

研究報告書

「スケーラブル分子スピン制御技術の高度化により可能になる量子情報処理の新機能」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 2016 年 10 月～2020 年 3 月

研究者: 根来 誠

1. 研究のねらい

分子中のスピンを qubit として用いる量子情報処理システムは、コヒーレンス時間が長く、ある程度高精度の量子ゲート操作が容易である一方で、初期化が難しい、射影測定ができない、スケーラブルでないといった批判があり、量子情報処理実験の表舞台から少しずつ遠ざかっていった。しかし最近、初期化されていない高エントロピー量子系で、射影測定ができずにアンサンブル測定しかできない場合で実現可能な DQC-1 計算量クラスの問題を解くアルゴリズムでも、古典計算機で効率的にシミュレートできない「量子スプレマシー」が達成可能であることが明らかにされた。分子内に個別制御可能なスピンを集積するのは確かに難しい。しかし、低エントロピー化された並進対称的なスピン系ではグローバル操作に基づいて、DQC-1 より強力な BQP クラスの問題が解ける量子アルゴリズムが実現可能であることはわかっている。このようなスピン系なら現代の分子技術でスケーラブルに用意できる。量子スプレマシーに到達するためという目的では、分子スピン量子情報処理システムは表舞台に立てるだけの優れた量子系ではないかと申請者は考えた。

分子の核スピン・電子スピン系のスケーラブルな高精度操作技術と低エントロピー化技術を有していた申請者は、これらの技術を高度化し、分子スピン系で可能になる量子情報処理の新機能開拓を世界に先駆けて実装することを目指した。大別すると以下の3つのテーマで新機能実現を目指した。

まずは、申請者らが考案した量子エクストリーム学習の実装を目指した(研究テーマ A)。エクストリーム学習はニューラルネットワークを用いた機械学習の一種であり、これの量子版が量子エクストリーム学習である。次に、スピンスクイーミングを可能にする二軸ひねりのハミルトニアンを高精度で実現し、ロシュミットエコーの量子シミュレーションを目指した(研究テーマ B)。当初量子計測目的での高レベルスクイーミングも目指していたが、当初の狙いになかった量子カーネルトリックの実現ならびに量子カーネル学習の大規模実装へとつながることがわかり、この実装にエフォートを割いた。量子エクストリーム学習においてデータ入力のたびにリアルタイム低エントロピー化による量子フィードバックを行うことで量子レザバー計算が実装できる(研究テーマ C)。当初はリアルタイム低エントロピー化による散逸フィードバックの実現も目指していたが、測定フィードバックのための要素技術開発に集中した。また、分子スピンの高精度操作技術と低エントロピー化技術の高度化の基礎的な研究も行った。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究ではまず量子エクストリーム学習アルゴリズムを分子中の核スピンの系で実装し、簡単な関数の学習が可能であることを示した。標準的なニューラルネットワークによる機械学習では、教師データを用いてすべてのノード間の遷移レートをチューニングするが、エクストリーム学習では、ノード間遷移行列はランダムに選んで固定し、出力ノードへの線形重みだけをチューニングする。本研究で実装した量子エクストリーム学習は、ノードに分子中の核スピンを用いるもので、スピン間相互作用でノード間遷移を行い、データの入出力は磁気共鳴により行う。実際に 4bit のブール関数や 2 実数の非線形演算が学習できることを示した。さらに、ノード間遷移のチューニングを行う量子回路学習アルゴリズムならびにその実装方法を考案した。

次にロシュミットエコーの量子シミュレーションを行った。これは、スピン多体系をあるハミルトニアンで時間発展させ、ハミルトニアンを逆転させることで状態が元に戻ってくるエコーを観測するものである。動的相転移や OTOC (Out of Time Order Correlator) によるブラックホールのシミュレーションに用いられている。スピンスクイーミングを可能にする二軸ひねりのフロッケハミルトニアンを高精度に実現することで、分子中の核スピン系において 16 スピン以上が強く量子相関してからエコーが返ってくることを確かめた。このような大規模量子系のダイナミクスは古典コンピュータでのシミュレーションが非常に難しいとされている。このダイナミクスを量子カーネル学習に用いることができ、本研究では、世界で初めて量子カーネルトリックを実現し、関数のフィッティング、分類タスクを実装した。ダイナミクスの発展時間を長くすればするほど、より大規模な量子相関が成長して、学習性能が向上することを示した。

量子レザバー計算の分子スピン系での実装方法を考案し、さらに、性能改善を可能にする量子レザバーの空間多重化法の実装方法まで考案した。リアルタイム低エントロピー化による量子フィードバックを目指して FPGA RFSoc による装置を開発し、電子スピン qubit の制御を実現した。極低温下で複合回転操作を実現し、電子スピンの高精度操作と初期化の両立を実現した。核スピンの低エントロピー化法であるトリプレット DNP の高速化を研究し、高速により低いエントロピーが実現できることを示した。高精度操作が可能になる溶液状態の低エントロピー化を実現した。

(2) 詳細

研究テーマ A 「量子エクストリーム学習」

量子エクストリーム学習アルゴリズムは $1,^{13}\text{C}-\beta$ -アラニンを $^2\text{H}_\gamma$ - β -アラニンに希釈した単結晶で実装した。 ^{13}C スピンと複数個の ^1H スピンが量子ビット系をなすアンサンブル量子コンピュータとなっている。 ^1H スピンへのグローバル操作で入力を行い、ノード間遷移はスピン間の双極子相互作用が担う。 ^{13}C スピンのダイナミクスを時々刻々と測定し、測定データに線形重みをかけて出力とする。量子回路を図 1(a) に示す。グローバル操作とは、複数個のスピに対して同等の操作を同時に行うことを指す。

実際に 4bit の入力を行った際のダイナミクスを図 1(b)に示す。これらのダイナミクスで教師データに基づいて XOR などの簡単な関数が誤りなく学習できることを示せた。また、4bit

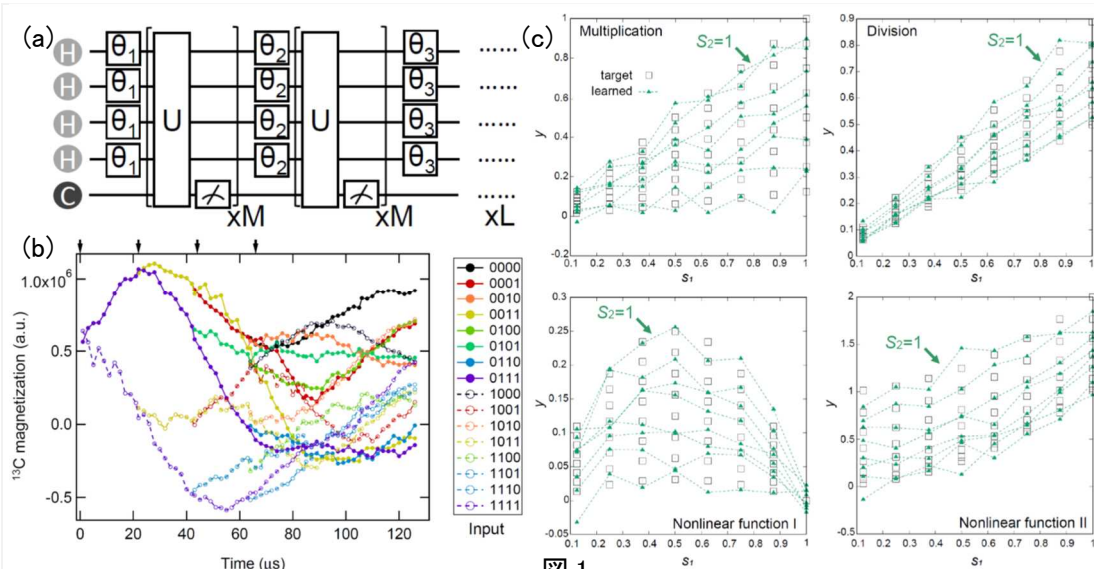


図 1

4bit 階調の 2 実数の非線形演算の学習結果を図 1(c)に示す。この実装方法はグローバル操作を用いているため ^1H スピンの数を容易にスケールできる。[“Machine learning with controllable quantum dynamics of a nuclear spin ensemble in a solid” M. Negoro, K. Mitarai, K. Fujii, K. Nakajima, M. Kitagawa, arXiv:1806.10910 (2018).]

量子機械学習の性能は量子ビット数、操作精度、系のエントロピーで高めることができるため、これを計画していたが、より高性能なアルゴリズムの開発も重要であると考え、ノード間遷移をチューニングする量子回路学習を提案し、実装方法を示し 6qubit のシミュレーションでフィッティングタスクと分類タスクが実現可能であることを示した [論文業績 1]。

研究テーマ B 「ロシュミットエコー型量子カーネル学習」

この研究で用いたアダマンタンには複数個の ^1H スピンがあり分子間の双極子相互作用を介した大規模な量子相関が実現できる。図 2(a)に示す 8 パルスと呼ばれるパルス列でのグローバル操作によってハミルトニアンは実効的に二軸ひねり型に変形される。パルスの位相を 180° ずらすと負符号付の二軸ひねり型になる。図 2(b)のような回路で位相 ϕ を 180° にした場合はロシュミットエコーが返ってきて、ずらしていくと返ってこなくなる。図 2(c)に示すが

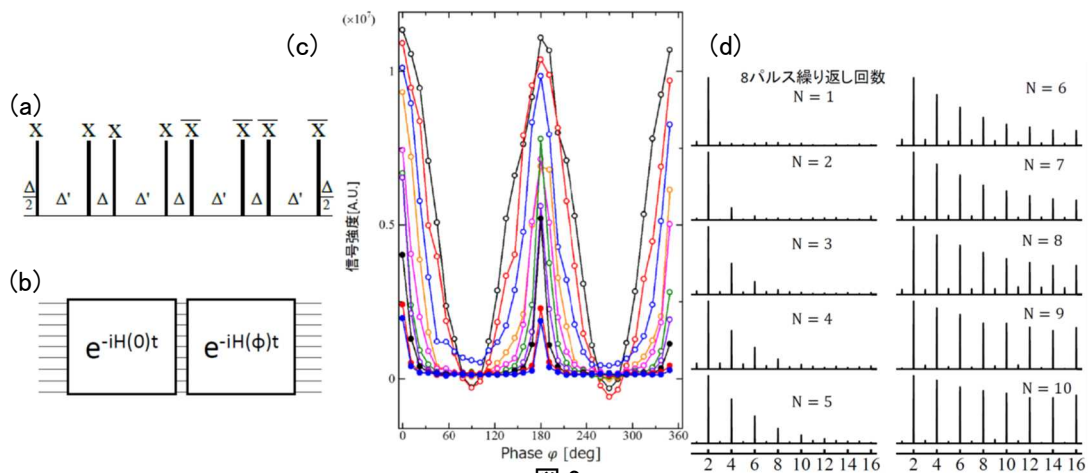


図 2

時間発展が長いものほど多くのスピンの量子相関し、この位相の変化に敏感になるため、少しのずれでもロシュミットエコーが返ってこなくなる。このロシュミットエコーは、位相 0 のハミルトニアンで時間発展してできた密度演算子と、位相 ϕ のハミルトニアンで時間発展してできた密度演算子の内積に相当する。ここから時間発展によってどれだけ量子相関しているかを調べることができる。図 2(d)に示すような、ロシュミットエコーをフーリエ級数展開して得られたスペクトルが量子相関するスピン数が試料中にどれだけ分布しているかを表しており、この実験では最大 16 スピン以上の量子相関が高い確率で発生していることを示している。このようなダイナミクスを用いて動的相転移や OTOC (Out of Time Order Correlator) によるブラックホールの量子シミュレーションが行われたことがある。

この古典コンピュータでシミュレート困難な大規模系での量子シミュレーションによって基礎物理学に貢献することを計画していた。また、量子計測目的の高レベルスピンスクイージングの実装も計画していたが、これを達成する代わりに、このダイナミクスを量子カーネル学習に用いることができることを見出し、エフォートを割いた。機械学習ではプリプロセッシングによりデータを高次元の特徴量空間に飛ばすことで、より複雑な回帰や分類を可能にするが、次元が増えると計算量が增大する。カーネル法とは高次元の特徴量空間での内積を用いるもので、これによって計算量が増大せずに特徴量空間の恩恵を受けることができる。量子カーネル法はヒルベルト空間やリウビル空間を特徴量空間とするものであり、例えばある位相のハミルトニアンでの時間発展後の密度演算子に射影する。先ほどのロシュミットエコーの実験により量子的な特徴量空間での内積を得ることができる。

これにより、関数のフィッティングタスクを行ったものが図 3(a)である。また、2 入力に増やして、分類タスクを行ったものも図 3(b)に示す。それぞれにおいて、ダイナミクスの発展時間を長くするほど、より大規模な量子相関が成長し、学習性能が向上することを示している。10 スピン以上が量子相関するダイナミクスを用いているもので、カーネル行列より特徴量空間の次元が大きい領域で量子カーネルトリックを世界で初めて実現したものであると言える。

“Experimental quantum kernel machine learning with nuclear spins in a solid” T. Kusumoto, K. Mitarai, K. Fujii, M. Kitagawa, M. Negoro, arXiv:1911.12021 (2019).

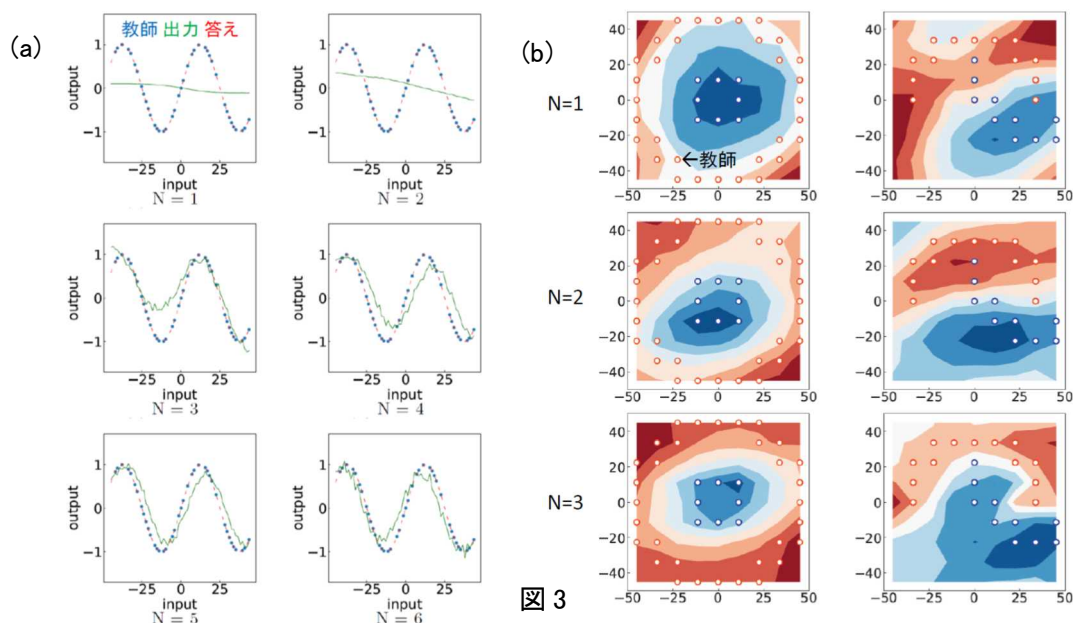


図 3

研究テーマ C 「量子レザバー計算」

量子レザバー計算の分子スピン系での実装方法を考案し、さらに、性能改善を可能にする量子レザバーの空間多重化の実装方法まで考案した〔論文業績 2〕。量子エクストリーム学習においてデータ入力のたびにリアルタイム低エントロピー化による量子フィードバックを行うことで量子レザバー計算が実装できる。散逸フィードバックを可能にするレベルの高速な低エントロピー化は実現できなかったが、以下に示す基盤技術の研究を行った。

核スピンの高精度操作が可能になる溶液状態の低エントロピー化を可能にする装置を開発し、熱平衡状態に比べ約 220 倍偏極率が高い低エントロピー状態を実現した〔論文業績 3〕。核スピンの低エントロピー化の高速化を研究し、照射レーザーの繰り返し周波数がこれまでの 50Hz より 2 倍に早くすることで、得られる偏極率も 2 倍になり、これを微弱な外部環境の検出を敏感にする量子相関状態を用いた量子計測の応用研究に用いた。

“Long-lived state in a four-spin system hyperpolarized at room temperature”, K. Miyanisshi, N. Ichijo, M. Negoro, M. Motoyama, A. Kagawa, M. Kitagawa, arXiv:1908.08699 (2019).

リアルタイム低エントロピー化による量子フィードバックを目指し FPGA RFSoc による装置を開発し、電子スピン qubit の制御を実現した。極低温 150mK 下で電子スピンを偏極率 99% に初期化した状態で、ランダムイズドベンチマーキングの忠実度 96% の操作を行った。室温で通常のパルス操作の忠実度が 97% である中、複合回転操作によって 99% まで高めた。

“Low Power, fast and broadband ESR quantum control using a stripline resonator”, Y. S. Yap, M. Negoro, Y. Sakamoto, M. Kuno, A. Kagawa, M. Kitagawa, arXiv:1911.04314 (2019).

3. 今後の展開

核スピンの量子機械学習では、とくに量子カーネル学習でのさらなる大規模化が期待される。ドイツのチームの先行研究ではパルス角度を非常に細かくチューニングすることで 58 スピンの量子相関を検出することに成功している。今後、数値的なパルス設計法によってよりロバストに二軸ひねりのハミルトニアンを実現することによって、手間を少なく、古典コンピュータでシミュレート不可能な大規模系でのカーネル推定を実現する。低エントロピー化することで、より大きな量子相関の信号も検出可能になるため、これによってさらに大規模な量子特徴量空間を用いた量子機械学習を実現する。また、日本の超伝導量子コンピュータ開発チームとの共同研究や商用量子コンピュータクラウドの使用を通して、超伝導量子コンピュータでの学習性能との比較検討を行っていく。

量子レザバー計算を電子スピン系で実装するのにいくつかの課題が明らかになった。まず、初期化が可能な温度でより高精度の電子スピン量子ビット操作を実現する必要がある。開発した FPGA RFSoc ベースの装置でひずみがより小さいパルス照射を実現して、複合回転操作によって 99% より高い忠実度を達成したい。そして、電子スピンを集積化して、高速な低エントロピー化が可能な磁場を探索する必要がある。分子スピンマテリアルの技術を持った研究者との共同研究を通じてこれを推進したい。

4. 自己評価

誤り訂正なしの量子コンピュータ実現までの間に、大規模量子系で実現でき、経済・社会に波及効果を与える量子情報処理の新機能は古典量子ハイブリッドアルゴリズムに頼る必要がある。本研究提案時は古典量子ハイブリッドアルゴリズムは量子化学計算や組み合わせ最適

化向けの限られたもののしか世界にほとんど知られていなかった。本研究プロジェクトが進行する中で、量子機械学習の古典量子ハイブリッドアルゴリズムが社会的に注目されるようになっていった。この分野は、藤井・中嶋による教師あり機械学習の古典量子アルゴリズムである量子レザバー計算の提案論文が 2017 年 8 月に掲載されたのを皮切りに、2017 年 12 月 Rigetti が超伝導量子ビットの系で教師なし機械学習の実装が行われ、本研究成果である量子回路学習を 2018 年 1 月に投稿し、2 月に Google から同様の提案があり、4 月には IBM がこれを実装し、6 月に本研究成果である教師あり機械学習である量子エクストリーム学習の提案と実装を発表した。2018 年から 2019 年にかけて本研究成果を引用する形で数多くの量子機械学習の古典量子ハイブリッドアルゴリズムが考案された。その中で量子カーネル学習に注目すると、2018 年 4 月に超伝導の 2 量子ビットの系での実装を皮切りに、2019 年 6 月に 2 光子の系で、そして、本研究成果で 2019 年 11 月に 10 スピン以上が量子相関するダイナミクスで量子カーネルトリックを実現した。今後、実装研究を通して量子機械学習はますます発展すると期待している。この大きな流れの中で、本研究プロジェクトは実施体制や研究費執行を適切にマネージすることで、古典シミュレート困難な近未来大規模デバイスでの実装が可能な「量子機械学習」と言う新機能の創出・実装に貢献できたと考えている。マネージの中で、当初の目的である量子レザバー計算は達成できなかったが、上記のようにいくつかの課題を明らかにしたので、今後これに取り組みたい。量子機械学習がいつ社会に還元されるかは世界のだれもがまだ予想するのが難しい状況であるが、今後、世界に先駆けて社会実装を行うことを目指していきたい。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. K Mitarai, M Negoro, M Kitagawa, K Fujii, “Quantum circuit learning” Phys. Rev. A 98, 032309 (2018).
2. K Nakajima, K Fujii, M Negoro, K Mitarai, M Kitagawa, “Boosting computational power through spatial multiplexing in quantum reservoir computing” Phys. Rev. Appl. 11, 034021 (2019).
3. A. Kagawa, K. Miyanishi, N. Ichijo, M. Negoro, Y. Nakamura, H. Enozawa, T. Murata, Y. Morita, M. Kitagawa, “High-Field NMR with Dissolution Triplet-DNP” J. Magn. Reson. 309, 105523 (2019). 表紙に採用
4.
5.

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 8 件(公開前の出願件名については件数のみ記載)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

国際会議招待講演 “Room temperature Dissolution Dynamic Nuclear Polarization” 1st India-Japan NMR Workshop, Yokohama, 2019

書籍 「量子コンピュータ/イジング型コンピュータ研究開発最前線」 根来誠、他 27 名、情報

機構(2019 年)

国際会議招待講演 “NMR implementation of quantum reservoir computing” The 2nd
International Symposium on Dynamics in Artificial Quantum Systems, Tokyo, 2018.