フィードバック結合方式では、光ホモダイン測定による被測定光パルス状態の波束の収縮とフィードバック光注入による被注入光パルス状態の波束の変位により、相関を有する量子トンネリングが誘起される[23,24]。この量子トンネリングの起こり方は、イジングマトリクス $[J_{ij}]$ により決定され、波動関数の中心に相関が形成される。この相関の存在により、発振しきい値（臨界点）での対称性の破れがランダムではなく、イジングハミルトニアンの基底状態（正解）に向かって起こることになる。

表3に、2つの量子シナプス実装法を比較した。また、測定フィードバック型量子ニューラルネットワークによる組合せ最適化問題の計算時間（実測値）を表2にまとめた。

表 3： 量子ニューラルネットワークの 2 つのシナプス結合方法。

	光遅延線結合型[16-18]	測定フィードバック結合型[19,20]
実装法	($N - 1$) 本の光遅延線において、 $[J_{ij}]$ に基づくダイナミックな結合光の光変調と再注入	測定フィードバック型回路において、測定結果と $[J_{ij}]$ に基づく結合光のダイナミックな光変調と再注入
量子並列探索メカニズム	エンタングルメント	量子トンネリング
長所	超高速動作可能 量子ハミルトニアンへ応用可	損失、位相エラーに強い 高次のイジング結合 ($\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3$ など) 実装可
短所	損失、位相エラーに敏感	電子回路による速度制限
適用領域	大規模、スパース結合問題 量子シミュレーション	中規模、密結合問題 古典組合せ最適化

縮退光パラメトリック発振器ネットワークは、上記の QNN 特性を満足するひとつの物理系であるが、量子ニューラルネットワークの実現手段はこれに限られるわけではない。より大きなスコープとして、現代のデジタルコンピュータの“次”を探索する研究開発が世界中で活発に行われている。非ノイマン型コンピュータという名称でくくられるこの新しいコンピュータ技術の開発戦略には大きく分けて次の 4 つのアプローチがある。

1. アナログコンピュータへ回帰する

このアプローチは高速計算を可能にすることが知られているが雑音への耐性に弱点があることも知られている。QNN の理論モデルはその古典的限界において、Hopfield-Tank 型の古典アナログニューラルネットワークの運動方程式に帰着する。

2. 自然に学ぶ

これは例えば、 0°C で水が氷になるような自然界における相転移現象は、膨大な状態（解の候補）の中からエネルギー最小の状態を探索するという意味において計算プロセスそのものであり、人工的に作られたネットワークの相転移現象を計算にそのまま用いることを意味する。

3. 脳を模倣する

このアプローチは、深層学習やスパース推定のように既に社会実装された技術から巨大な神経ネットワークで意識や意思決定という現象がどう実現されるのか、そのメカニズムを解明し、それに基づく脳型コンピュータの原理を発見するといった基礎研究に至る広いスペクトルをカバーしている。

4. 量子効果を利用する

ここでは、量子ダーウィニズムや量子カオスのみならず、様々な量子効果が計算の高速化に利用される可能性がある。しかし、アナログコンピュータと同様、雑音とゲートエラーへの耐性に弱点がある。

量子ニューラルネットワークは、これら4つのアプローチそれぞれの側面を持ち、どれか1つのカテゴリーに属するマシン、例えば量子効果を用いた新型コンピュータ、と断定できない。1に関しては、DOPOはロスに強く位相エラーに耐性のあるアナログ非線形メモリとしての機能を実現していると言える。このことは、量子ニューラルネットワークが連続量最適化問題に威力を発揮する可能性を示唆する。2に関しては、DOPOは発振しきい値という相転移点を境に、その量子状態を、0位相と π 位相が共存する真空スクイーズ状態から0位相または π 位相が選択されたコヒーレント状態へ劇的にその状態を変化させる、いわゆる自発的な対称性の破れで解を決定している、と言える。この時、生成される光子がボゾン粒子であることにより、相転移が誘導放出現象を伴うことが重要である。量子ニューラルネットワークにおける計算の成功確率が時間に対して指数的に増加するのは、この光子の誘導放出によっている。3に関しては、脳と量子ニューラルネットワークには次のような接点があることが挙げられる。1つのDOPOネットワークの量子ダイナミクスは、 N 個の古典アナログニューラルネットワークのダイナミクスの集合平均を取ったものと数学的に等価である。後者における、多数決による意思決定プロセスは、量子ニューラルネットワークでは、この多数決を一つの波動関数の分波 (partial wave) もしくは確率振幅 (probability amplitude) を介した“波束の収縮”で実現していると解釈することができる。

本白書は次のように構成されている。第1章ではDL-QNNとMF-QNNの違い、コヒーレント・イジングマシンの基本構成と動作原理を紹介する。また、古典アナログニューラルネットワークとの違いを明らかにする。第2章では、光パラメトリック発振器の物理と非線形ダイナミクスをまとめる。特に、相転移、量子トンネリング、実効温度などのコンセプトを説明する。第3章ではDL-QNNの量子論を述べる。そこでは、本マシンの重要な計算リソースである量子相関 (エンタングルメント) を定式化する。第4章では量子測定理論を簡単に復習する。特に、近似測定と非線形測定概念を導入し定式化する。第5章では、MF-QNNの量子論を展開する。そこでは、測定における履歴依存性

(contextuality) と非ガウス型波動関数による量子トンネル効果が計算原理の要として紹介される。第6章では、数値計算結果を示しながら、コヒーレント・イジングマシン

(CIM) の性能が論じらる。NP困難クラスの3次元イジング問題に対するCIMの性能を4種類の古典ニューラルネットワーク (ホップフィールド・ネットワーク (離散値、決定論的)、焼きなまし法 (離散値、確率的)、ホップフィールド・タンクネットワーク (連続値、決定論的)、ランジュバンモデル (連続値、確率的)) と比較している。第7章 (後日

公開)ではコヒーレント SAT マシン (CSM) の性能が論じられる。NP 完全の k -SAT 問題に対する CSM の性能と現代アルゴリズム (minisat) との比較が述べられる。

なお、第 1 章は QNN の基本的な概念・原理に関する最低限の知識を獲得することに興味のある読者への概説となっており、第 6、7 章 (後日公開) はこの新しいマシンを使ったクラウドサービスとその応用に興味のある読者のためのまとめとなっている。第 2 章から第 5 章は、上記に加えて 2 種類の QNN (DL 型と MF 型) の物理と量子論についてさらに深く理解したい読者へ向けた内容となっている。第 8 章から 12 章は様々な実問題を解くためのアルゴリズムを記述している。2018 年の新規クラウドサービスの開始に合わせて公開する予定である。

本白書の構成と章立ては以下の通りである。

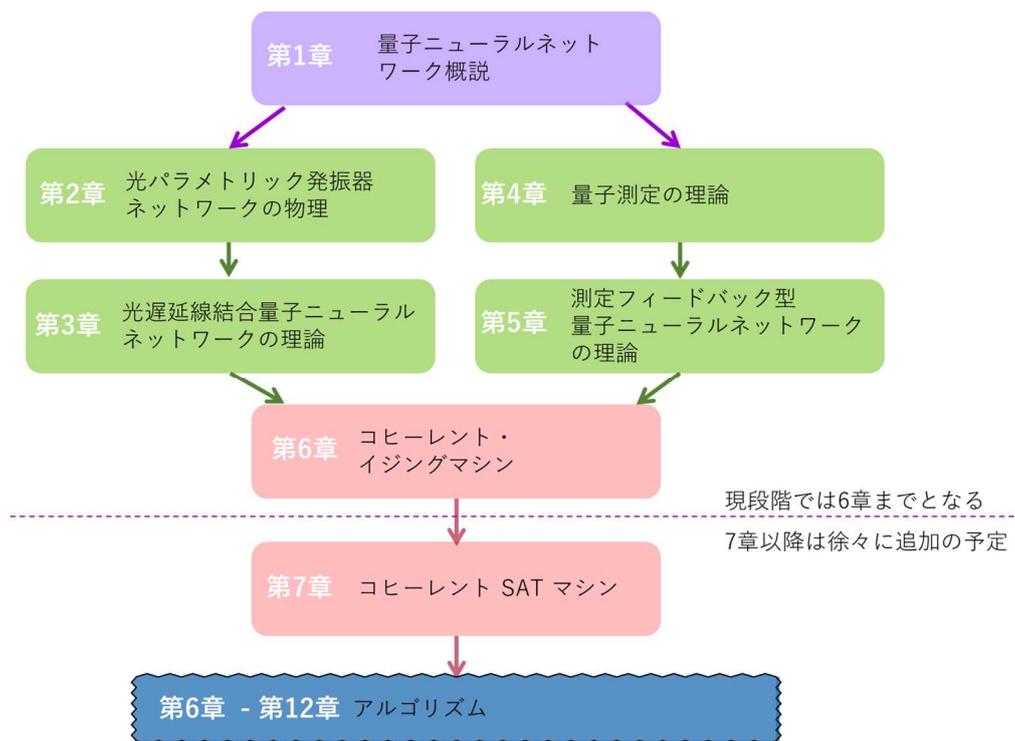


図 2 : 本白書の構成。

-
- [1] D. Deutsch, Proc. Roy. Soc. Lond. A 400, 97 (1985); D. Deutsch and R. Jozsa, Proc. Roy. Soc. Lond. A 439, 553 (1992).
- [2] P. W. Shor, Proc. 35nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society Press, 124 (1994).
- [3] D. Aharonov et al., Proc. 45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS '04), 42 (2004).
- [4] L. K. Grover, Proc. 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing, 212 (1996).

- [5] W. H. Zurek, Rev. Mod. Phys. 75, 715 (2003).
- [6] F. Verstraete et al., Nature Phys. 5, 633 (2009).
- [7] M. Nielsen and I. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information (Cambridge University Press, Cambridge 2010).
- [8] E. Farhi et al., arXiv:1703.06199 (March 2017).
- [9] J. S. Otterbach et al., arXiv:1712.05771 (December 2017).
- [10] E. Farhi et al., Science 292, 472 (2001).
- [11] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E 58, 5355 (1988).
- [12] R. Hamerly et al., to be published (2018).
- [13] Z. Wang et al., Phys. Rev. A 88, 063853 (2013).
- [14] T. Leleu et al., Phys. Rev. E 95, 022118 (2017).
- [15] S. Utsunomiya et al., Opt. Exp. 19, 18091 (2011).
- [16] A. Marandi et al., Nature Photonics 8, 937 (2014).
- [17] T. Inagaki et al., Nature Photonics 10, 415 (2016).
- [18] K. Takata et al., Sci. Rep. 6, 34089 (2016).
- [19] T. Inagaki et al., Science 354, 603 (2016).
- [20] P. L. McMahon et al., Science 354, 614 (2016).
- [21] K. Takata et al., Phys. Rev. A 92, 043821 (2015).
- [22] D. Maruo et al., Phys. Scr. 91, 083010 (2016).
- [23] A. Yamamura et al., Phys. Rev. A 96, 053834 (2017).
- [24] T. Shoji et al., Phys. Rev. A 96, 053833 (2017).

英文執筆：山本 喜久

和訳：井上 恭

Version 2