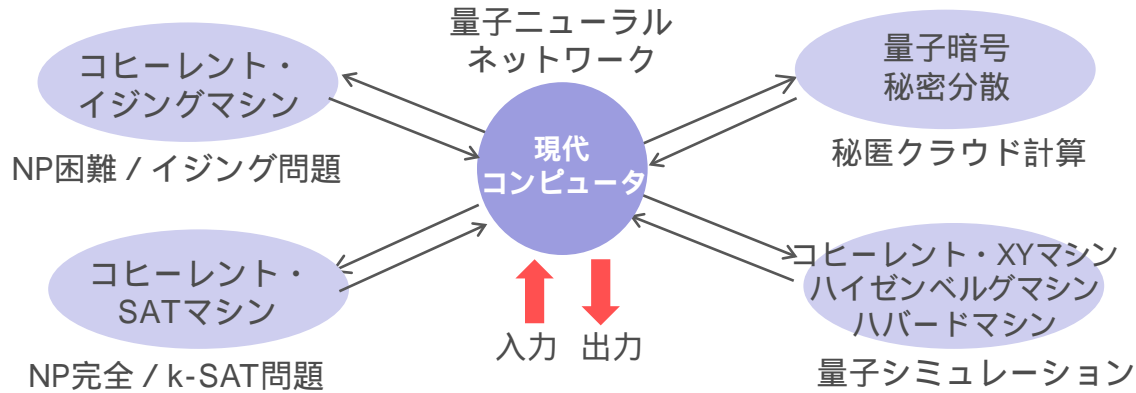


革新的研究開発推進プログラム (ImPACT)
「量子人工脳を量子ネットワークでつなぐ
高度知識社会基盤の実現」
進捗状況報告について

プログラム・マネージャー
山本 喜久

プログラム概要

脳における大規模・低電力・高度な情報処理をつかさどる巨大ニューラルネットワークを光で実現し、量子原理に基く超並列計算を利用して、現代コンピュータでは処理できない大規模な組合せ最適化問題を高速・高精度で解く量子人工脳を開発する。



創薬



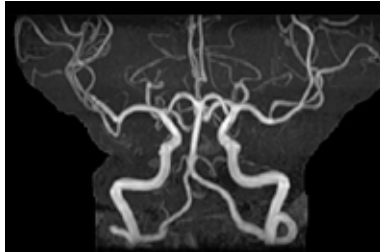
標的たんぱく質に安定に結合する化合物を少数個同定する
リード最適化
低分子医薬品開発への展開

無線通信



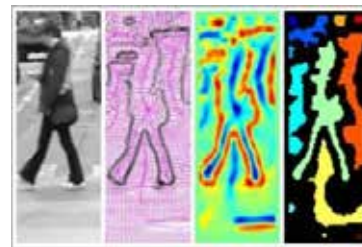
スループットを最大にする**周波数、送信電力の実時間最適割り当て**
多数の基地局の実時間最適化への応用

圧縮センシング



不十分なデータから情報源のスパース性を利用して元画像を再現する**スパース推定**
医療、天体観測などへの応用

機械学習



文字や画像情報の深層学習を高速に実行するための**ボルツマンサンプリング**
自動運転、AIへの応用

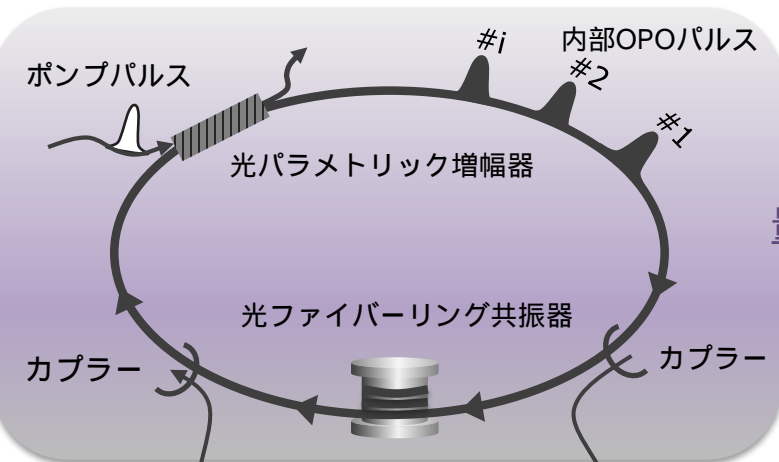
Fin Tech



リスクと利益のトレードオフ問題を
実時間で処理する**連続量最適化**
ユーザフレンドリーなポートフォリオの最適化

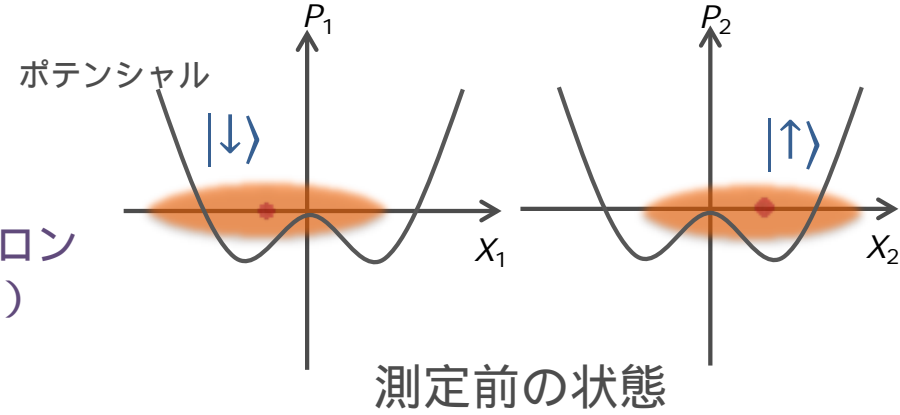
量子ニューラルネットワーク (QNN) の特徴： 全結合の実装と量子トンネリングによる最適解の並列探索

光パラメトリック発振(OPO)光パルス

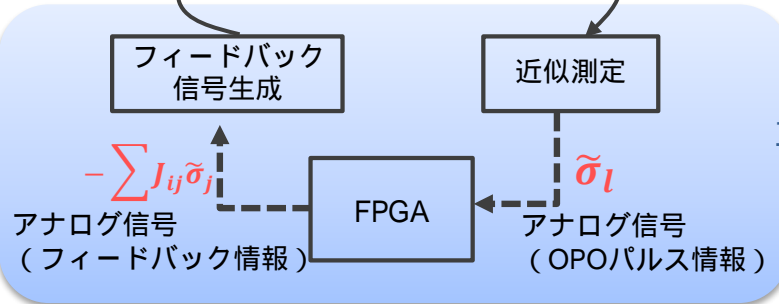
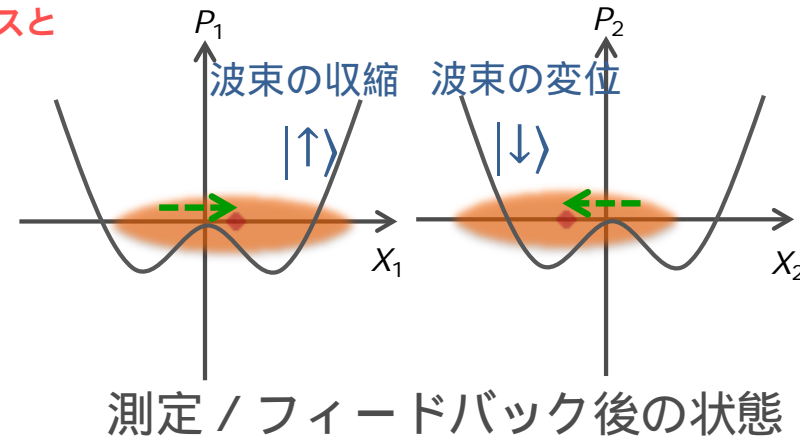


量子ニューロン
(解探索)

2つのOPOが反強磁性結合している場合



内部OPOパルスと
量子相関

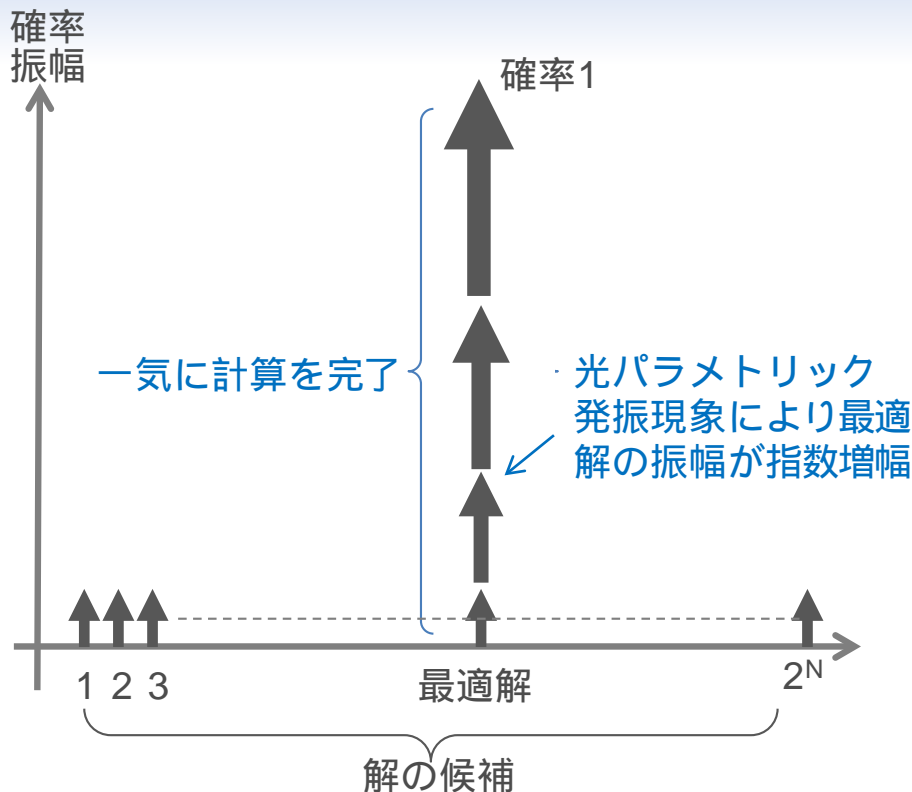


量子シナプス
(問題設定)

FPGA測定フィードバック回路

1つの測定フィードバック回路は、 N^2 の
全シナプス結合を1周回時間毎に実現する

(相関を持った)量子トンネリングで
最適解を探索



Charles Townes

レーザー発振 (1964年ノーベル物理学賞)

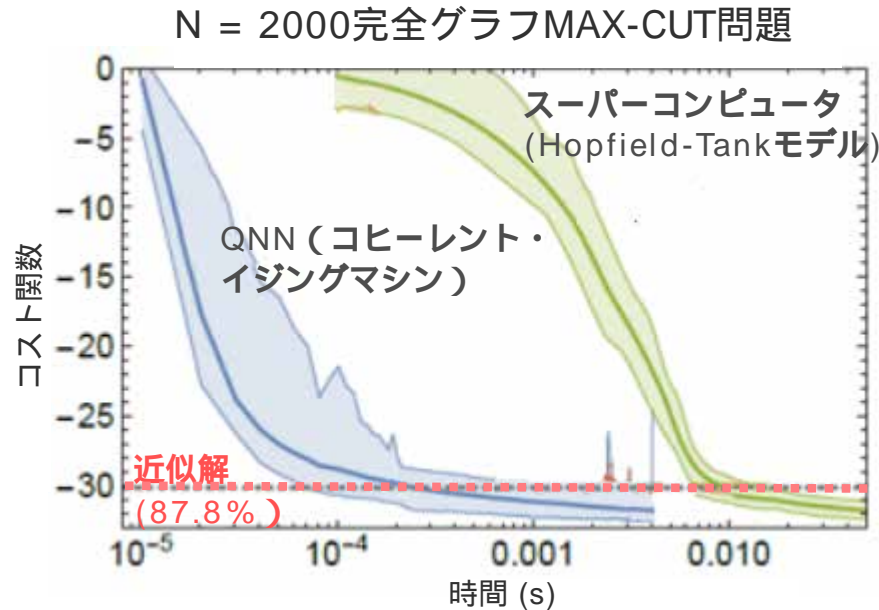


南部 陽一郎

自発的対称性の破れ (2008年ノーベル物理学賞)

現代コンピュータとの性能比較

スーパーコンピュータ（Hopfield-Tank ニューラルネットワークモデルをアルゴリズムとして実装）に比べて、約100倍の高速性が確認された。



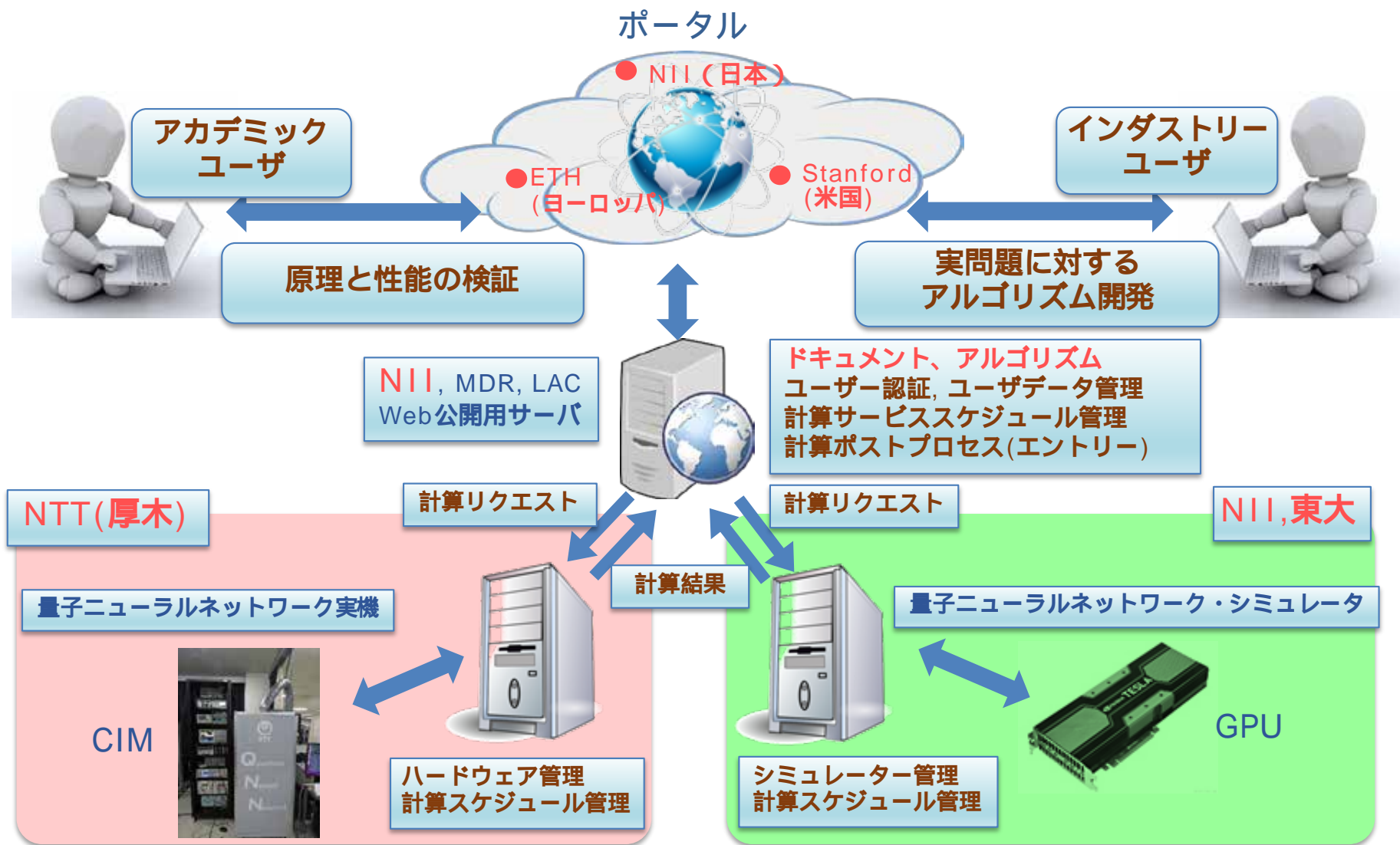
	最短時間 (sec)	平均時間 (sec)
QNN (コヒーレント・イジングマシン)	7.1×10^{-5}	2.6×10^{-4}
スーパーコンピュータ (現代アルゴリズム)*	7.0×10^{-3}	9.7×10^{-3}
スーパーコンピュータ (量子シミュレーション)**		8.8

(いずれも実測値)

* ホップフィールド・タンクニューラルネットワークモデルを実装

** 量子マスター方程式と射影演算子による量子モデルを実装

量子ニューラルネットワーク・クラウドシステム



ü 現在までのアクセス件数 ~ 120万件
ü 利用者数 > 1,000人

QNNで解ける組合せ最適化問題の分類

適用先・問題	機能・タスク	スピンの数	協力研究機関
化合物探索 (創薬, 生体触媒)	病原となる蛋白質の活性を抑制する化合物・ペプチド探索のためのリード最適化	サイト数 (300) x 原子種 (20) x 配向 (10) 60,000	理化学研究所 一部製薬会社
無線通信 ネットワーク	最適なりソース割当てを 実時間で行ない、端末間の 通信容量の最大化を実現	周波数バンド数 ($n = 20$) x 端末数 ($k = 500$) 10,000	東京理科大学 一部通信サービス会社
スパース推定 (MRI, 天体観測)	不完全なセンシングデータ から、元データのスパース 性を推定しながら、復元を 図る	画素数 (n) 6,000 ~ 50,000	東北大学 東京工業大学 広島大学 東京大学
最大クリーク問題 (化合物 / 蛋白質構造 比較)	全ての頂点間に枝がある 頂点の部分集合で最も 大きなものは何か?	問題サイズ(n) 2,000 ~ 20,000	東京大学
頂点彩色問題 (スケジューリング、 レジスタ割り付け / 飛行高度割り付け)	n 個の頂点を k 色だけを 使って、枝を共有する頂点 ペアを異なる色で塗り分け ることは可能か?	頂点数 (n) x 色数 (k) 2,000 ~ 40,000	NASA Ames量子人工知能 研究所
充足可能性問題 (k -SAT問題)	n 個の変数の中から選ばれた k 個の変数からなる論理式の 積が成立するか、どうか?	ハードウェア検証 (40,000 ~ 800,000スピン) ソフトウェア検証 ($\leq 3,200,000$ スピン) 因数分解 (40,000 ~ 400,000スピン)	東京大学

➡ 実問題へ適用するためには、10万ビット全結合マシンが必要である

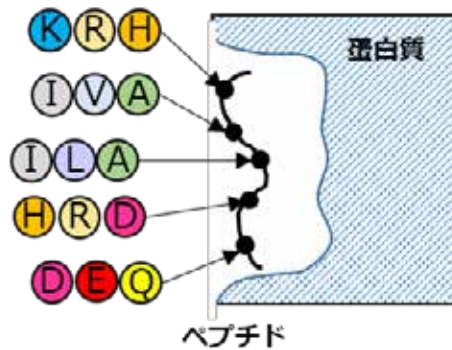
QNN (コヒーレント・イジングマシン) の応用

- 創薬のための化合物・ペプチド設計と生体触媒のための蛋白質設計 -

蛋白質に安定に結合できる
リガンドを予測する

化合物設計
Drug Design

アミノ酸を割当



ペプチド設計

リガンドと結合できる
アミノ酸を予測する

蛋白質設計
Protein Design

低分子医薬品

疾患関連蛋白質を制御
する化合物

30サイト x 20原子種
(全候補数 ~ 10^{39})
600スピン

中分子医薬品

疾患関連蛋白質を制御する
ペプチド

ペプチドワクチン

抗体生産を促すペプチド

20サイト x 20アミノ酸 x 10構造
(全候補数 ~ 10^{46})
4,000スピン

生体触媒

医薬中間体を生成する酵素
化学触媒に替わる酵素
アグリバイオなどの分野に
も応用可能

300サイト x 20アミノ酸 x 10構造
(全候補数 ~ 10^{690})
60,000スピン

10万ビット全結合マシン実現に向けた技術的課題

ハードウェア

光パラメトリック発振器

- n 長さ 5 kmの光ファイバリング共振器（重力波検出用レーザ干渉計よりも1 km長い）の位相安定化
 - ➡ ポンプレーザの周波数同期技術で対応
 - ➡ 光ファイバの光路長安定化技術で対応

電子回路（FPGA, ADC, DAC）

- n パルス間隔200 psec毎に、 $10^5 \times 10^5$ のベクトル積演算結果をフィードバック
 - ➡ FPGA（Xilinx VU13P）54個を用いた超並列処理で対応

ソフトウェア

アルゴリズム開発

- n 制約項とコスト関数を独立して最適化するアルゴリズム
 - ➡ リカレント・ニューラルネットワーク（誤り検出・訂正層の導入）により実現

クラウドシステム開発

- n 世界のアルゴリズム開発者の取り込み
 - ➡ “Virtual QNN”（高速数値シミュレータ）の導入と公開