

量子ニューラルネットワーク – 量子と脳を光でつなぐ –

Yoshihisa Yamamoto

NTT Physics & Informatics Laboratories



2014
4ニューロン, 12シナプス



2016
2000ニューロン, 400万 シナプス

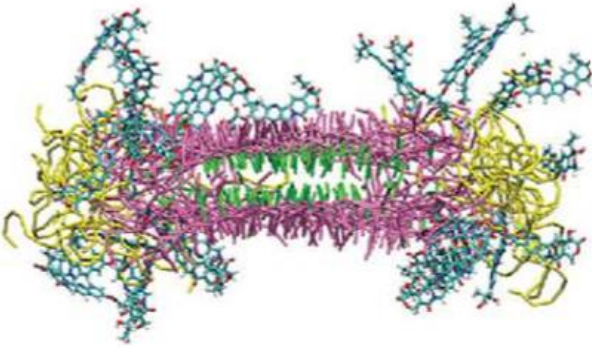


2019
プロトタイプ

NTT IR Day (Tokyo, September 26, 2019)

量子ニューラルネットワーク (QNN) で、
どのような問題を解くのか？

組合せ最適化問題



<https://www.semanticscholar.org/paper/Filamentous-supramolecular-peptide-drug-conjugates-Yang-Xu/a3062f178bde8f7b3156309a3042e199f86cb5e7>

リード最適化

- 低分子創薬
- ペプチド創薬
- 生体触媒開発



<https://ja.storyblocks.com/stock-image/smart-city-and-wireless-communication-network-abstract-image-visual-internet-of-things-mono-blue-tone-roiwpowejgj044z2ev>

リソース最適化

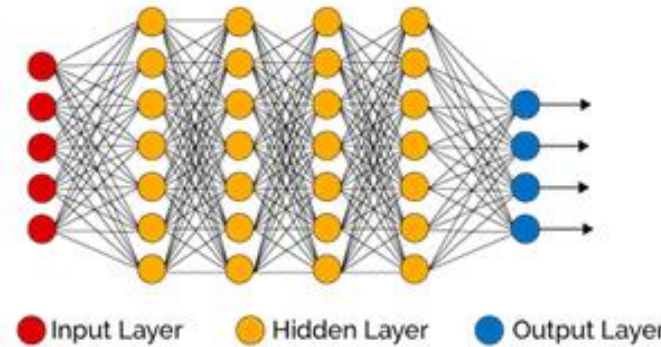
- 無線通信
- 物流
- スケジューリング



<https://ja.wikipedia.org/wiki>

圧縮センシング

- 天体観測
- 磁気共鳴画像 (MRI)
- コンピュータ断層撮影 (CT)



<https://iartificial.net/redes-neuronales-desde-cero-i-introduccion/>

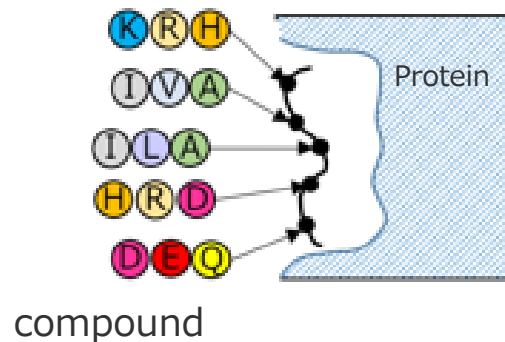
ディープラーニング

- 自動運転
- ヘルスケア
- 音声・画像認識

リード最適化

■ 創薬

標的たんぱく質に安定に結合する化合物を同定する



化合物候補

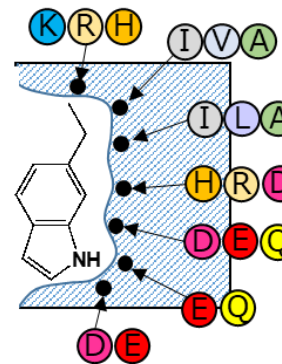
$\sim 10^{46} \rightarrow 100 \sim 1000$

QNNマシンサイズ

~ 4000 (ニューロン)

■ 生体触媒開発

標的化合物を安定に捕獲するたんぱく質を同定する



たんぱく質候補

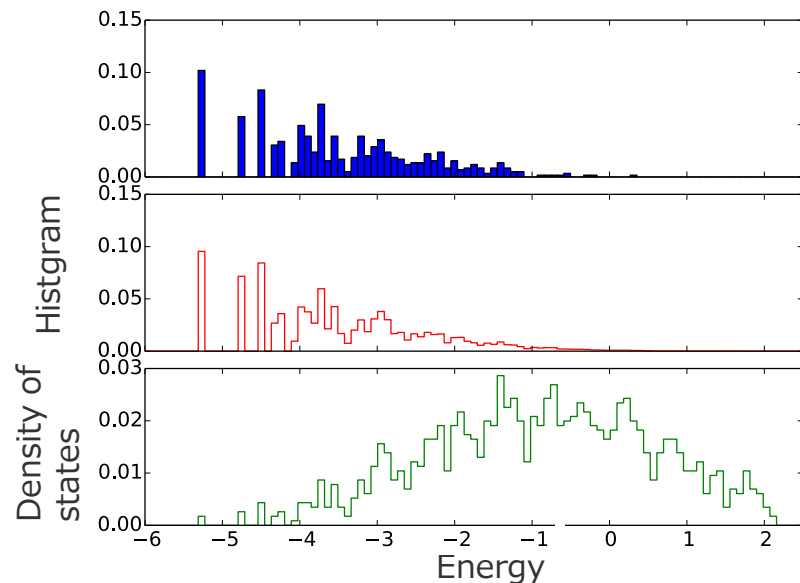
$\sim 10^{690}$

QNNマシンサイズ

$\sim 60,000$ (ニューロン)

観測可能な宇宙空間全体に存在する原子数は 10^{80}

■ 低分子化合物 (6 サイト/6 原子種)

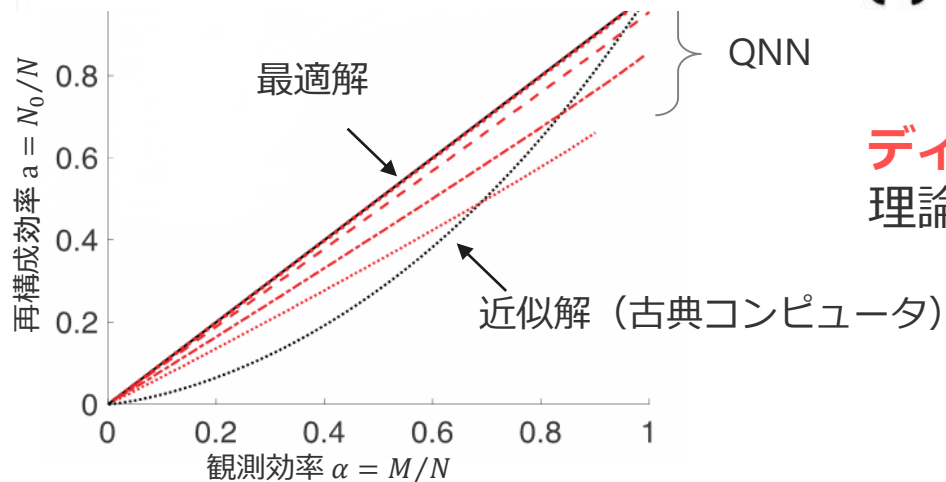
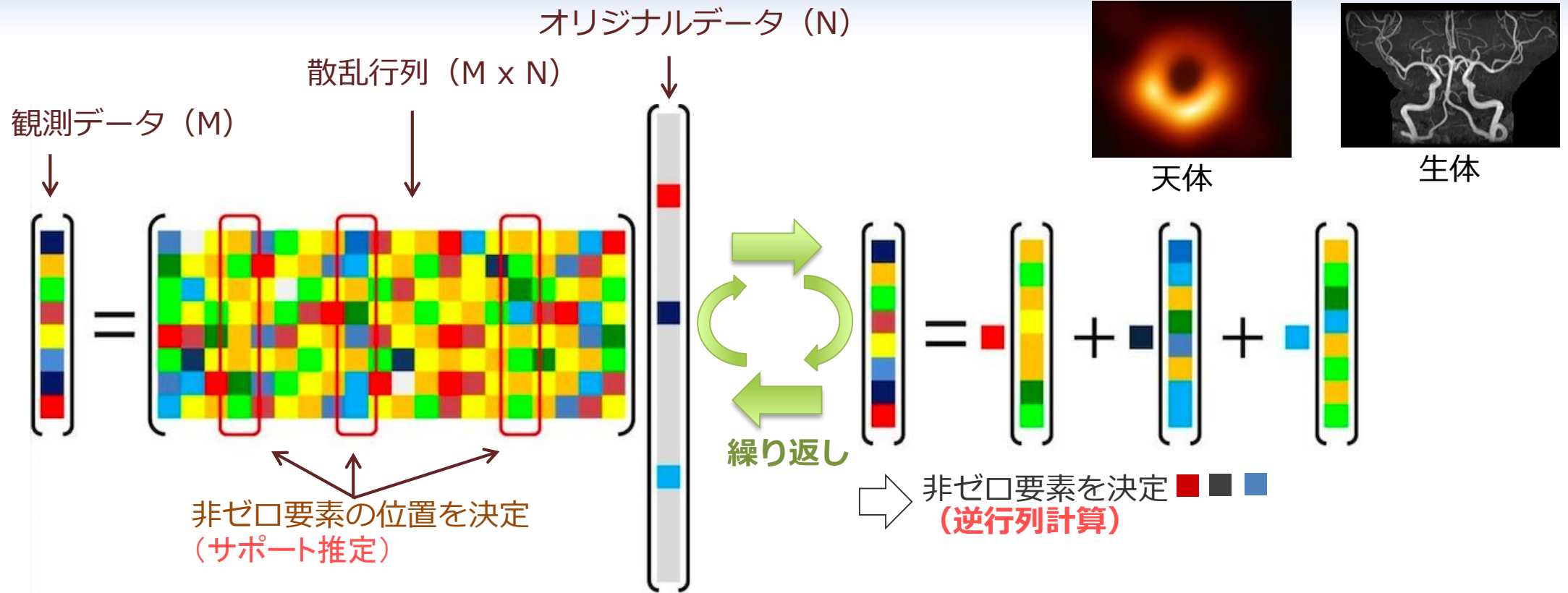


QNNによるサンプリング

ボルツマン分布

全数探索によるエネルギー分布

圧縮センシング



ディープ圧縮センシングを用いたQNNで
理論限界を達成

量子コンピュータ　－ 夢か悪夢か －

量子コンピュータの概念

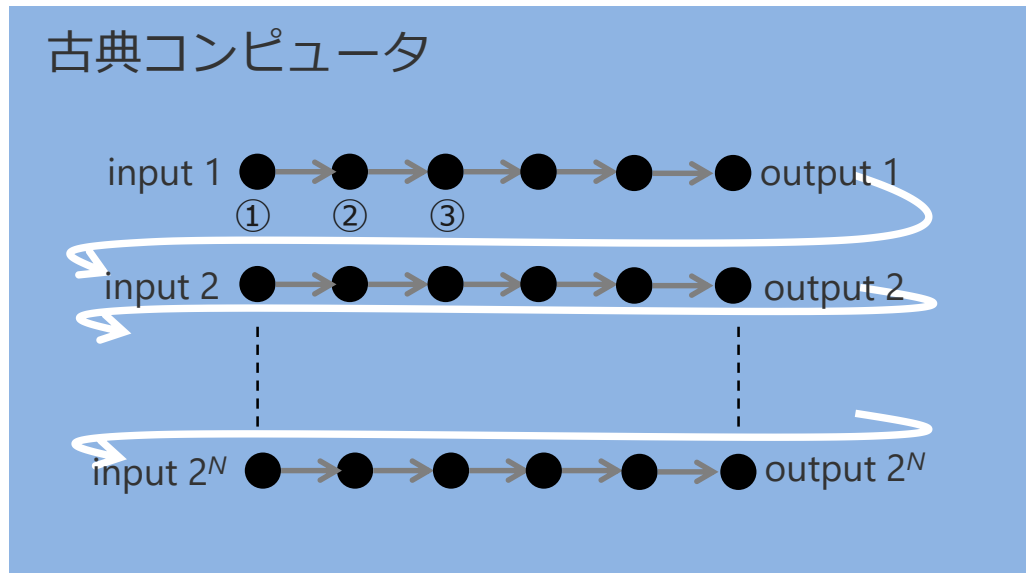
David Deutsch (1985)

■ 重ね合わせ原理

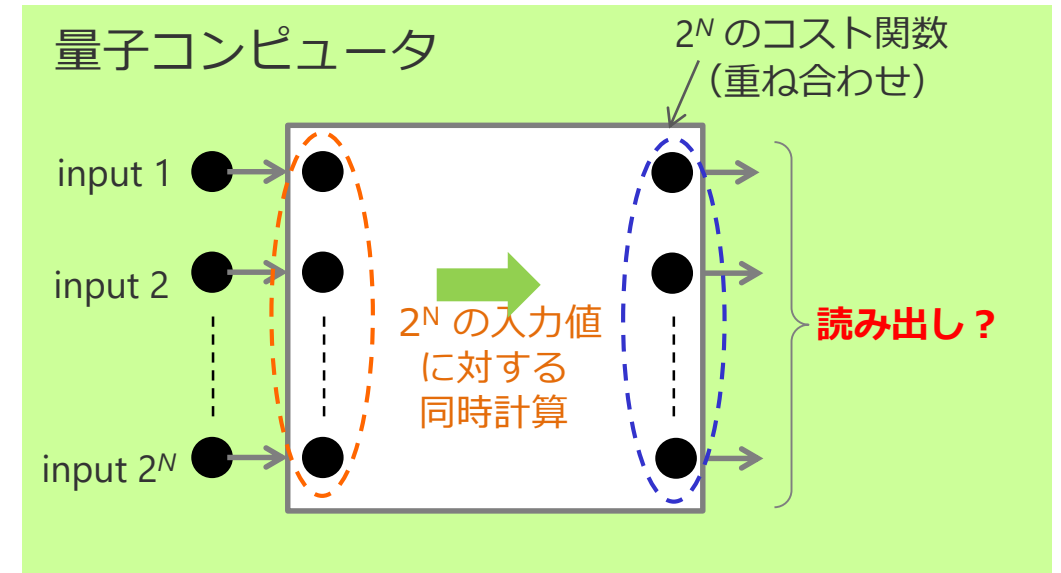
古典コンピュータのゲート電圧は 0(V) か 1(V) のいずれかの値を取るが(1ビット)、量子コンピュータのメモリは $|0\rangle$ 状態と $|1\rangle$ 状態を同時に占有できる(1量子ビット)。

$$\begin{aligned} & \overset{\text{量子ビット1}}{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_1} \otimes \overset{\text{量子ビット2}}{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_2} \cdots \cdots \cdots \otimes \overset{\text{量子ビットN}}{\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_N} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^N}} (\underbrace{|0\rangle_1|0\rangle_2 \cdots |0\rangle_N}_{\text{状態1}} + \underbrace{|0\rangle_1|0\rangle_2 \cdots |1\rangle_N}_{\text{状態2}} \cdots \cdots \cdots + \underbrace{|1\rangle_1|1\rangle_2 \cdots |1\rangle_N}_{\text{状態2}^N}) \end{aligned}$$

N 個の量子ビットは 2^N 通りの入力状態を同時に表わせるが、 N 個の古典ビットは1回に1つの入力状態しか表わせない



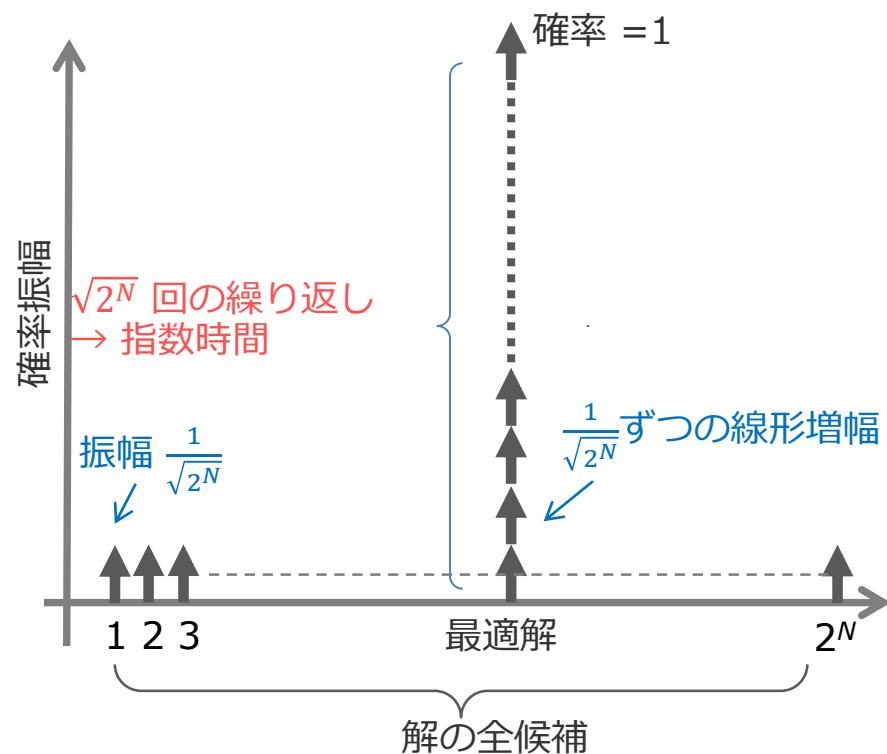
➡ 全数探索



➡ 単一計算

量子コンピュータの弱点 - 振幅の線形増幅 -

Grover アルゴリズム (1997)



理想量子コンピュータによる計算時間 (イジング型組合せ最適化問題)

問題サイズ N (bits)	計算時間 T_s
20	$4 \times 10^{-3} \text{ s}$
50	$6 \times 10^2 \text{ s}$
100	$2 \times 10^{10} \text{ s}$ (~ 700 年)
150	$6 \times 10^{17} \text{ (s)}$ (~ 200 億年)

- デコヒーレンス時間 → 無限大
- ゲートエラー → ゼロ
- ゲート時間 → 1 ns

NTTのビジョン

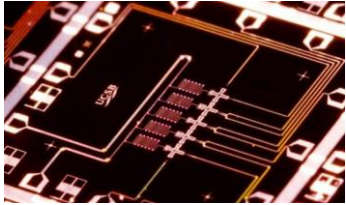
－ 全く異なるアプローチを試してみる －

量子ニューラルネットワーク (QNN)

■ 量子デバイスから量子-古典クロスオーバーデバイスへ

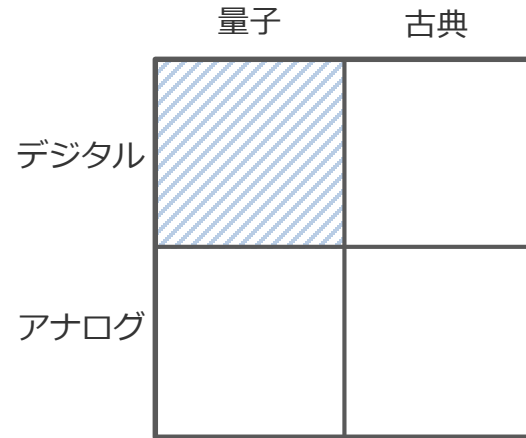
人工原子 @ 10 mK

光パラメトリック発振器 (OPO) @ 300 K

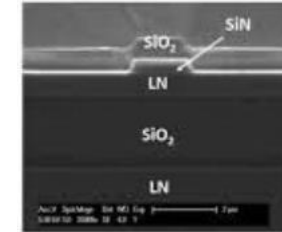


<https://web.physics.ucsb.edu/~martinisgroup/photos/SurfaceCodeThreshold.jpg>

超伝導回路素子



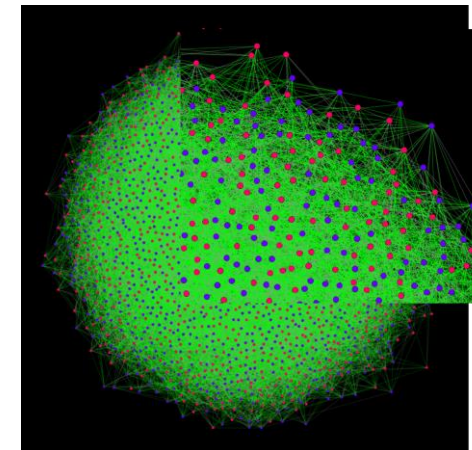
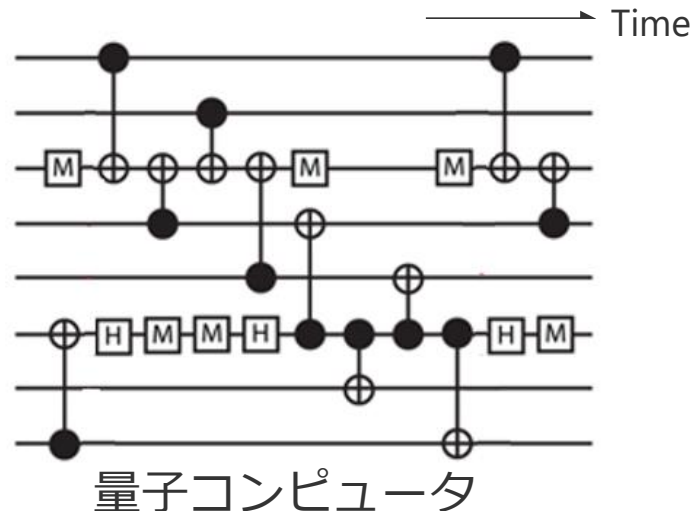
デジタル
アナログ



https://optoelectronics.ece.ucsb.edu/sites/default/files/2017-06/C1007_0.pdf

薄膜PPLN導波路素子

■ 局所（時系列）計算からグローバル（並列）計算へ



量子ニューラルネットワーク

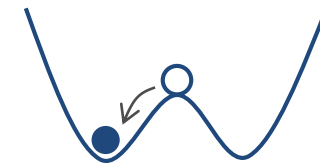
何故、古典計算リソースも必要なのか？



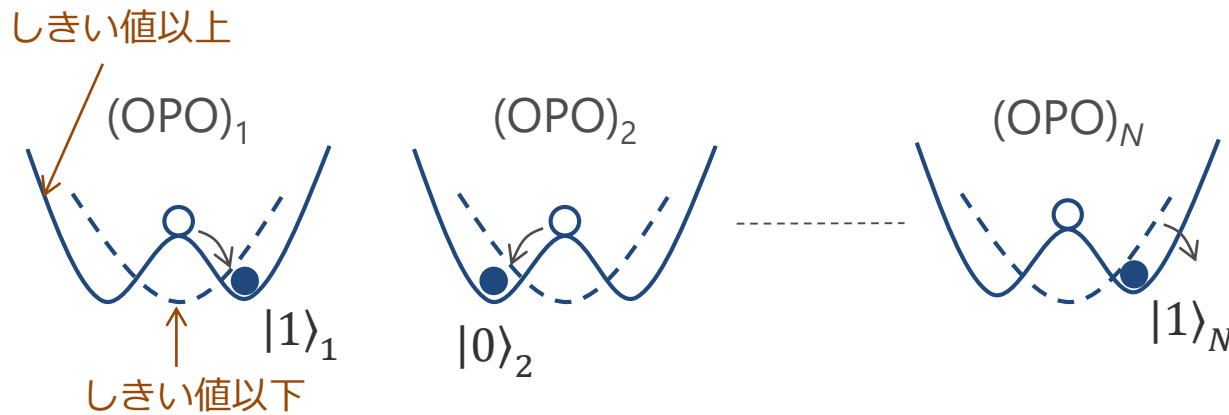
南部 陽一郎
(Nobel Prize 2008)

自発的な対称性の破れ

非可逆的な解の選択と振幅の指数増幅

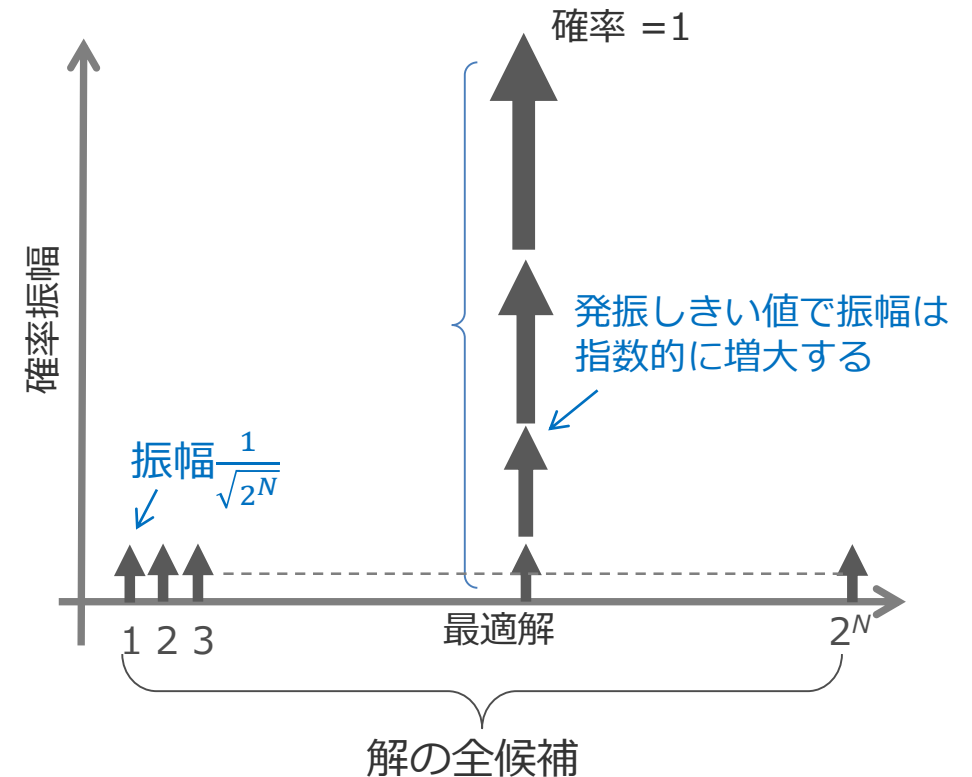


■ 量子相関により誘起される集団的対称性の破れ



この臨界現象は、光子寿命時間程度で完了する
($\mu\text{sec} \sim \text{msec}$)

■ OPOにおける振幅の指数増幅



3つの量子マシン実機による計算時間の比較 (イジング型組合せ最適化問題)

問題サイズ (ビット数)	理想的量子 コンピュータ*	量子ヒューリスティックマシン実機		
		量子コンピュータ**	量子アニーリング マシン***	量子ニューラルネットワーク
$N = 20$	4×10^{-3} (s)	600 (s)	1.1×10^{-5} (s)	1.0×10^{-4} (s)
$N = 50$	6×10^2 (s)	---	2.0×10^3 (s)	3.7×10^{-4} (s)
$N = 100$	2×10^{10} (s) (~700年)	---	---	2.5×10^{-3} (s)
$N = 150$	6×10^{17} (s) (~200億年)	---	---	5.4×10^{-2} (s)

* デコヒーレンス時間 = 無限、ゲートエラー = ゼロ、ゲート時間 = 1 nsec

** **Rigetti Computing** (Quantum Approximate Optimization Algorithm, Dec. 2017)

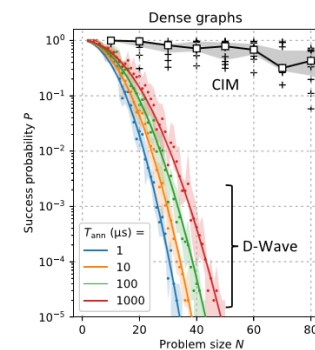
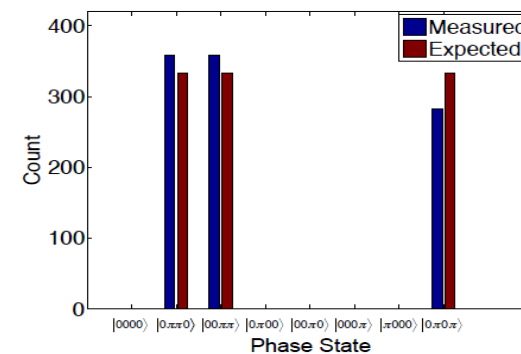
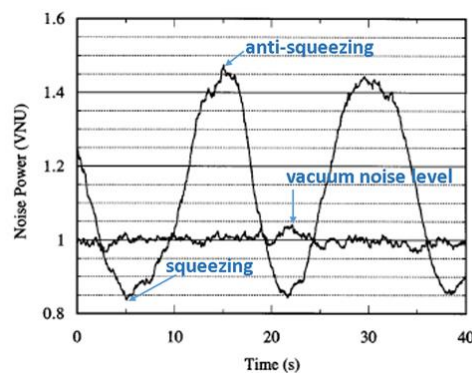
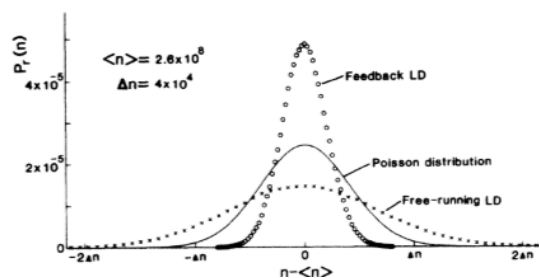
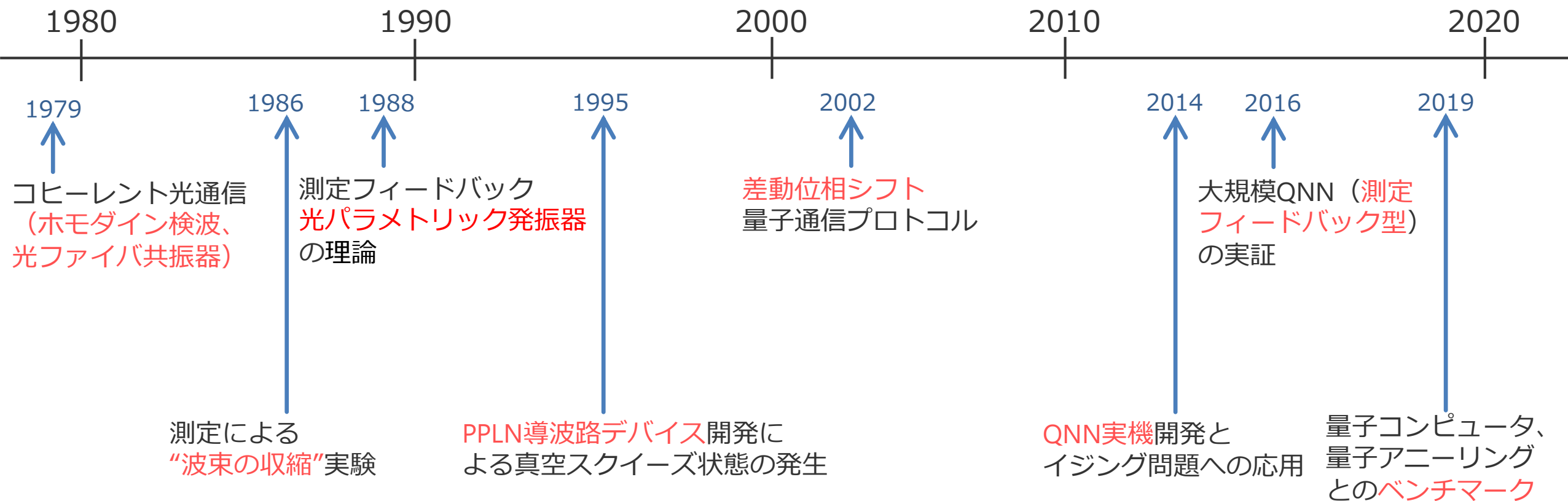
*** **D-WAVE** 2000Q @ NASA Ames (March 2019)

NTTにおける量子コンピュータの基礎研究

－ これまでの40年、これからの40年 －

NTT研究所における量子コンピュータの基礎研究

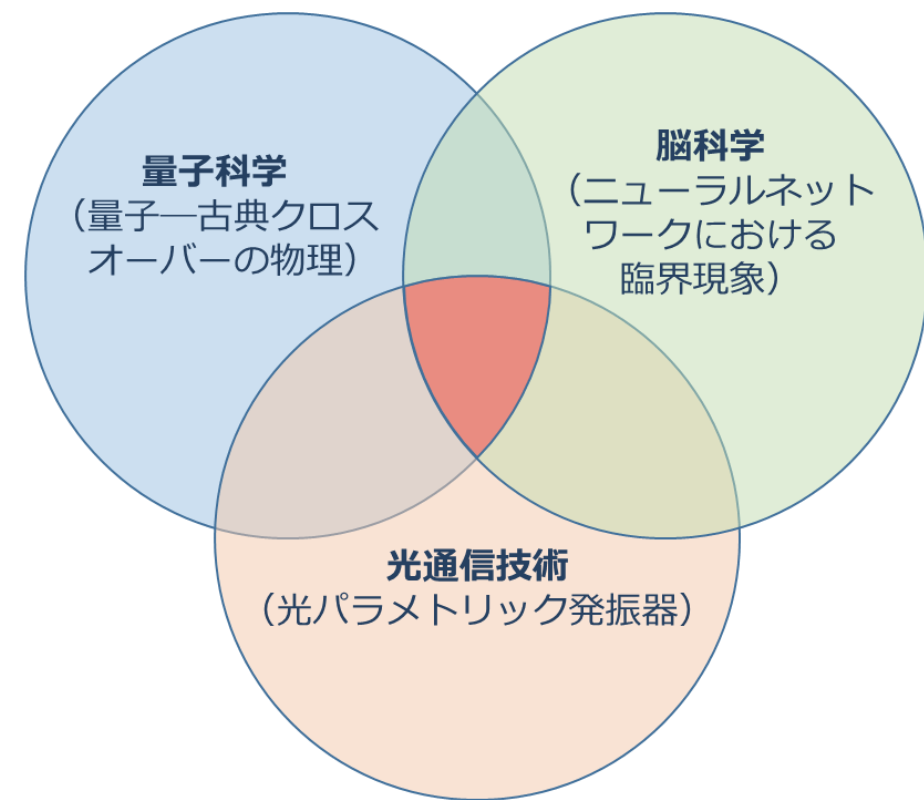
- これまでの40年 -



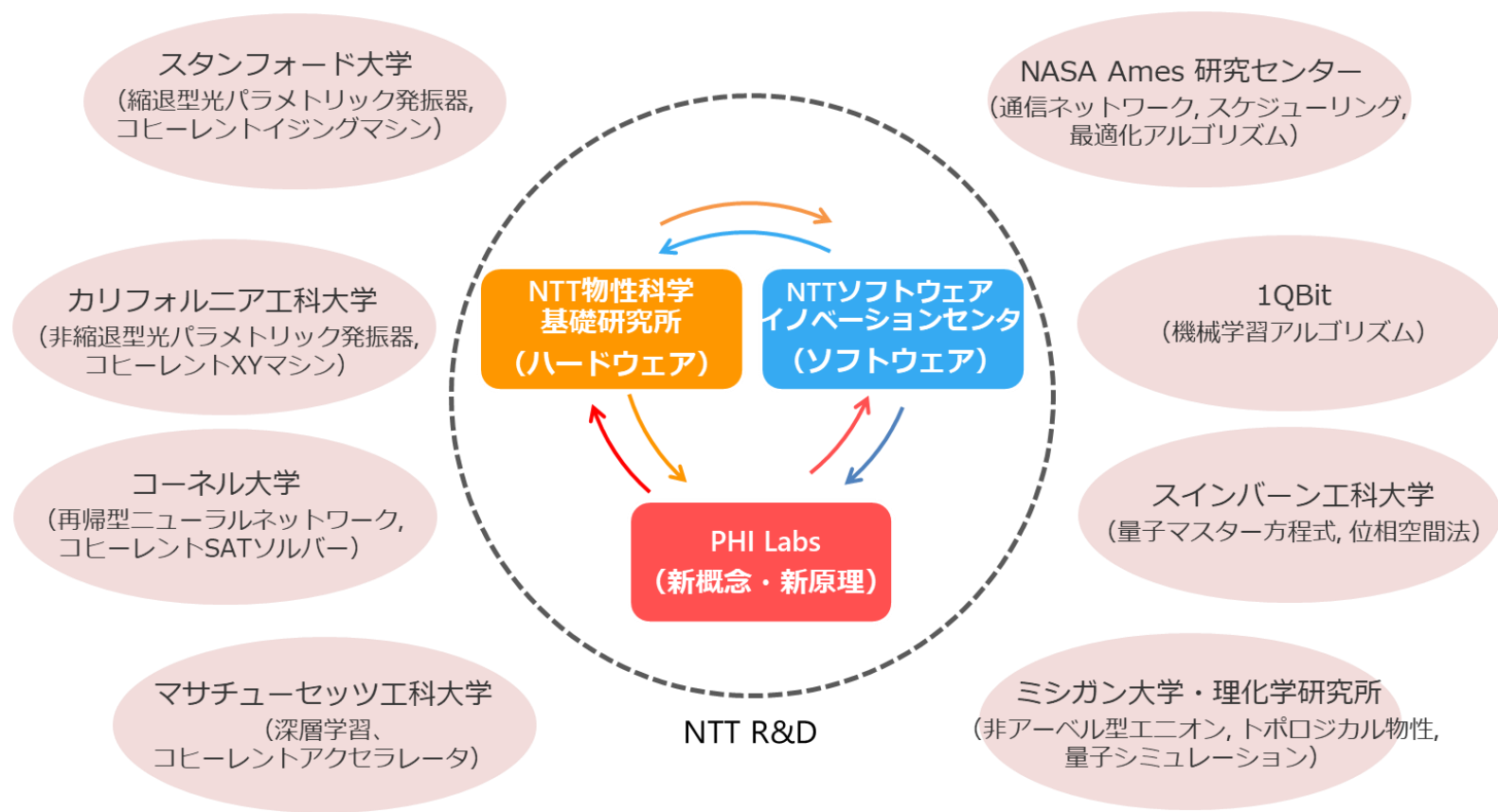
NTT研究所における量子コンピュータの基礎研究

- これからの40年 -

パラダイム・シフト



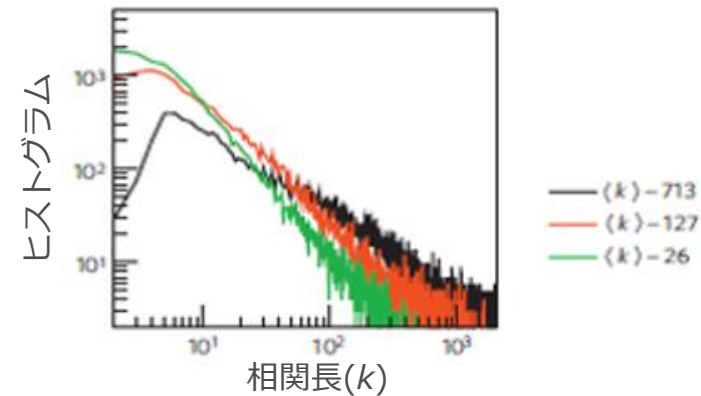
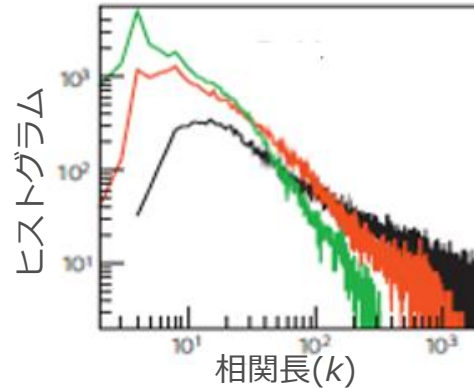
企業-大学連携（オープンな研究組織）



展 望

人間の脳はすでに量子コンピュータか？

A. Levina et al., Nat. Phys. 3, 857 (2007); D. R. Chialvo et al., Nat. Phys. 6, 744 (2010)



QNN (イジングネットワーク) 相転移点での
相関長の分布 (数値シミュレーション)



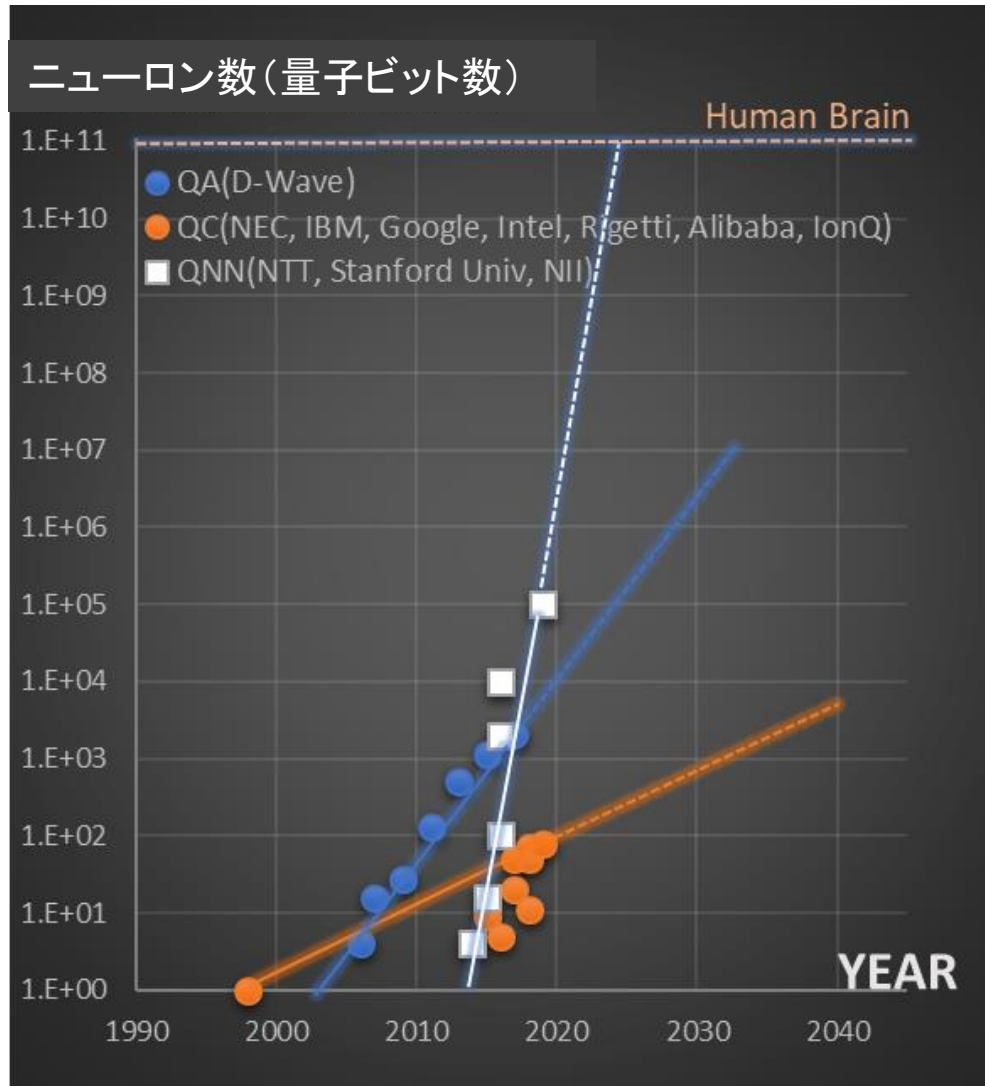
人間の脳における相関長の分布 (f-MRI実測値)

- イジングスピンネットワークの相転移では、
1. 相関長が広く分布 (通信容量が最大)
 2. ランダムさが最大 (メモリ容量が最大)
 3. 外部信号に最も敏感 (情報処理速度が最大)

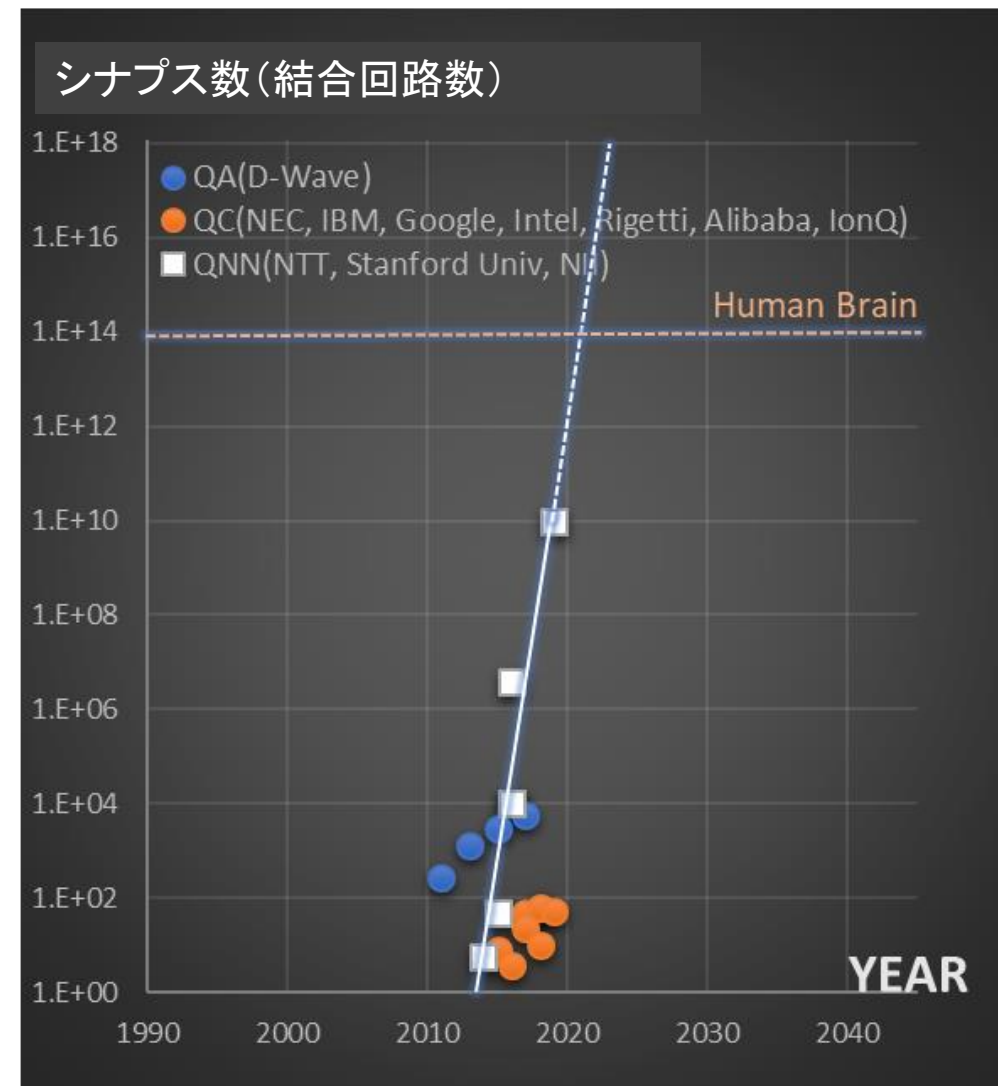
非常に多くのニューロンが相互作用と相転移現象を介して、いかに認識や意識や決断といった高度な情報処理機能を発現しているか？

Editorial: John Beggs, Phys. Rev Lett. 114 220001 (2015).

3つの量子マシンの大規模化の流れ



ニューロン数 ➡ 問題サイズを決定



シナプス数 ➡ 計算能力を決定

ご清聴ありがとうございました

NTT Physics & Informatics Laboratories

<https://ntt-research.com/phi/>

NTT物性科学基礎研究所

<https://www.brl.ntt.co.jp/J/index.html>