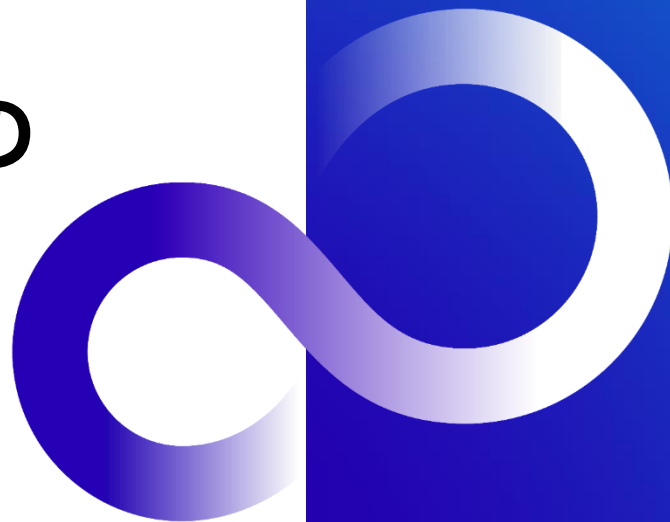


次世代計算基盤に係る調査研究
新計算原理チーム最終報告会

FUJITSU

量子コンピュータシミュレータの 研究開発状況

2024年5月29日
富士通株式会社
量子研究所
近藤正雄



- 従来コンピュータ上で、量子コンピュータの計算を模倣
 - 利用できる量子ビット数は少ない：State vector方式で～40数ビット、
 - 量子加速を用いた高速な計算処理はできない
 - エラーフリーで計算可能
- 量子エラー訂正などの量子アルゴリズムの開発、量子アプリケーションの開発に当たって非常に重要

- IDCによる市場予測 (WW QC Forecast, 2023-2027)

- Quantum Computing全体での顧客支出は2022 : \$1.1b \Rightarrow 2027 : \$7.6billionでCAGR : 48.1%
 - ✓ Market Segmented:コアとなるQC/DA/QCaaS(CAGR 58.7%)だけでなく、関連する量子暗号、量子通信などのサービス(CAGR=38.6%)を含む

- Persistence Market Researchによる市場予測

- Quantum Computing産業全体での市場規模は2021 : \$6.9billion \Rightarrow 2031 : \$127.4billionでCAGR : 33.7%
 - ✓ Market Segmented:Enterprise Quantum Computing with Hardware, Software Component by On-premise, Cloud Deployment
- シミュレーション&テストアプリは、2021年に29.4%以上の最大収益シェアを占めると予想
 - ✓ シミュレータの商業的な利用可能性は、エンドユーザー側の研究開発活動の増加を支援
 - ✓ 各企業は、要件に応じた量子コンピューティング・アプリケーションの開発・テストを開始
 - ✓ 量子コンピュータのシミュレータを利用することで、量子コンピュータの挙動を研究し、量子アルゴリズムを実行することが可能

- 実用的な量子コンピューターが実現するのは2030年以降
- 量子シミュレーションが市場の割合が30%を維持すると仮定
 - 2021 : \$2.3billion ⇒ 2031 : \$42.5billionの市場規模となる
- 但し、現状出ている市場規模予測は調査会社によって幅が大きいため参考程度
 - 量子シミュレータに特化した市場予測はまだないが、当面は右肩上がりを予想

- 現在、利用されている量子シミュレータは大きく分けて次の3種類
 - 状態ベクトル型
 - テンソルネットワーク型
 - 決定グラフ型

- 現在、最も一般的に利用されている量子シミュレータ
- N 量子ビットの量子状態は 2^N の長さの複素ベクトルで表現できるが、そのまま 2^N 個の複素数分のメモリを確保してシミュレーションを行う方式
- 行列ベクトル演算を高速に行うためにGPU の活用も可能
- 倍精度の複素数を表現する場合
 - 30 量子ビットの状態ベクトルを保持するには16GB が必要
 - メモリ容量の制約から一般的なコンピュータを用いてシミュレーションするインタラクティブな開発環境では30 量子ビット程度が限界 ⇒ クラスタ型計算機が不可欠
 - ビット数が増えることに取りうる状態の空間が2冪で広がる：富岳クラスの大規模スーパーコンピュータを用いたとしても、40数量子ビット程度の計算が限度

量子コンピュータシミュレータにおける量子計算のメモリが不足する問題の解決
⇒いくつかの手法が提案

- 状態ベクトルをMPS(Matrix Product State, 行列積状態) として保持し、量子回路をテンソルネットワークに見立ててシミュレーションを行う手法
 - Bit : 100 (IBM) 、 50 (AWS)
- 必要なメモリ量を削減できる可能性があるが、エンタングルメントが多い量子状態や深い回路では逆に動作が遅くなる欠点がある
- 本手法は、特に量子機械学習で活用

- 決定グラフ : 論理関数を表現するデータ構造として古くから利用
- 量子状態 (ベクトル) や量子回路 (行列) を保存するために利用
- 共通部分に部分ベクトルがある場合や、0 以外の値が少ない場合 (スパースな 場合) に、使用メモリ量を削減することが可能
 - Bit:50-100?
- 表現すべきベクトルや行列の値がランダムの場合、良いパフォーマンスが得られない可能性が高い

- 決定グラフ型量子シミュレータの詳細と性能ベンチマークは以下の資料を参照
 - 情報処理学会研究報告 第10回量子ソフトウェア研究発表会
 - <https://www-sato.cnl.t.u-tokyo.ac.jp/Archive/qs10.pdf>
- 決定グラフ型と状態ベクトル型の比較
 - Grover, Shorアルゴリズムでは、決定グラフ型での実行が速い
 - ⇒回路全体を表す行列を作れるため、効果が大い。
 - ⇒これらのアルゴリズムは回転ゲートの数が少なく、パラメータもランダムになりにくい
 - ⇒特にGroverは有望な適用先の1つ

量子シミュレーター一覧：大手1

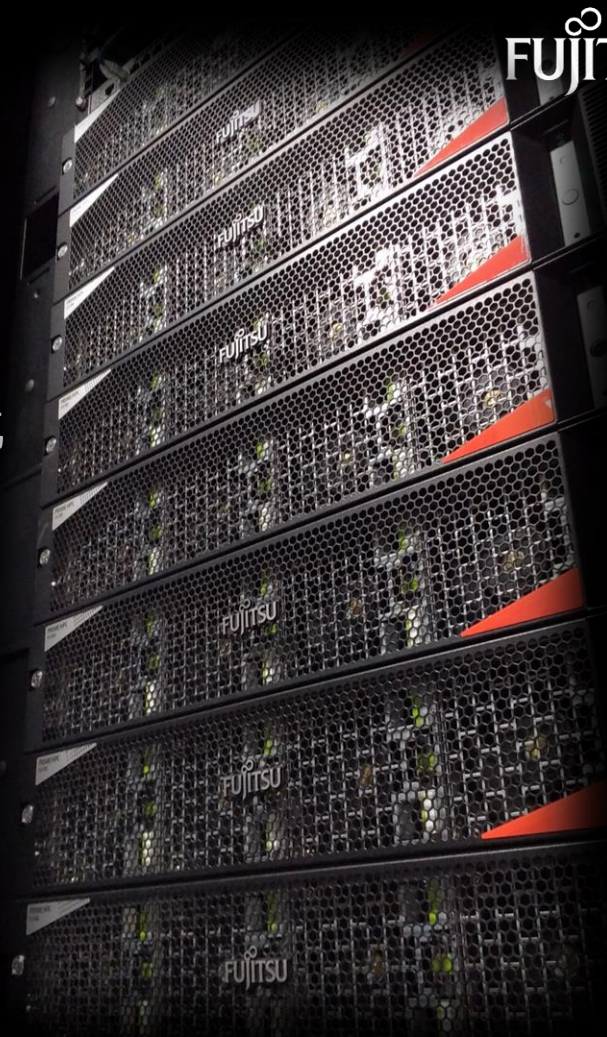
提供元	シミュレータ名	Default Framework	State Vector (qubit)	Tensor Network (qubit)	他方式 (qubit)	文献
IBM	Qiskit Aer	Qiskit	32	100	Stabilizer (5000)	Link
Google	Cirq	Cirq	builtiin 20 & qsim 45	-	QVM	Link
Amazon	Amazon Bracket	Amazon Braket	25 & 34	50	Dm (12 & 17)	Link
Microsoft	Sparse Simulator	QDK	110	-	-	Link
Intel	Intel QS	Intel QSDK	40	×	×	Link
NVIDIA	cuQuantum	CUDA Quantum	50	1,668	-	Link
Atos	QLME Appliance	Quantum Learning Machine	オンプレ 41 & クラウド 38	×	×	Link
Rigetti	QVM	Forest SDK	26	-	DM (26)	Link
IonQ	Simulator	IonQ Quantum Cloud	25	-	-	Link
Quantinuum	System Model H1 Emulator	TKET	20	×	Stabilizer	Link
Xanadu	lightning	PennyLane	○	×	×	Link
	Jet	PennyLane	×	○	×	Link

量子シミュレーター一覧：大手

提供元	シミュレータ名	Default Framework	State Vector (qubit)	Tensor Network (qubit)	他方式 (qubit)	文献
National Supercomputing Center	-	-	-	10×10	-	Link
Alibaba	TaiZhang2.0	ACQDP	-	○	-	Link
Huawei	HiQ3.0 All-in-one QS server	HiQ Quantum Computing Cloud Platform	42	81	-	Link
Quantum Origin	Wuben	QPanda 2	-	○	-	Link
Baidu	QCompute	Quantum Leaf	-	-	-	Link
QuTech	QXSimulator	-	-	-	-	Link
QunaSys	Qulacs	-	○	×	-	Link
オクスフォード大	QuEST	-	38	-	-	Link
チューリッヒ工科大 (ETH)	ProjectQ	ProjectQ	45	-	-	Link
ユーリッヒスーパーコンピュータセンター	JUQCS-G	-	○	-	-	Link
QuantExプロジェクト	QXTool	-	-	○	-	Link
NASA	qFlex	-	-	○	-	Link

40 量子ビット量子シミュレータ

- 状態ベクトル型の常設専用量子シミュレータとして世界最大規模
 - ✓ スーパーコンピュータ「富岳」のチップA64FX搭載PRIMEHPC FX700のクラスタシステム
- 顧客連携によるアプリケーション探索に利用
- 新方式の大規模量子シミュレータの開発
 - ✓ テンソルネットワーク型
 - ✓ 決定グラフ型



- 富士通が運用している量子シミュレータの詳細は以下の資料を参照
 - 2024/02/05 PCCC AI/HPC OSS活用ワークショップ 講演資料
 - https://www.pccluster.org/ja/event/data/240205_pccc_wsAI-HPC-OSS_01_ohtsuji.pdf

ユースケース

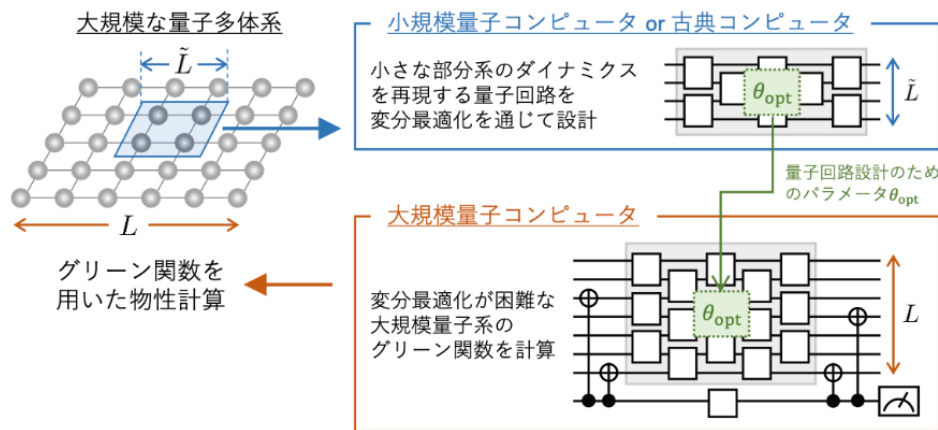
ビジネスユースケース：大手系1

利用者	分野	検討項目	ソース情報
ExxonMobil	最適化	配送最適化、VQE、QAOA、ADMM	Link
Aioi Nissay Dowa USA	保険	自動運転技術向け保険開発、二値 (safe/fail) 分類モデル	Link
BMW	自動車	生産前の車両構成、生産中の材料の変形、車両センサーの配置、自動品質評価のための機械学習	Link
Airbus- BMW	自動車 航空	量子シミュレーションによる腐食抑制、量子最適化でより持続可能なサプライチェーン、量子機械学習による未来の自動モビリティ、量子ソルバーによる空力設計の改善	Link
Kvantify	材料科学	分子電子構造シミュレーション、化学計算、フェルミオン適応サンプリング理論 (FAST-VQE)	Link
Good Chemistry	材料科学	量子化学計算、インクリメント法 (MI-FNO)、インクリメンタル完全構成相互作用 (iFCI)	Link
Goldman Sachs	金融	金融契約の価格設定、モンテカルロ法	Link
ENEOS/QunaSys	材料科学	触媒研究、分子振動解析	Link
BASF	材料科学	分子シミュレーション	
ニューヨーク州立大学ストーニーブルック校	基礎検討	素粒子の複雑な相互作用の研究、量子シミュレーション	Link
HP	材料科学	量子化学における磁気相転移	
Qubit Pharmaceuticals	創薬	薬物の分子シミュレーション、モデリング、分子動力学	Link
University of Applied Sciences Upper Austria (FH Upper Austria)	基礎検討	暗号プロセス改善、情報セキュリティ	Link
The Centre of Computation Research and Technology (CCRT)	基礎検討	シミュレーション、ビッグデータ、AI、機械学習、等	Link
The Science and Technology Facilities Council's Hartree Centre	基礎検討	量子可能性の検討、量子アルゴリズム開発	Link
Oak Ridge National Laboratory (ORNL)	基礎検討	化学、材料科学、生物学などの物理科学、応用科学、データ科学	Link

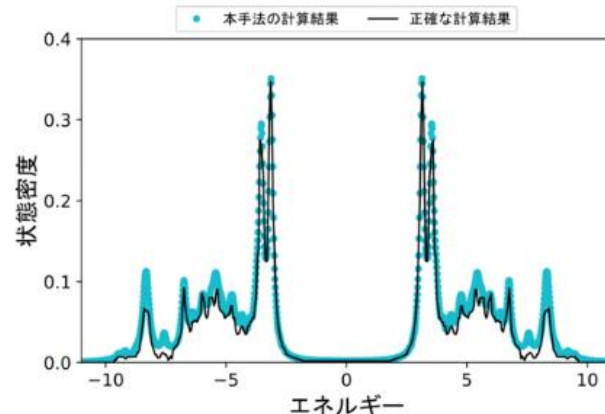
ビジネスユースケース：大手系1

利用者	分野	検討項目	ソース情報
Moody's Analytics Imperial College London	金融	不況予測、量子機械学習	Link
JSR	材料科学	動的平均場近似（dynamical mean-field theory; DMFT）による量子アルゴリズムの開発	Link
	材料科学	量子化学計算・材料開発にどのように活用するかのノウハウ構築	Link
Volkswagen	材料科学	電池材料検討、量子位相推定	Link
BMW	自動車	量子機械学習	Link
Menten AI (with NVIDIA)	創薬	創薬プロセスの加速、分子の最適化、シミュレーション	Link
旭化成	材料科学	量子化学計算、業務効率化、機械学習	Link
凸版印刷	基礎検討	光量子計算の高速化	Link
博報堂DYマーケティングス	最適化	最適輸送問題	Link
富士フイルム 慶応大	材料科学	量子化学	Link
JXTGホールディング	材料科学	材料開発、最適化、機械学習	Link
三菱ケミカル	材料科学	有機材料の光学特性の精密制御を目指し、量子コンピュータを用いた量子化学計算手法の実証研究	Link
パナソニック	材料科学	準粒子バンド計算、量子化学計算、VQE + QSE	Link
富士通	材料科学	グリーン関数を用いた物性計算、LVQC	Link

- QunaSysが2022年に理研・大阪大学と共同で開発した「局所変分量子コンパイル(LVQC)」手法を応用
- 量子コンピュータ上で効率的にグリーン関数を計算する新規アルゴリズムを提案



グリーン関数計算手法の概要



古典コンピュータで厳密計算可能な限界に近いサイズである4×4サイト格子までの模型に対して、本手法を用いてグリーン関数および状態密度を高精度に計算できる

出展 : S. Kanasugi et al., Phys. Rev. Research **5**, 033070 (2023)

<https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.5.033070>

Announcing the Fujitsu \$100,000 Quantum Simulator Challenge

PRESS RELEASE

2024年1月25日
富士通株式会社

大規模な量子シミュレータでアプリケーション開発を競う「Quantum Simulator Challenge」により、先進的な量子技術の研究をグローバルに加速



当社は、39量子ビットの量子コンピュータシミュレータ（以下、量子シミュレータ）を活用して量子アプリケーション開発の成果を競うコンテスト「Quantum Simulator Challenge」を2023年2月から9月まで実施し、このほど受賞4チームを決定するとともに、その受賞式を2024年1月25日にオランダのDe Oude Bibliotheek Academy ^(注1) で開催する「Fujitsu Quantum Day」で行います。

本コンテストには、スタートアップや大学が17の国や地域から全43チーム参加し、その内、書類選考を通過した20チームが量子シミュレータを用いたアプリケーション開発のコンテスト「Quantum Simulator Challenge」に参加し、量子アルゴリズムの性能、開発期間、エラー訂正技術の精度、および、開発費は10万ドルです。

当社は2024年以降も、世界最先端技術の社会実装に向けた研究開発を主導していきます。

コンテストの実施など多くの方々にご利用いただいています

日程

出展 : <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2024/01/25.html>

昨年 2月 21日に、Webサイトおよびシリコンバレー開催イベントにおいて募集を開始
多くの国や地域から 計 43 チームの応募
選出された 20 チームがコンテストに参加

\$100,000 Prize 

First Prize	\$50,000
Second Prize	\$30,000
Third Prize	\$20,000

授賞式

今年1月に、オランダのデルフトで開催した
Fujitsu Quantum Day にて受賞者を発表

● 流体力学の領域への応用

- 流体力学の領域に量子技術を適用し、複雑な流体シミュレーションを実行
- 車両/船舶/航空機の製造や生物医学で活用可能な量子アルゴリズムの開発、および計算性能の測定/評価を実現

● 量子計算の安定性シミュレーション

- 量子誤り訂正（QEC）のベンチマークの重要指標となる量子の安定性シミュレーションを実施
- 量子計算のエラー（誤り）の原因となるノイズのモデルごとに量子の安定性を検証し、これまで観測されたことが無い挙動を発見

● 金融分野への応用

- クレジットカード不正利用の検知に量子機械学習を適用するシミュレーション
- 量子シミュレータをバックエンドとしたアプリケーションを試作、保険会社もその有用性を評価

● 言語モデルへの応用

- 量子コンピューティングとファジー理論を組み合わせる人間が理解出来る言語ルールをベースとしたシステムを構築
- 無線ネットワークや交通信号制御などのスマートシティ事例に適用

- 量子コンピュータシミュレータの応用は、まだ黎明期の段階で、学術論文やプレスリリースなど表出している情報は、まだそれほど多い状況ではない
- 量子コンピュータシミュレータのユースケースとしては、ベースとなっている量子力学と相性が良い、材料科学分野が主流
 - 他には流体力学や金融分野、への応用の検討が始まっている
- 位置づけ
 - 実用ベースの量子コンピュータ実機の出現時を見据えた、量子アプリケーション／アルゴリズムの先行検討としての取り組みが多い。
- 今後の量子コンピュータシミュレータの活用で、有力な量子アルゴリズムや量子アプリケーションが開拓されることを期待

Thank you

