

研究報告書

「知的量子設計による量子計算・量子シミュレーションの新機能創出」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 2016年10月～2020年3月

研究者: 藤井 啓祐

1. 研究のねらい

近年の量子情報実験の進展はめざましく、光格子中冷却原子を用いた量子シミュレータ、超伝導量子ビットを用いたアナログ量子計算(NISQ: noisy intermediate scale quantum computing)、そして量子誤り訂正を伴うデジタル量子計算が現実味を帯びてきている。一方、現実が明らかになることによって、実験的現状と理論的要求に依然として大きなギャップがあることも明確になってきている。これらを踏まえ、制御された量子系の新たな機能を創出するためには、量子情報を実装する個々の量子系の特性・許される制御方法・古典側でもできる高度な情報処理を最大限に活用することによって、量子がもつ利点を最大限に引き出すための理論による新たなシステム設計が重要となっている。

本研究構想の目的は、冷却原子や超伝導量子ビット、NMR 量子スピンアンサンブル系などに代表される、様々な物理系の特色や制御性の制約に立脚した新たな理論的アイデアを導入することで、量子情報処理の実現を着実に次世代の機能へと推し進めることである。既の実現している、もしくは近未来的に実現される量子デバイスを最大限に活用するためには、すべてを量子系に押しつけ量子系から得られた測定結果から直接的に有益な情報を得るという従来戦略だけではなく、得られた測定結果を古典側においても高度に知的処理し、最大限有益な情報を紐解き、抽出することが重要であると考えている。このためには、古典コンピュータでも出来る部分と、真に量子性がなければ出来ない部分を明確に切り分け、後者のみを量子系へと着実にアウトソースする必要がある。本研究構想では、以上のような個々の物理系の制約の知見に基づいた系の設計や、また真に量子性の必要のない部分を古典側に知的処理する指針を、**知的量子設計(intelligent quantum system design)**と定義する。知的量子設計によって、量子がもつ機能を最大限引き出すための理論的枠組みを、情報科学・物理学・基礎工学(物理工学)の本質的融合によって構築する。実験グループとも連携することによって、質的にも規模的にもこれまでの量子情報実験を遥かに超えた新機能の実験的実現に理論側から貢献する。

2. 研究成果

(1) 概要

さきがけ研究提案時(2016年)の構想では、超伝導量子ビットの集積化などに基づく誤り耐性量子コンピュータを目指すボトムアップアプローチ、NMR 量子スピン系や冷却原子系などの制御性は低いが量子多体系の芳醇なダイナミクスを利用できるトップダウンアプローチの2つに分けて、それぞれの物理系の特性を生かした理論的提案を行うことを目的とした。その後、2017年に入り50-100量子ビット級の量子コンピュータの実現が近づき、このような小規模で誤り訂正を施すほどの規模をもたない量子コンピュータをどのように活用するか、というNISQ

(noisy-intermediate-scale quantum computing)という領域が立ち上がった。図らずしも、後者のトップダウンアプローチとして計画していた内容が、さらに超伝導量子ビットの系もサンプリングをして利用する、という形で大きな研究領域として立ち上がったことになる。

このような背景を踏まえ、当研究プロジェクトでは、誤り耐性量子コンピュータを実現するための理論研究(ボトムアップ)、と近未来的に実現する NISQ マシン(トップダウン)を有効利用するための理論研究の両輪で進めてきた。前者については、現在主流となっている表面符号を超えるような性能を有する新方式の提案にむけて、新方式の設計を行った。また、この新方式の研究の中で、性能評価を行うためには、量子誤り訂正の復号問題に取り組む必要があることが明らかになり、機械学習を用いて高速かつ高い精度で復号化する方法の提案を行った。さらに、今後実験的に重要となるであろうコヒーレンスエラー(量子性を持ったエラー)の解析方法を構築した。また、光量子ビットなど、多様な量子系を用いた誤り耐性量子コンピュータの実現に資する研究をすすめた。後者については、アンサンブル量子系の多自由度性を用いて機械学習を行う量子レザバ計算に発想を得て、パラメータ付き量子回路からの出力をモデルとして機械学習を行う量子回路学習や、量子レザバ計算をフィードフォワード型にした量子エクストリーム学習などを提案した。量子エクストリーム学習や、量子カーネル推定などを実験グループと協力し原理実証実験を行った。さらには、NISQ マシンを量子化学計算に利用するための手法の提案や、小規模な NISQ マシンをもちってより複雑な量子計算を実行するための問題分割法など、NISQ マシンの性能を引き出すための提案も多数行った。

(2) 詳細

[誤り耐性量子コンピュータを目指した理論研究] 誤り耐性量子コンピュータを目指した研究では、これまで主流となっている表面符号を用いた研究に加え、表面符号に変わる新たな方式の提案という意欲的な目標を設定して研究を進めてきた。

この研究をするなかで、復号化方法が誤り耐性量子コンピュータの研究においてボトルネックとなることも明らかとなった。特定の限定的な状況では、効率の良い復号化方法が存在するが、一般的には NP 困難な問題となる。特にエラー確率が高い近未来的には、このような復号化を高性能かつ高速にする方法論が必要である。このため、機械学習を用いた復号化方法の構築を行った(Davaasuren-Suzuki-Fujii-Koashi, arXiv:1801.04377)。また、これまで確率的な(いわば古典的な)エラーに対してのみ量子誤り訂正の性能が評価されてきたが、量子誤り訂正の実験的実現が近づくなか、量子性をもったエラー、コヒーレントエラーについてもその性能にたいする影響について無視はできない。このため、コヒーレントエラーを解析的に取り扱うことができる誤り訂正モデルを構築し、コヒーレントエラーの誤り閾値に対する影響も解析した。また、この解析結果を説明しより複雑なモデルを拡張できるような有効モデルの構築も行った(Suzuki-Fujii-Koashi, Phys. Rev. Lett. **119** 190503, 2017)。

これらの研究に加え、光を用いた誤り耐性量子計算の研究(Fukui-Tomita-Okamoto-Fujii, Phys. Rev. X **8** 021054, 2018)や、誤り耐性量子コンピュータがきちんと閾値未満のエラー確率で動作しているかどうかを効率良く検証するための方法も提案した(Fujii-Hayashi, Phys. Rev. A **96** 030301(R), 2017)。

[近未来的に実現する NISQ マシンの有効活用に関する理論研究]

さきがけ提案当初(2016 年度初旬)は、近未来的に実現する量子コンピュータからサンプリングをし、古典コンピュータ上の処理と合わせて活用するというアプローチはまだ定着していなかった。そのような中、従来初期化が難しいと考えられていた NMR アンサンブル量子スピン系に着目し、機械学習へと応用する量子レザバー計算を提案した (Fujii-Nakajima Phys. Rev. App. 8 024030, 2017, Nakajima et al Phys. Rev. App. 11 034021, 2019)。これは、現在主流となっている、量子古典ハイブリッドアルゴリズムを機械学習に応用するという研究のさきがけであった。また、この量子レザバー計算では、アンサンブル量子系からサンプリングすることなく物理量の期待値を得ることを前提としていたが、NISQ という領域が 2017 年以降拡大し、超伝導量子ビットなど制御性の高い量子系に対してサンプリングをすることで物理量の期待値を得る、量子古典ハイブリッドアルゴリズムが研究されるようになっていった。そのような分野の変化に呼応して、パラメータ付き量子回路を機械学習のモデルとして利用し、教師あり学習をする世界初の NISQ を用いた教師あり学習アルゴリズム、量子回路学習を提案した (Mitarai-Negoro-Kitagawa-Fujii, Phys. Rev. A 98 032309, 2018)。この方法では、パラメータ付き量子回路の最適化を勾配法を用いて実行するために、量子回路の解析的微分を行うことで勾配の値を実験結果から直接計算するための方法を導入した。量子回路学習は提案から2年を待たずして95件以上 (google scholar 調べ) 引用されており、このパラメータ最適化法は現在 NISQ のための量子古典ハイブリッドアルゴリズムで広く使われている手法となった。

また、上記の量子古典ハイブリッドアルゴリズムの研究を進める中で、量子アルゴリズムの性能評価をする必要が生じ、従来コンピュータを用いて高速に量子アルゴリズムをシミュレーションすることが NISQ 研究のための研究インフラとして重要であることに気づいた。このため、さきがけ研究予算を利用してプログラミングスキルのある技術補佐員を雇用し、従来コンピュータを用いた量子コンピュータの高速シミュレータを開発した。これは現在、qulacs としてオープンソースで全世界の研究者が利用できるようにしている。また現在のところ 30 量子ビット未満の NISQ 研究を最も高速にシミュレーションできる世界最速のオープンソース量子コンピュータシミュレータである。

量子古典ハイブリッドアルゴリズムの応用範囲を広げるための研究および、問題を分割することで、小規模の量子コンピュータの性能を最大限に活用するための方法も提案した。応用に関する研究では、量子回路学習と量子化学計算のアプローチを組み合わせることで、分子の基底状態やそのエネルギーを汎化し予測するためのアルゴリズムを提案した (Mitarai-Yan-Fujii, Phys. Rev. App. 11 044087, 2019)。また、古典計算機でより難しくなるであると予想される励起状態計算 (Nakanishi-Mitarai-Fujii, Phys. Rev. Res. 1 033062, 2019) や、低エネルギー部分空間における実時間ダイナミクスの計算 (Heya et al., arXiv:1904.08566)、非平衡定常状態の計算 (Yoshioka et al., arXiv:1908.09836)、など従来の基底状態を計算する VQE (variational quantum eigensolver) を様々な用途に拡張した。

さらに、量子古典ハイブリッドアルゴリズムを用いて2量子ビット演算の精度を向上させる方法 (Heya et al, arXiv:1810.12745) や間接測定を直接測定に置き換える方法 (Mitarai-Fujii, Phys. Rev. Res. 1 013006)、そして非隣接量子ビット間の2量子ビット演算を仮想敵に古典処理によって実装するなど NISQ のための問題分割法 (Mitarai-Fujii, arXiv:1909.07534) を提案し

た。

また、近未来的に実現する量子デバイスの量子超越性の検証という方向性では、誤り耐性量子コンピュータの要件を満たさない、よりノイズレベルの高い量子コンピュータにおける量子超越性理論(Fujii, arXiv:1610.03632)や、準古典確率的断熱量子計算における量子超越性理論(Fujii, arXiv:1803.09954)の研究も進めた。

3. 今後の展開

Google や IBM が 50 量子ビット級の量子コンピュータを実現しつつあり、そして我が国における実験のプロジェクトにおいても同様の規模の量子コンピュータが次の5年のスコープに入るなど、今後量子コンピュータの実装は千量子ビット級まで順調に進歩すると予想される。そのような中、量子誤り訂正は量子超越性の次にくるマイルストーンであり、この実現が射程圏内に入ってきたと考えられる。本さがけ研究期間には、NISQ 時代の勃興というダイナミックな時代の変化があり、NISQ のための応用研究に当初の予定より多くのエフォートを割くことによって重要な研究成果が得られた。一方で、量子誤り訂正の新規手法の提案は性能評価の解析の途中であり、今後の残りのさがけ研究期間および今後の研究テーマとして取り組む予定である。また、量子誤り訂正の実現が近づくなか、より現実的なエラーや、制御における問題の解決を目指した研究も、従来方法の表面符号に基づいて今後進めていく予定である。

一方、NISQ 研究においては、現在様々な手法が提案されるなか、その原理実証実験としては小規模にとどまる結果しか世界的に示されていない現状である。今後は、量子化学や物性、そして機械学習など応用が期待される分野にとって十分意味のあるベンチマークを進め、NISQ マシンであっても意味のあるタスクが実行可能か、それを実行するために不十分な要素なにかを明確にしていく予定である。

4. 自己評価

本さがけプロジェクトでは、NISQ の活用という近未来的に実現する量子コンピュータの活用や、当分野の究極的な目標である誤り耐性量子コンピュータにおいて必須となる量子誤り訂正という2つの大きな課題に取り組んだ。前者については、NISQ という言葉が明確に意識しだす前から、量子ダイナミクスを機械学習へと応用する、量子レザバー計算に着目し、世界に先駆けて、量子古典ハイブリッドの機械学習アルゴリズムを提案した。また、これに続いて、パラメータ付き量子回路をモデルとして機械学習を行う、量子回路学習も提案した。本論文は発表から1年半ほどで95件以上引用されており、ここで導入した量子回路の解析微分による勾配の取得方法は、以降の多くの研究で利用されている。また、NISQ マシンを用いた量子古典ハイブリッドアルゴリズムの性能評価を行うために開発した高速シミュレータ qulacs は現在オープンソースとして公開され、当プロジェクトを超えて多くの研究者が利用している。これらの開発環境を用いて、励起状態や低エネルギー部分空間内のダイナミクス、非平衡定常状態など様々な用途に応用するための手法も開発された。

後者においては、50量子ビット級の量子コンピュータが実現するなか、量子誤り訂正の実証実験がいよいよ射程範囲に入ってきた。実際に量子誤り訂正の実験をする上では、高速かつ性能のよい復号化方法が必須である。また、実際の実験ではこれまであまり検討されてこなかった量子性のあるエラーが生じていると考えられる。機械学習による復号化方法の提

案や、コヒーレントエラーを解析的に取り扱うモデルや半古典的な実効理論の構築は、これら近未来的に実現する量子誤り訂正の実証実験に資するものである。また、長期的には、既存の表面符号方式を性能や機能面で超えるような新たな誤り耐性量子計算法が求められる。このような意欲的な課題にも本さがけプロジェクトで取り組むことができ、今後も継続して研究を進める予定である。

以上の成果から、本さがけプロジェクトでは当初計画していた目的をほぼ達成し、またNISQ 研究については世界のリードする新しい潮流を作ることに成功したと判断する。量子誤り訂正については、表面符号方式をこう得るという挑戦的かつ長期的な課題であり、さがけ期間終了後も継続することで10年後、新たな潮流となりうる研究を本さがけ研究で得られた成果をもとに創成したいと考える。

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, and K. Fujii, "Quantum circuit learning." <i>Physical Review A</i> , 2018, 98, 032309. |
| 2. Y. Suzuki, K. Fujii, and M. Koashi. "Efficient simulation of quantum error correction under coherent error based on the nonunitary free-fermionic formalism." <i>Physical Review Letters</i> , 2017, 119, 190503. |
| 3. K. Mitarai and K. Fujii, "Methodology for replacing indirect measurements with direct measurements". <i>Physical Review Research</i> , 2019, 1, 013006. |
| 4. K. Fukui, A. Tomita, A. Okamoto, and K. Fujii, "High-threshold fault-tolerant quantum computation with analog quantum error correction." <i>Physical Review X</i> , 2018, 8, 021054. |
| 5. K. Fujii and K. Nakajima, "Harnessing disordered-ensemble quantum dynamics for machine learning", <i>Physical Review Applied</i> , 2017, 8, 024030. |

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 4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)

- ・(トップ国際会議口頭発表採択) K. Fujii, "Threshold theorem for quantum supremacy", 20th Annual Conference on Quantum Information Processing (QIP), Seattle, USA (14-20/1/2017).
- ・(国際会議招待講演) Keisuke Fujii "Quantum speedup in stoquastic adiabatic quantum computation with non-standard measurements", 18th Asian Quantum Information Science Conference (AQIS2018), Nagoya, Japan (8-12/9/2018).

・プレスリリース:「量子コンピュータのデバッグを高速化～速いがゆえのジレンマを解消～」
EETimes: <https://eetimes.jp/ee/articles/1711/10/news035.html>



マイナビニュース:<https://eetimes.jp/ee/articles/1711/10/news035.html>

- ・Google の量子超越性についての識者としてのコメント、日経新聞、産経新聞、朝日新聞(予定)、東京新聞(予定)、Newton(予定)、日経サイエンス(予定)
- ・小柴健史, 藤井啓祐, 森前智行, 「観測に基づく量子計算」, コロナ社(2017).
- ・藤井啓祐, 「驚異の量子コンピュータ-宇宙最強マシンへの挑戦-」, 岩波科学ライブラリー(2019).