

次世代計算基盤に係る調査研究  
新計算原理調査研究チーム  
成果報告書

新計算原理調査研究チーム

慶應義塾大学 天野英晴, 富士通株式会社 近藤正雄  
理研 RQC 柚木清司  
理研 R-CCS 佐藤三久  
九州大学 谷本輝夫  
東北大学 小松一彦, 日本電気株式会社 百瀬真太郎

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、学校法人慶應義塾が実施した「次世代計算基盤に係る調査研究（新計算原理調査研究）」の成果を取りまとめたものです。

# 目次

第1章	はじめに	7
1.1	本報告書の目的	7
1.2	本報告書の構成と執筆グループ	8
第2章	量子コンピュータの概観	11
2.1	量子アニーラーの概観	11
2.1.1	Ising モデルと QUBO モデル	11
2.1.2	量子アニーリング	12
2.1.3	疑似量子アニーラー	13
2.1.4	量子アニーリングをめぐる混乱	13
2.2	量子ゲート型の概観	14
2.2.1	量子ゲート型の量子コンピュータはなぜこんなに理解しにくいのか？	14
2.2.2	量子ビット (qubit)	15
2.2.3	ブロッホ球と单一量子ゲート操作	16
2.2.4	量子もつれと 2 量子ビットゲート	18
2.2.5	量子回路	19
2.2.6	量子ゲート型実現の各手法	20
2.2.7	NISQ と FTQC	22
2.2.7.1	NISQ	22
2.2.7.2	FTQC	24
2.3	量子コンピュータの利用方法についての調査結果	25
2.3.1	量子コンピュータの利用調査	25
2.3.1.1	Amazon Braket を用いた利用調査	26
2.3.2	量子コンピュータ周辺アーキテクチャ	29
2.3.3	ハイブリッドジョブの実行	31
2.3.4	量子コンピュータとスーパーコンピュータの連携についての検討	33
2.3.4.1	疎結合	34
2.3.4.2	中程度結合	35
2.3.4.3	密結合	36
2.4	まとめと提言	37
2.4.1	調査結果のまとめ	37
2.4.1.1	量子コンピュータと高性能コンピュータの違いはなにか？	37
2.4.1.2	量子コンピュータと高性能コンピュータを同一サイトに置く必要があるか？	37

2.4.1.3	量子コンピュータのカウンターパートとしてどの程度の高性能コンピュータが必要か？	38
2.4.1.4	量子コンピュータはスーパーコンピュータの代わりになるか？	38
2.4.2	将来の量子コンピュータ、スーパーコンピュータの運用についての提言	38
第3章	量子コンピュータのアルゴリズム	43
3.1	NISQ の有望な応用先と量子アルゴリズム	43
3.2	変分量子計算	43
3.2.1	VQE や QAOA の問題点	43
3.2.2	部分空間対角化法における量子コンピュータとスーパーコンピュータ双方の利用例	44
3.3	量子ダイナミクス計算	44
3.3.1	量子ダイナミクス計算に対する NISQ の応用例	45
3.4	有限温度計算	45
3.5	エラー緩和法	46
3.5.1	Depolarizing ノイズの低減	46
3.5.2	Heron プロセッサーにおける dynamical decoupling の効果の薄さ	47
3.6	平均使用量子ビット数の動向	47
第4章	量子コンピュータのシステムソフトウェア	51
4.1	量子 HPC 連携システム	51
4.1.1	HPC から量子コンピュータを利用する API	51
4.1.2	HPC から量子コンピュータを利用する認証	51
4.2	記述言語	52
4.2.1	ゲート型量子コンピュータの記述言語	53
4.2.2	量子コンピュータ側のサーバが受け取る記述言語・中間表現	54
4.3	量子 HPC 連携のためのプログラミングとスケジューリング戦略	55
第5章	量子コンピュータの現実化技術	59
5.1	NISQ コンピュータにおける誤り緩和手法	59
5.2	誤り耐性向上技術について	60
第6章	量子コンピュータシミュレータ	67
6.1	はじめに	67
6.2	量子シミュレータの推定市場規模	68
6.3	量子シミュレータの分類	68
6.4	稼働している量子シミュレータ	69
6.5	量子コンピュータシミュレータのユースケース	71
6.6	まとめ	74
第7章	量子および疑似量子アニーラの調査	81
7.1	今年度の取り組みの概要	81

7.2	アニーリング方式の量子コンピュータの性能評価	81
7.3	制約付き組み合わせ最適化問題における精度向上手法	86
7.4	量子アニーリング・疑似量子アニーリング技術の活用	91
7.4.1	アカデミック分野における量子/疑似量子アニーリングの活用	92
7.4.1.1	HPC 分野におけるアニーリングの活用	92
7.4.1.2	HPC 最適化のためのアニーリングの活用	93
7.4.2	産業分野における量子アニーリング・疑似量子アニーリングの活用	93
7.4.2.1	通信分野	94
7.4.2.2	マルチメディア分野	94
7.4.2.3	物流業界	94
7.4.2.4	製造業界	95
7.4.2.5	金融業界	96
7.4.2.6	資源探査業界	97
7.4.2.7	宇宙・防衛分野	97
7.4.3	まとめ	98



# 第1章 はじめに

## 1.1 本報告書の目的

本報告書は、2022年8月より開始された「次世代計算基盤に係る調査研究」の新計算原理調査研究チームの成果報告書である。この調査研究の目的は、ポスト富岳の開発を念頭におき、そのシステム、ソフトウェア、アプリケーション、運用方針を調査する Feasibility Study である。この中で新計算原理調査研究チームの役割は、最近進展が著しく、注目を浴びている量子コンピューティング技術を調査し、これが将来のスーパーコンピュータとどのように協調し、量子スーパーコンピューティングと言える領域を開拓できるかどうかを調査することである。他のチームと比べてポスト富岳と直接の関係を持たず、今までのフラグシップスーパーコンピュータ開発時の調査研究の中でも異色のチームである。

量子コンピュータはわかりにくい。量子コンピュータとは、「量子」を用いて何等かの計算を行うコンピュータとして定義される。では量子とは何かというと、粒子と波の性質を併せ持った、とても小さな物質やエネルギーの単位（文科省の Web より）として定義される。原子、電子、中性子、陽子、光子など上記の性質を持っていれば、全て量子として扱われる。量子コンピュータはどのように量子を実現するかによって、その特性や問題点が違ってくるため、これがまず分かりにくさの原因になっている。また、量子コンピュータと呼ばれるものの中には、量子アニーラーと量子ゲート型があり、これらは全く違ったコンピュータである。両者をごっちゃにすると混乱がますます激しくなる。さらに、様々な量子コンピュータをその動作原理からアルゴリズムまで理解するためには、物理学、量子力学、光学、電子工学、情報数学、コンピュータの知識が必要になり、普通、一人の手には余る。

2022年と2023年に本チームのリーダーを務めた天野は、コンピュータアーキテクチャを専門とし、量子コンピュータシミュレータを研究開発してはいるものの、量子コンピュータ自体のプロではない。とはいえ、量子コンピュータのプロが書いた解説書は往々にして素人には分からぬいため、プロでないことは悪いことばかりではない。そこで、本報告書は、量子コンピュータの素人の強みを生かして、「次世代計算機版に係る調査研究報告書」の一般的な読者、すなわちコンピュータについてはある程度の知識を持っているが、量子コンピュータの素人を対象に、素人の疑問になるべく答えるように書きたいと思う。

昨今の量子コンピュータブームを反映して、巷には解説本が氾濫し、Web 上には新たな情報が次々と発信されている。テレビ番組でも取り上げられ、中には優れたものもある。本報告書が通常の量子コンピュータ解説書と違うところは、量子コンピュータを特殊な高性能コンピュータとして

扱い、将来従来型のコンピュータ<sup>1)</sup>とどのような関係になるべきか、ということを中心に据えていく点である。記述は量子コンピュータを宣伝するものでもなく、貶めるものでもなく、調査に基づいた客観的なものになるように心掛けた。とはいえ、執筆者の考え方のぞいており、一部は、政策的な提言を含んでいる。記述内でどこが主観的なものはなるべくわかるようにしてある。

## 1.2 本報告書の構成と執筆グループ

まず、第2章は、チームリーダーの天野英晴（慶應大）が主に担当する章で、2024年度のリーダーの渡辺宙志（慶應大）の手が入っている。また、慶應大学の博士課程 Mao Yikai 君、慶應大学の佐藤貴彦准教授の協力を得ている。この章の目的は、量子コンピュータの概観の概観を示すことにある。アニーラーとゲート型の違い、NISQ と FTQC、量子コンピュータの使い方、従来型コンピュータと量子コンピュータのハイブリッド利用の現状、将来における問題点と政策提言を含む。この章は単独で読んで報告書全体が概観できるようになっている。

第3章は、理研 RQC による、量子ゲート型量子コンピュータのアルゴリズムについての章である。現在、量子ゲート型量子コンピュータはノイズなどの影響で現実的な応用ができないが、量子ビット数、忠実度の改善は年々進んでいる。本章は、実際に量子コンピュータを開発し、利用している研究者により、NISQ(Noisy Intermediate Scale Quantum computer) アルゴリズムをどのように構築し、どのようにノイズを低減するかを紹介する。本章は、グループリーダーの柚木清司（理研）および閔和弘（理研）による。

第4章は、理研の R-CCS による、量子ゲート型量子コンピュータと、従来型コンピュータの協調システム、記述言語、システムソフトウェアの調査結果を示す。こちらも実際にスーパーコンピュータと量子コンピュータの実機を接続するプロジェクトのメンバによる調査である。本章はグループリーダーの佐藤三久（理研）、辻美和子（理研）による。

第5章は、九州大学による、量子ゲート型量子コンピュータの現実化についての調査である。最近は FTQC(Fault Tolerant Quantum Computer) と呼ばれる方式の研究が盛んである。これは多数のノイズを含む物理量子ビットから少數の理想的な量子ビットを実現しようとする方式で、使える量子コンピュータの実現に向けてこの方式に対する期待が高まっている。ここでは、FTQC 関連技術を紹介すると共に、新しい FTQC のアーキテクチャを紹介する。本章はグループリーダーの谷本輝夫（九州大）による。

第6章は量子コンピュータシミュレータについて紹介する。この章は、実際に開発を行っている近藤正雄（富士通株式会社）が担当する。

第7章は量子アニーラーに関する章である。これまでの量子ゲート型に対して、量子アニーラーは現在すぐにビジネスでの応用が可能で、日本人の発明が元となっており、特に日本企業での技術

---

1) 量子コンピュータ (Quantum Computer) に対して現在普通に用いているコンピュータを古典コンピュータ (Classical Computer) と呼ぶのが一般的である。しかし、スーパーコンピュータの研究者の中では古い、という字が使われている古典という表現を嫌う人も居るため、本報告書では Classical Computer のことを従来型コンピュータと呼ぶことにする。クラシック音楽 (Classical Music) 同様、英語の Classical には古臭いというよりもリスペクトの雰囲気がある。クラシックコンピュータと呼ばうかとも考えたが、長いのでやめておく

開発が進んでいる。一方で、現状では量子現象を利用しているか定かでなく、利用対象はイジングモデルか QUBO モデルに限定され、実際に多く利用されているのは従来型コンピュータの上のソフトウェアである。この方式については量子コンピュータと見なさないとする考えがあるが、本調査研究では重要な計算方式として捉え、東北大と NEC のグループに調査を担当してもらった。本章は小松一彦（東北大）、百瀬信太郎（日本電気株式会社）による。

本調査は、異色である点が注目され、以下のワークショップ、シンポジウムでその内容が発表された。これらは、代表者のみの発表であったため、2024 年の 5 月 29 日に、それぞれのグループの調査内容をじっくり聞いていただく報告会を実施する。

- HPCI シンポジウム 2022.10.27
- PCCC22（第 22 回 PC クラスタシンポジウム）2022.12.6
- HPCI 意見交換会 2023.1.15
- Moonshot G6 永山プロジェクト Kick Off シンポジウム 2023.1.23
- 次世代計算基盤に係る調査研究事業ワークショップ 2023.2.22
- Supercomputing Now! 2023.3.26
- HPCI 調査検討 WG 2023.7.25
- 川崎市経営者向きセミナー 2023.9.1
- Qstar ワーキンググループ講演 2023.9.12
- アクセラレータワークショップ 2023.9.28
- 次世代計算基盤に係る調査研究事業ワークショップ 2023.12.19
- HPCIAAsia Keynote Speech 2024.1.26
- 理研 NEDO プロジェクト Kick Off シンポジウム 2024.3.25
- 次世代計算基盤に係る調査研究 新計算原理調査研究チーム報告会 2024.5.29



# 第2章 量子コンピュータの概観

## 2.1 量子アニーラーの概観

### 2.1.1 Ising モデルと QUBO モデル

アニーラーあるいはイジングマシンとは、Ising モデルまたは QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) モデルで表される統計的あるいは数理的なモデルを最適化する方法を指す。Ising モデルとは、図 2.1 に示すようにスピンと呼ばれる磁気を帶びた粒子から構成される。電子などの電荷を帶びた粒子が自転すると、磁気を生じる。回転の方向により磁気の方向は上か下に決まる。

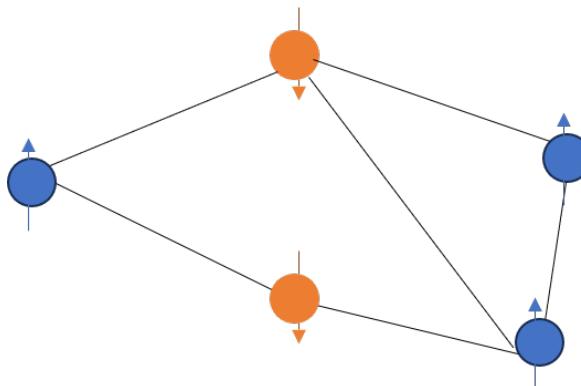


図 2.1 Ising モデル

これをスピン  $s_i$  と呼び、 $s_i = +1$  か-1 で方向を表す。図 2.1 では矢印でこの方向を表す。隣接した粒子同士は磁場が互いに影響し、安定した状態に達するまで、矢印の方向が反転する。この関係を無向グラフ  $G = (V, E)$  ( $V$  は頂点、 $E$  はエッジ) で表現した系を Ising モデルと呼ぶ。この系が最も安定した状態になるためには、全体のエネルギー量に相当する  $H$  (ハミルトニアンと呼ぶ) の最小値を求めるに相当する。式で書くと式 2.1.1 のようになる。ここで、 $J_{i,j}$  は  $i$  と  $j$  の相互関係の強さを表し、 $h_i$  は外部磁界を表す。

$$H(S) = \sum_{(i,j) \in E} J_{i,j} s_i s_j + \sum_{i \in V} h_i s_i$$

このモデルを数理的に解いて真の最適解を求める問題は NP 完全で、膨大な計算量が必要になる。そこで、近似的な解を求める方法が使われ、この中で、良く使われるのが焼きなまし法 Simulated Annealing (SA : 疑似アニーリング) である。焼きなまし法とは、金属を熱してゆっくり冷やすことにより、金属原子がエネルギーの小さい方に移動し、格子欠陥が少なくなる現象を呼ぶ。この方法は、最初温度が高い時には、乱雑な方向に変化し、後にエネルギーの低い方向に変化することで局所解に陥ることを避けることができる。しかし、最後の方は温度を下げて系を落ち着かせるが、このために計算時間が長くなる。図 2.1 のモデルでは、温度の代わりに外部磁界  $h_i$  を用いる。

この Ising モデルと等価なモデルが QUBO モデルで、Ising モデルがスピンの方向を +1 と -1 で表すのに対して QUBO モデルは 1 と 0 で表すため、コンピュータのプログラムでは扱い易く、実際の問題を変換する場合も楽である。ちなみに本書で  $Q$  の文字は大抵の場合 Quantum を表すが、このモデルの  $Q$  は Quadratic (2 次) の  $Q$  である。

これらのモデルは、現実的な最適化問題、例えば経路探索問題などを表現するモデルとして古くから用いられており、SA と共に従来から用いられてきた。

### 2.1.2 量子アニーリング

量子アニーリングは、1998 年に東工大の西森秀穎教授と門脇正史氏によって提案された方法で、量子を用いた一種の焼きなまし法である。この手法は、金属原子やスピンの代わりに量子を用い、温度の代わりに磁場を用いてエネルギー最小状態を見つける方法であり、原理的には量子ゆらぎ、量子重ね合わせ（第 2 章後半で解説）を用い、トンネル効果により局所解から脱出してエネルギー最小状態に到達するので、まぎれもなく量子力学的現象を利用した量子コンピュータである。ただし、この量子アニーリングは理論的な提案であり、実際のハードウェア構成などは示されていなかった。

1999 年に創立された D-Wave 社はこの原理に基づく<sup>1)</sup> アニーラーのハードウェアを作成して商品化し、世界に衝撃を与えた。D-Wave は、実際にイジングモデルによる最適化を行うことができ、量子力学的現象を利用することで従来型のコンピュータを用いた最適化の速度をはるかに上回るとされた。しかし、その動作手法の詳細は公開されておらず、本当に量子力学的な現象を利用しているのかは定かでなく、議論の応酬があった。本報告書の第 7 章では、量子力学的な現象を利用しているとしても、それが実際の問題で効果に表れるに至っていないと考えられる。また、D-Wave 社のアニーラーは、解くことのできる問題の規模、ハードウェアの構造に依存するグラフに対象問題を埋め込む必要性、結果の解の精度、ノイズの存在など、利用上の問題が大きく、最近は D-Wave 社も疑似量子アニーラーと組み合わせたハイブリッド構造のアニーラーを提供している。

---

1) もう一つ量子断熱最適化の原理に基づくと言われている

### 2.1.3 疑似量子アニーラー

量子アニーラーの動作原理に着想を得て、従来型のコンピュータ上のソフトウェアで最適化を行う方法を量子インスパイアドあるいは疑似量子アニーラーと呼ぶ。量子インスパイアドと呼ぶのが正しいが、長いので、本報告書では疑似量子アニーラーと呼ぶ<sup>2)</sup>ことにする。疑似量子アニーラーは、従来型コンピュータのアプリケーションであり、量子コンピュータではない。かつて日本の各企業は、専用マシンを用いて疑似量子アニーラーを実現し、一種の量子コンピュータとして提供了。専用 ASIC を用いた富士通のデジタルアニーラー、FPGA ボードを用いた日立の CMOS アニーラー、ベクトル型アクセラレータを用いた NEC のベクトルアニーラーなどである。現在、ベクトル型アクセラレータを使い続けている NEC を除き、多くの企業は、GPU (Graphic Processing Unit) を利用している。これは、最近の AI の需要を受け、GPU の性能向上が激しいためである。しかし、各企業の名称はそのまま使われており、例えばデジタルアニーラーといえば富士通の製品を指し、他のアニーラーに対して用いることはできない。各社のアルゴリズムの詳細は不明だが、これらのアニーラーは、Simulated Annealing (SA) の一手法であり、量子アニーラーの原理に基づき改良を加えたものと考えられる。

### 2.1.4 量子アニーリングをめぐる混乱

量子アニーリングに関しては以下の点が正しく理解されず、混乱してきた。

- 量子アニーラーは、量子ゲート型の量子コンピュータとは全く違ったコンピュータであり、Ising モデルの最適化のための専用マシンである。原理通り動作すれば、量子力学的現象を利用し、厳密解に近い近似解を高速に探索することが可能であるが、常に厳密解を求める手法ではない。
- D-Wave 社のアニーラーは、量子アニーラーの原理に基づいているが、量子力学的現象を現実的な問題で有効に利用するに至っていない。また、利用上の制約が大きい。
- 疑似量子アニーラーは、従来型のコンピュータのアプリケーションであり、従来からある SA を量子アニーラーの原理を用いて改良したものである。しかし、実際に大規模な問題にも有効である。

量子アニーラーは、Ising モデルに特化した専用マシンであり、今の所他の問題に利用することはできない。量子アニーラーを改良しても、量子ゲート型のコンピュータができるわけではない。

疑似量子アニーラーは、現在クラウドで利用できる最適化アルゴリズムの中でも優れた点を持っている。各社が競争してこの開発に取り組んでいるのは日本の特異現象で、世界をリードしていると言える。

アニーラーを利用する上で、最も大変なのは、自分の対象とする問題をどのように Ising モデルまたは QUBO モデルに変換するか、という段階で、最近、AI を用いた研究が進んでいる。将

---

2) 疑似という言葉はイメージが良くないが、Simulated Annealing も擬似アニーリングと訳されることが多い

来、アニーラーを中心とした最適化革命により、配送問題や割り当て問題など世の中の様々なスケジュール問題を簡単に解くことができるようになり社会的コストが大幅に削減できる可能性がある。この点で、AIを中心とした従来型コンピュータのアルゴリズムとアニーラーの組み合わせは極めて重要である。一方、D-Wave のアニーラーは、現状ではスーパコンピュータの1ノードで動作する GPU による疑似アニーラーよりも性能が劣っているため、D-Wave のアニーラーのハードウェアとスーパコンピュータを物理的に接続してシステムを構築しても現実的に意味のあるものにはなるとは考えにくい。

では、D-Wave のアニーラー、あるいはこれを改良したアニーラーで本当に量子アニーラーの原理に基づいて問題が解けるようになれば、画期的なマシンができるのか？というと、多分答えは Yes である。しかし、それには量子ゲート型の量子コンピュータの実現と同様、解決しなければならない問題が多い。量子アニーラーについてご興味をお持ちの方は第 7 章をお読みいただきたい。また、この節の見解は章の筆者（天野）のものであり、第 7 章の筆者らとは異なることをあらかじめお断りしたい。

## 2.2 量子ゲート型の概観

### 2.2.1 量子ゲート型の量子コンピュータはなぜこんなに理解しにくいのか？

情報系技術者にとって、量子アニーラーは、量子的な部分が理解できなくてもよせんは Ising モデルだし、Simulated Annealing から考えて理解は容易、とはいかないまでも可能である。しかし、量子ゲート型は、とにかく最初から最後まで分からぬし、ごくごく簡単なものを除いては自分でプログラムできそうな気がしない。巷ではしおりの画期的な研究成果が報告されるのにも関わらず、実際にはちっとも役に立っている気がしない。これは以下の原因によるものと思われる。

- 理解の最初の量子ビットの定義から量子力学的な記号が使われ、ヒルベルト空間とかユニタリ行列やらケット記法やら普段使わない用語が山のよう出てくる。量子重ね合わせ、量子もつれの概念も難しい。
- 抽象化したレベルの量子回路のプログラムは、従来型の手続き型プログラムと違って、情報の複製はできない、観測すれば壊れるなど制約が多すぎる。オラクルだのアンシラだの訳の分からぬ用語がでてきて、新しいプログラムを一つ書くにはそれぞれ天才的発想が必要が気がする。
- 最も先行してクラウドでも割と簡単に利用可能な超電導型ですら、動作原理がさっぱりわからない。論文を見ても物理学現象と用語に満ちている。イオントラップ、中性原子、光、半導体、それぞれの量子コンピュータにそれぞれの物理学の概念、現象、用語、装置があってとてもついていけない。

上記はすべて事実であって、情報系技術者にとって量子コンピュータが簡単にわかってしまう方法

は存在しないと思う。巷には「簡単にわかる」と書かれた解説書が山積みされていて、Web 上にも山ほど解説があるが、実は皆それなりに難しいか、表層的な記述にとどまっている。そもそも難しいものを簡単に解説できるわけがない。

しかし、本報告書の目的は、情報系の技術者、研究者および情報系は一通りわかる政策決定者に量子コンピュータの現状を理解してもらうことにあるので、第 2 章の後半は、この点に力を尽くしてある。量子力学、物理学、本物の量子コンピュータ専門家には厳密さを欠く議論についてご容赦されたい。また、本稿は慶應義塾大学理工学部 2 年生の学生実験の解説書に負うところが多い。実験書作成を主導した佐藤貴彦准教授に感謝する。さらに専門的な知識を得るために、量子コンピュータのテキストの中で、優れているものをいくつか挙げるので参考されたい [10][9][8][3][1][1][4]。

## 2.2.2 量子ビット (qubit)

量子ゲート型は、小さな粒である量子が起こす量子力学的現象を利用して計算を行う方法である。通常のディジタル回路の 1 ビットと区別して、量子 1 個の表す状態を量子 bit(qubit) と呼ぶ。qubit が、量子力学的現象を利用して計算を行える状態のことをコヒーレント状態とよぶ。この状態を保つことのできる時間はノイズにより短時間に制約され、この時間のことをコヒーレント時間と呼ぶ。qubit は、コヒーレント状態になっている場合、単純な 1 と 0 ではなく、1 と 0 の重ね合わせの状態 (superposition) を取ることができる。この重ね合わせの状態は、測定を行うと 1 か 0 のどちらかになってしまうが、この確率がどうなるかは現在の状態  $|\psi\rangle$  によって決まる。量子コンピュータに関するテキストを読む場合、必ず出てくるのがこのケット記法で、 $|\psi\rangle$  は、ケット プサイと読む。 $|0\rangle$  は「ケット 0」、 $|1\rangle$  は「ケット 1」と読み、互いに直交する 2 次元ベクトルで、以下に相当する。

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

ケット記法は、列ベクトルに対応するが、行ベクトルに対応する記法がブラ  $\langle \cdot |$  である。ブラとケットは、量子力学的な現象を表すため、 Hilbert 空間におけるベクトルとして定義されるが、量子力学に慣れない我々には、 Hilbert 空間といわれても理解できないし、 Wikipedia の定義を見ただけで頭が痛くなる。そこで本報告書ではこれらの記法を量子力学的な意味を深く理解しないで行列、ベクトルの省略記法使う。行列、ベクトルをそのままの記法で書くと、大変だし無駄が大きいからである。

このケット記号を使うと、量子状態  $|\psi\rangle$  は、以下のように書ける。

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (2.2)$$

ここで、 $\alpha$ 、 $\beta$  は重ね合わせの 0 成分、1 成分を表す複素数で確率振幅と呼び、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  を満たす。このように、1qubit の状態を正確に表現するには、 $|\psi\rangle$  の実数部と虚数部をそれぞれを浮動小数で表現する必要があり、倍精度を使えば 16B の情報量が必要である。N-qubit の状態を表す

には  $2^N$  の確率振幅の実数部、虚数部を持つ必要があることから、 $2^{N+4}$  の情報を保持する必要がある。これは、N が 50 だと 16PiB になり、スーパー・コンピュータ富岳の全メモリ量 4.85PiB を越えてしまう。後に詳しく紹介するが、現在最大規模の量子コンピュータは既に 100qubit を越える規模に達しており、従来型のコンピュータが手の出せない領域の潜在的情報処理能力を持っているといえる。この潜在的な能力を生かすことにより、従来の計算機をはるかに凌駕する量子超越性<sup>3)</sup>を実現するのが量子コンピュータの目標である。

### 2.2.3 ブロッホ球と単一量子ゲート操作

量子に一定の操作を行うことで、この状態を変化させることができる。これを量子ゲートと呼ぶ。まず量子ゲートの作用を説明するのに直感的に可視化できるブロッホ球表示を紹介する。

量子ビットの量子状態  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  には  $\alpha$  と  $\beta$  は、2乗和が 1 になるという制約があるので、量子状態は、極座標表示に変換すると球の表面に載るはずである。すなわち、以下の式で量子状態を書くと、 $(\theta, \varphi)$  を極座標表示と解釈して量子状態をプロットできる：

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle, (0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi). \quad (2.3)$$

図 2.2 がブロッホ球表示である。ブロッホ球面は半径が 1 の球で、球面上の 1 点と量子ビットの量子状態が 1 対 1 で対応している。 $\varphi$  のことを位相という。

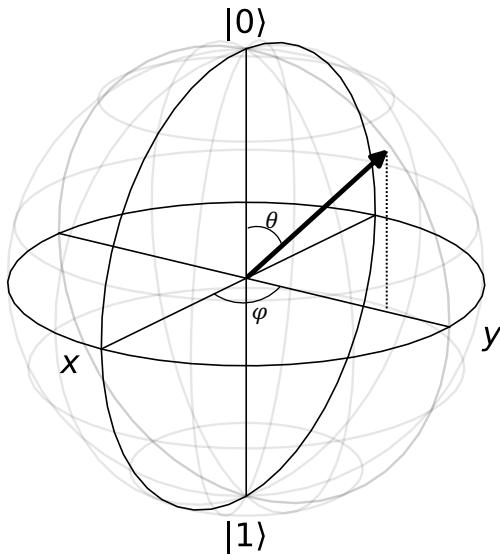


図 2.2 ブロッホ球表示。1 量子ビットは球体上の任意の地点に対応する無数の状態をとることが出来る。

3) Quantum Supremacy は、従来型が何をやっても絶対かなわない場合に使うため、最近はやや意味を弱めた Quantum Advantage が主に使われる。また、Supremacy は白人至上主義を想起させるので使わない方が良いという意見があるので、わざわざ難しい単語を使わない Quantum Advantage が平和である。

ブロッホ球の北極に対応する地点が  $|0\rangle$  であり、南極が  $|1\rangle$  である。量子コンピュータでは、量子状態を観測すると重ね合わせが壊れて<sup>4)</sup>、 $|0\rangle$  か  $|1\rangle$  になるが、これは矢印が元の地点に応じて北極、南極に決まった確率で動くイメージでとらえることができる。

量子ビットに量子ゲートを作用させることは、数式上ではベクトルに行列を作用させることに相当する。たとえば、 $H$  ゲートはアダマール (Hadamard) ゲートと呼ばれ、 $|0\rangle$  または  $|1\rangle$  に作用させることで  $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  の 50 %ずつの重ね合わせ状態を作る。

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

これはブロッホ球のイメージだと、図 2.3 のように北極、あるいは南極を指していたベクトルが赤道上に移動し、観測時にどちらの状態にもなることに相当する。

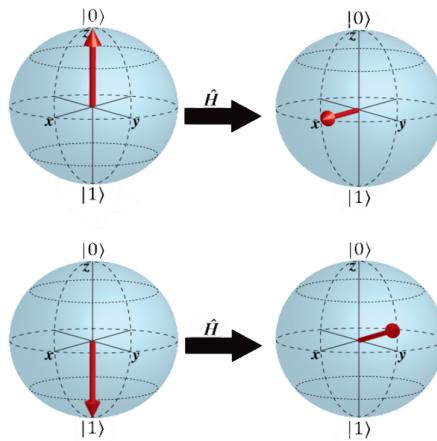


図 2.3 ブロッホ球表示によるアダマールゲート

次に  $X$ 、 $Z$  ゲートは  $2 \times 2$  行列で以下のように表されるが、ブロッホ球上のイメージでは、 $X$  ゲートでは  $\alpha$  と  $\beta$  を入れ替えた位置への移動、すなわち  $X$  軸方向の半回転を意味し、 $Z$  ゲートは  $Z$  軸回りの半回転すなわち位相を反転した位置に移動する。

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

ブロッホ球は、1 量子ゲートを適用すると矢印が動き、観測すると南極か北極の位置に動くイメージが素人でも理解しやすく助かる。コヒーレント状態が壊れていく状態は、ベクトルが表面を指すことができなくなつて短くなつていく様子として考えられる。しかし、残念なことに  $\alpha$ 、 $\beta$  と  $\theta$ 、 $\varphi$  の変換式が複雑で、2 量子ゲートだと直感的に可視化できない欠点があるので、これが分かっても量子ゲートと量子状態が全てうまく理解できるわけではない。

---

4) 大阪大学の藤井先生は、これを鶴の恩返しの「見るなの座敷」に例えておられる。

## 2.2.4 量子もつれと 2 量子ビットゲート

単一量子ゲートだけでは、演算を行うことができない。演算を行うには複数の量子ビットの相互作用を行う複数量子ゲートが必要である。まず、2 量子ビットの状態はどのように考えればよいのだろうか？量子ビットが 2 つあり、1 量子ビット目が状態  $|0\rangle$ 、2 量子ビット目が状態  $|1\rangle$  の場合は次のように書ける：

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle \quad (2.6)$$

ここで、 $\otimes$  を直積といい、ベクトル上は次の操作に対応する：

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ 0 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \circ. \quad (2.7)$$

この場合、 $|01\rangle$  は上から 2 つ目に 1 がある列ベクトルになるが、同様に  $|00\rangle$  は一番上、 $|10\rangle$  は上から 3 つ目、 $|11\rangle$  は一番下に 1 がある。ビット数が増えてもこの表記は同様である。

さて、この状態に 2 量子ゲートの代表例である CNOT ゲート (Controlled-NOT ゲート、制御 NOT ゲート) を適用してみよう。CNOT ゲートは 2 量子ビットに作用し、片方の量子ビット (制御量子ビット) の状態が  $|1\rangle$  の場合だけもう片方の量子ビット (標的量子ビット) に  $X$  ゲートを作用させる。すなわち X 軸方向に反転させる。制御量子ビットの状態が  $|0\rangle$  の時は何もしない。CNOT ゲートは 2 量子ビットに作用するゲートなので、 $2^2 \times 2^2$  行列で表される：

$$CNOT = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \circ. \quad (2.8)$$

ここで、量子状態  $|10\rangle$  を準備し、 $|1\rangle$  の量子ビットを制御量子ビットとした CNOT ゲートを作用させると標的量子ビットの状態は  $|0\rangle$  から  $|1\rangle$  に反転する。両方の量子ビットを合わせて書くと、 $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$  と変化したことになる。

表 2.1 CNOT ゲートの真理値表。制御量子ビット (左) が  $|1\rangle$  のときのみ標的量子ビット (右) に  $X$  ゲートが作用する。

作用前の状態	作用後の状態
$ 00\rangle$	$ 00\rangle$
$ 01\rangle$	$ 01\rangle$
$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
$ 11\rangle$	$ 10\rangle$

この CNOT ゲートを実現するためには、量子もつれ（エンタングルメント）と呼ぶ現象を利用する。正確には、CNOT ゲートは常に量子もつれを引き起こすわけではないが、CNOT ゲートを使えば簡単に量子もつれを実現できることから CNOT ゲートが存在する=量子もつれを起こせる、と考えてよい。量子もつれは、量子もつれ状態となった 2 量子ビットを準備して一方の量子ビットを測定すると、他方の量子ビットの量子状態は瞬時に測定の影響を受けるという不思議な現象である。この現象についてはAINシュタインですら理解できないとしたもので、我々情報系技術者が理解を放棄しても非難されないと思う。この現象を認めると位置的に離れた 2 か所にあるもつれ状態にある量子の片方を測定すると、瞬時にもう片方が確定するので、情報が光速を超えて伝わるのではないかと思ってしまう。しかし、実際は片方の測定結果を普通の通信で知らせないと、もう片方の量子状態を復元できないため、光速を超えて情報を伝搬することはできとはいえない。量子もつれを使って量子状態を転送する手法を量子テレポーテーションと呼び、量子通信の基本である。ちなみに、量子状態はコピーすることができない（量子複製不可能定理）ので、量子情報の移動にはこの方法が常に用いられる。量子もつれの中でも 2 量子ゲートについて最大限にもつれている状態をベル状態と呼ぶ。このベル状態になった 2 つの量子ゲートを制御ビットと標的ビットにとることで CNOT ゲートが実現可能である。量子ゲートは他にもさまざまなものがあるが、例えば、H ゲート、T ゲート、CNOT ゲートの 3 種類のゲートで万能ゲートセットを実現可能である。<sup>5)</sup>

## 2.2.5 量子回路

今までに紹介した量子ゲートを用いると様々な量子アルゴリズムを設計することができる。このための最も基本的な表現法は量子回路である。図 2.4 に先に触れた量子テレポーテーションの量子回路を示す。（本図は慶應義塾大学理工学部の学生実験に使っているので、矢上キャンパスから K2 キャンパスまでの通信を考えている）

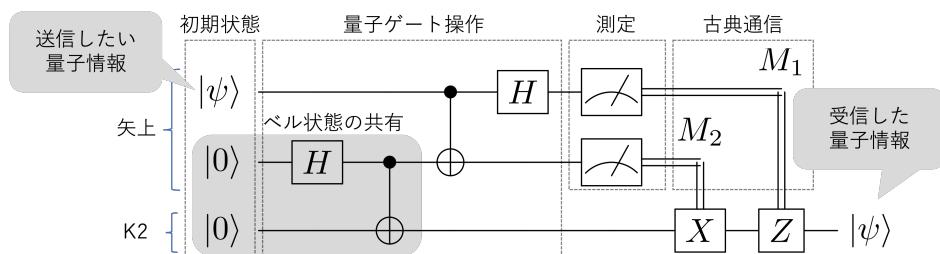


図 2.4 量子テレポーテーションの回路図。網掛け部がベル状態の事前共有に相当し、二重線は古典通信を意味する。

全体で横線が 3 本あるが、それぞれが 1qubit に相当している。H、X、Z はそれぞれ H ゲート、X ゲート、Z ゲートである。●と⊕がワイヤー間で結ばれている箇所が CNOT ゲートで、●が制御ビット、⊕が標的ビットである。一番上の qubit の状態  $|\varphi\rangle$  が一番右下に移動していることで量子トランスポーテーションの目的を達成している。各ゲート操作は左から右へと順序通りに逐

5) 簡単にゲート間の変換が可能な従来型と異なり、量子ゲートの相互変換は複雑で、場合によっては多数のゲートを要するので従来型と同じに考えない方がいい

次的に行われるが、場合によっては並列実行も可能である。注意したいのは、この量子回路は、必ずしも実際の量子コンピュータでそのままの形で実行されるわけではなく、論理的にアルゴリズムを表現する方法と考えられる。この量子アルゴリズム自体は、従来型のコンピュータのように、一定のレジスタ、データ構造を考えて、手続き的に組み上げていくプログラミングとは全く異なる方法を使う。これについては第3章に示すが、オラクル、逆計算、振幅増幅、量子フーリエ変換などの一種の定石があって、これを組み合わせて構築していく。

量子回路は、IBM Quantum Platform に用意されている Composer など直接 GUI ツールで記述する方法もあるが、多くの場合、Qiskit、Amazon Braket、Q#などの言語で記述される。これらの言語は Python ベースで様々なライブラリが利用可能である。実際に量子コンピュータを利用する記述は、API を呼び出す形になっていて、回路の記述と共に実行時制御も書くことができる。また、従来型コンピュータとのハイブリッド実行も記述できる。より低レベルな言語として QASM が用意されており、ほとんどすべてのクラウドで利用可能である。量子アルゴリズムの記述方法については第4章に詳細を示す。

## 2.2.6 量子ゲート型実現の各手法

量子ゲート型は、量子的性質を実現し、これを操作し、計測できなければならない。このためには様々な方式が提案されており、代表的なものを図2.5にまとめる。

	超電導	イオントラップ	中性原子	光量子	半導体ドット
方式	希釈冷凍装置内の基板上の量子をマイクロ波で制御	電子を取り去ったイオンの形で量子を電磁波により捕捉し、操作する	中性原子をレーザによる光ピンセットで真空中にトラップし、格子状に整列	光の振幅の量子状態を利用し、重ね合わせや干渉を量子操作として利用	半導体チップ上のアレイに量子を整列させて操作
特徴	最も開発が進んでいる。クラウドで利用可能	忠実度が高い。全結合。クラウドで利用可能	大規模化が容易。最近クラウドで使える	極低温が不要。光通信と相性が良い	大規模化が容易。極低温が不要
qubit数	433 (2022)	43 (Quantinuum)	289 (QuEra)	これから	これから
代表的な開発元	IBM, Google, rigetti, OQC, 理研, NECなど	IonQ, Quantinuum, OISTなど	QuEra, ColdQuanta, Pas cal分子研など	Xanadu, PsiQuantum, 東大、NTT、理研など	Intel, 日立, 理研など
課題	冷凍装置内の量子数には限度がある	大規模化が難しい	ノイズに弱い	光源やパルスなど光技術の改良	忠実度の改善

図2.5 量子ゲート型の各方式

温度が高いと量子は振動してしまって制御できないので、通常、絶対零度に近い極低温 (mK) まで冷やす必要がある。4K という温度は通常の間隔では非常に低い温度だが、量子コンピュータで

は、高い温度と見なされる。量子コンピュータが図 2.6 のように筒状の冷却装置中に格納されているのはこのためである。様々なタイプの量子コンピュータは、以下の基準でその特徴がわかる。

- qubit 数
- qubit 間の結合；量子もつれを起こす qubit に制約があるかどうか？
- 忠実度 (Fidelity): 実際の量子コンピュータは、ノイズや操作の精度の問題で、量子状態が期待するものと異なってしまうが、どの程度所定の量子状態に近いか？
- コヒーレンス時間：量子操作が行うことのできる時間
- 量子ゲートの実行時間

ちなみにどの方法でも、量子現象を起こすハードウェアは物理学的用語に満ちていて、理解することが難しい。

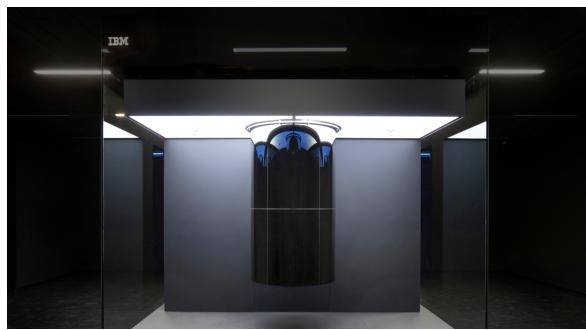


図 2.6 冷却容器に入った IBMQ(<https://www.ibm.com/jp-jp/topics/quantum-computing>)

- 超電導型：超伝導材料を用いた電子基板上で、ジョセフソン接合というトンネル接合素子を用いて量子ビットを実現する。マイクロ波により制御する。IBM Q は 2022 年に 433qubit の Osprey を発表したが、その後、1 筐体の qubit 数增加をひとまず中断している。2024 年現在、64qubit を持つ理研の叡、富士通、大阪大に 3 台の国産マシンが稼働している。また新川崎創造の森には 127qubit の IBM Q、東大には 4qubit の実験機が装備されている。他にも Oxford Quantum Computing(OQC) の Toshiko が有明に装備中である。IBM Q をはじめとして、Rigetti 社、OQC 社がクラウドで利用可能であり、最も台数が多く、利用が進んでいる方式。マイクロ波による制御は高速（マイクロ秒単位）だが、コヒーレント時間も短い。量子もつれを起こすことのできる量子は、基板の構造に依存して決まるため、場合によっては制約が大きい。
- イオントラップ型：イオンの状態にした原子を環境から隔離して真空中に捕捉し、レーザーにより制御する。高い忠実度と長いコヒーレンス時間、完全結合の利点を持つが、論理ゲートの実行にも時間がかかる。qubit 数が現在のところ 32 が最大で超電導型より少なく、拡張も難しい。現在 Quantinuum 社、IonQ 社のマシンがクラウド上で利用可能。
- 中性原子型：冷却中性原子をドット状に並べてレーザーにより制御する方法。2021 年に QuEra 社が 256qubit を達成して話題になり、2023 年 12 月には、MIT などと組んで、誤り訂正

正論理ビットを実現して注目された。高い忠実度、長いコヒーレンス時間だが、操作にも時間が掛かる。

- 光量子、光連続量：光子を用いて量子操作を実現する。他の方法に比べて極低温は必要としない。2022年6月に Xanadu 社がこの方式で特殊な数列を発生する問題で量子超越を実現したと発表して話題になった。一時的に AWS クラウドで利用可能になったが、現在は使うことができない。ムーンショット G6 古澤プロジェクトは、1 個の超高速の物理ビットから数十個の論理ビットを生成する方式。この方式は開発している各方式で、それぞれで全く量子の実現方式、制御方式が異なっていて一般化ができない。
- シリコン量子コンピュータ：半導体チップ上に 2 次元の量子ドットアレイを作り、そこに量子をはめこむ方法。Intel が開発を行っており、極低温でなくても動作する点、半導体チップの利用が可能な点に特徴がある。

## 2.2.7 NISQ と FTQC

### 2.2.7.1 NISQ

NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum computer) とは、ノイズを含んだ中規模な量子コンピュータを指す。すなわち現在クラウドで利用可能なコンピュータは全て NISQ である。このような現状の量子コンピュータ上で、エラーを抑え込む様々な手法を用い、従来型コンピュータとのハイブリッドな利用、量子アルゴリズム上の工夫をすることで、従来型のコンピュータを上回る性能を実現しようとするのが NISQ のアプローチである。NISQ は誤りを含む結果を従来型コンピュータが解析して正しい解の方向にパラメータをチューニングする変分法:VQE (Variational Quantum Eigensolver) や、これを用いた最適化アルゴリズム QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) が広く研究されて一定の成果を収めている。一方で、良い解を得るために、量子コンピュータと従来型コンピュータのやり取りの回数が指数関数的に増えていく問題点があり、この方法で、量子超越を実現することは難しいとも言われている。

NISQ は、量子コンピュータ技術が着実に発展し、主として超電導型量子コンピュータの qubit 数、忠実度が改善されてきた現状に支えられている。

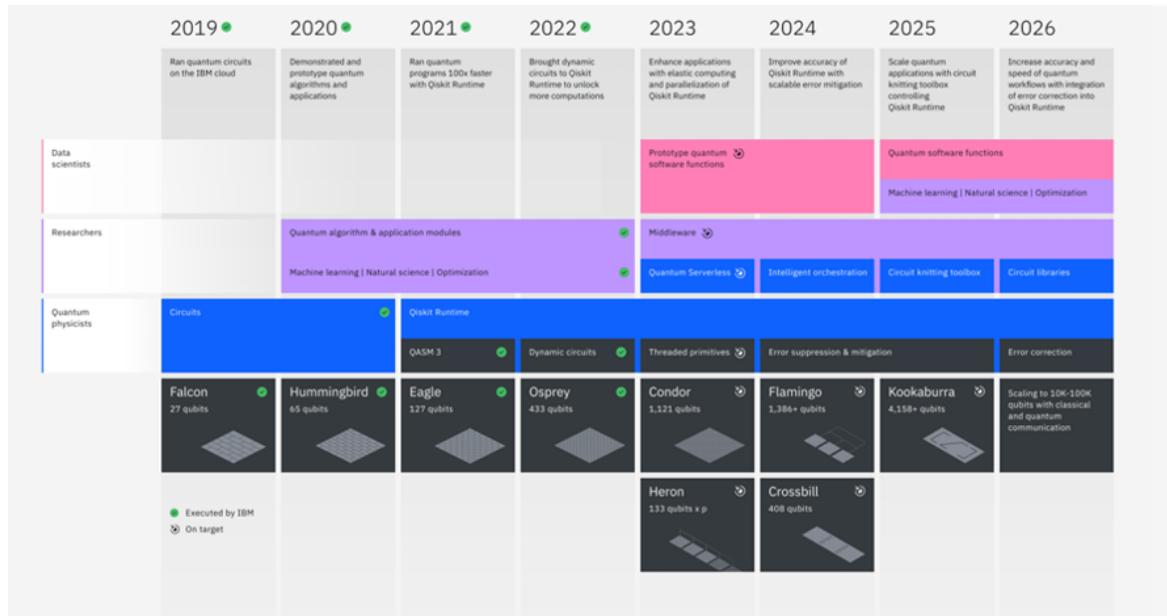


図 2.7 以前の IBM のロードマップ (<https://www.ibm.com/jp-jp/topics/quantum-computing>)

IBM の 2023 年までのロードマップでは、図 2.7 の示すように qubit 数が年間倍以上のペースで増大してきたことを示している。しかし、2022 年 11 月に発表された 433qubit の Osprey は IBM Quantum Platform のクラウド上で安定的に利用されず、2024 年 3 月に利用可能なのは 127qubit の Eagle が最大である。最近、IBM はロードマップを改定し、従来のように qubit 数を多くする路線を守る一方で、図 2.8 に示すように、複数の量子コンピュータユニット (QPU) による分散実行、エラー緩和技術により、実質的な qubit 数の増大を達成している。

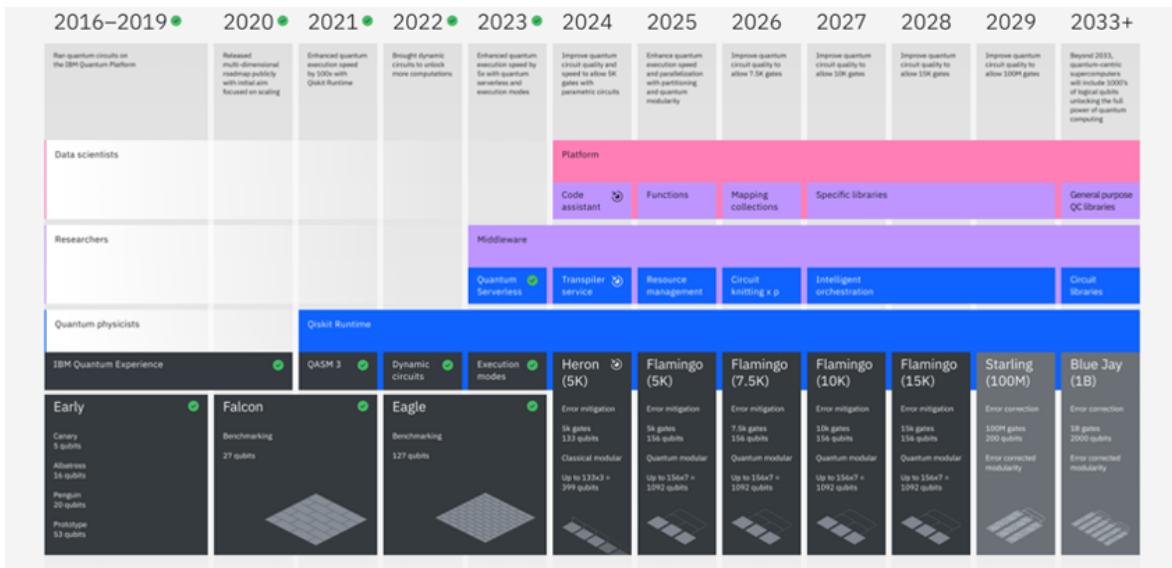


図 2.8 改定された IBM のロードマップ (<https://www.ibm.com/jp-ja/topics/quantum-computing>)

これは、超電導型のハードウェアの技術向上に頼るだけでなく、NISQ 技術と複数 QPU の分散実行に重きを置く路線変更である。これは、単純に qubit 数のみ増やしても、qubit 間の結合が制限されると、多くの qubit があっても使いこなすことが難しいためであろう。この点を考えると、NISQ 技術はますます重要性を増したともいえる。NISQ のアルゴリズムは従来型のコンピュータとのハイブリッド実行が多く、本報告書での重要度は高い。これに関しては第 3 章、第 5 章に調査結果を示す。

### 2.2.7.2 FTQC

FTQC (Fault Tolerant Quantum Computer) は、多数のエラーを含んだ物理量子ビットから誤り訂正を行うことで、少数のエラーを含まない論理量子ビットを作り、理論通りの計算を行うことを狙ったアプローチである。エラーを含んだ情報に誤り訂正を施し、エラーのない情報を取り出すのは、情報系の技術者にとっては手慣れた方法であり、容易に実現できそうな気がする。しかし、量子コンピュータにおいては以下の問題がある。

- ・従来型のエラー訂正は、情報に冗長性を持たせ、全体の測定結果によりエラーの発生位置を特定して修正する。しかし量子情報は、測定した瞬間に失われてしまうため、従来のエラー訂正符号をそのまま利用することはできない。
- ・量子ビットはコピーすることができない。誤り訂正を行うためにオリジナルの量子ビットをとっておくこともできない。
- ・従来型コンピュータの部品における故障や、ネットワークにおける伝搬のエラーに比べて、量子コンピュータのエラーはけた違いに大きい。FTQC が本格的に研究されはじめたのは、エ

ラーの値が一定の閾値を下回ったことで、ようやく効率的に演算を行える可能性が出てきたためである。

現在の FTQC で良く用いられるのは、誤り訂正用の補助量子ビットと、演算を行う量子ビットを格子状に並べて、表面誤りエラー訂正符号を用いて、符号化したまま時間的にコード変換することで計算する方法（格子手術）である。このためには膨大な量子ビットが必要であるが、これだけでは、クリフォードゲート ( $H$ 、 $Z$ 、 $X$ 、 $Y$ 、CNOT などのブロックホ球の各軸の頂点のみの移動ができるゲート）の処理しかできない。クリフォードゲートだけの量子回路は従来型コンピュータで比較的容易にシミュレーションできることが明らかになっている。非クリフォードゲート（T ゲートなど）の処理を行うためにはさらに魔法状態蒸留が必要で、全体として 1000 倍から 10000 倍の量子ゲートが必要であると言われている。このため、FTQC は遠い将来の話と考えられていたが、NISQ がある意味で壁にぶつかりつつある現状と、量子ビット数を増やすことのできる実装手法の開発が進んでいることから、盛んに研究が行われるようになっている。ムーンショットの G6 も、FTQC の実現を目的としている。最近は、クリフォードゲートのみ、エラー訂正済の実行を可能とする early FTQC を目指す路線も提案されている。本報告書は、第 5 章でこの研究動向を調査する。

## 2.3 量子コンピュータの利用方法についての調査結果

本調査研究では、実際に量子コンピュータを使っている利用者からの聞き取り調査と、自分たちで量子コンピュータを使ってみた利用調査を行った。聞き取り調査はほぼ 2022 年度に終了し、報告書に記述されている [2] ので、ここでは要旨のみを示す。

- ・アプリケーションの研究者の多くは、2 – 6 qubit を用いており、多くの qubit を用いているのは、量子コンピュータの制御、コンパイルなどの研究者である。
- ・従来型と量子コンピュータのハイブリッドを行うアプリケーションの研究も、量子コンピュータでの実行結果を自分のパソコンで良く検討したのち、再び量子コンピュータで実行する手法を取っている研究者が多かった。

この調査結果は、昨年度公開されたサーベイ論文 [6] の結果と良く一致している。この論文は、どのように量子コンピュータの実機が利用されたかを 2016 年から 2022 年の 11 月までに書かれた論文を調査することによって特徴づけたものである。これによると、利用 qubit 数の平均は 6 であり、qubit 数が多い研究は量子コンピュータのベンダによるもの、あるいはベンダと強力な共同研究環境を確立したアカデミックの研究室によるものがほとんどである。

### 2.3.1 量子コンピュータの利用調査

2022 年度に引き続き、2023 年度も量子コンピュータの利用調査を行った。現在、量子コンピュータを利用するにはクラウドを用いる以外に方法はない。図 2.9 は 2024 年 4 月現在クラウドで利用可能な量子コンピュータを示している。クラウドには、量子コンピュータ専用のクラウ

ドと、一般的なクラウドの一部で量子コンピュータが利用可能になっているものがある。IBM Quantum Platform は、IBM-Q 専用のクラウドであり、同社の開発した様々な QPU を利用することができる。古いもの、量子ビット数が少ないものは無料で利用可能だが、新しく、量子ビット数が多いものは課金される。理研の開発した歴史は、富士通と大阪大学による専用のクラウドで提供される。2 号機も動作しており、富士通のクラウドで提供される。歴史は、現在は限定された研究機関でのみ利用されている。Oxford Quantum Computing の Toshiko は、有明に設置され、Equinix というクラウドベンダーにより、これも単体のみのクラウドで提供される。

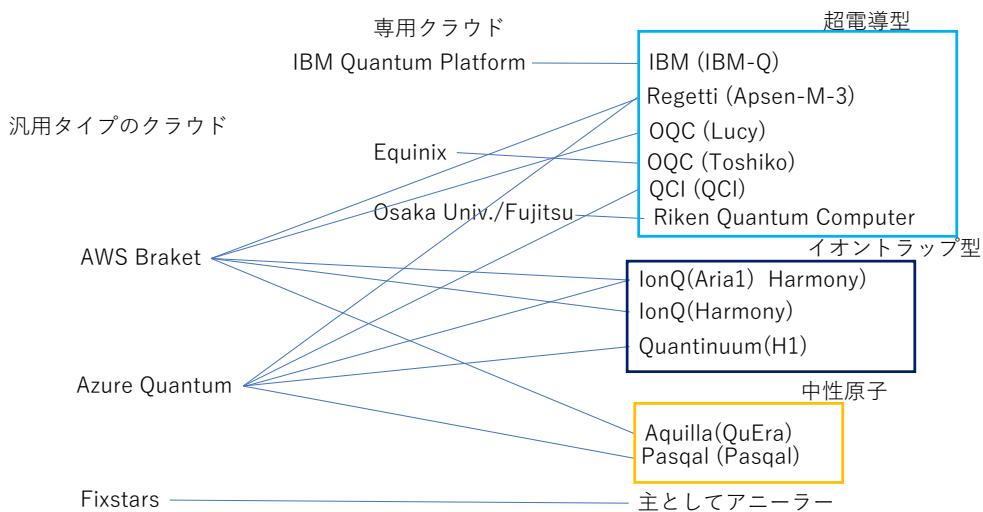


図 2.9 クラウドと利用可能な量子コンピュータ

一方、Amazon AWS、Microsoft Azure、Fixstars は、複数の量子コンピュータを一般的なクラウドの枠組みで提供している。図に示すように、クラウドによって利用可能な量子コンピュータが違っている。この不便を避けるため、Strangeworks などのベンダーは、複数のクラウドの利用を可能にする統合型のサービスも行っている。このうち、Fixstars は量子アーニーラー、疑似量子アーニーラーを中心であり、5 章での評価に一部利用されている。ここでは、AWS にアカウントを作り、天野と Mao Yikai 君（慶應大学大学院博士課程学生）が、ハンズオンの講習を受けた後に、実際に利用することで調査をした。天野は、一通り使ってみる体験的な利用が主で、Mao 君はベンチマークによる評価を行った。以下この内容を示す。

### 2.3.1.1 Amazon Braket を用いた利用調査

Amazon Braket は AWS クラウドの中の量子コンピュータ用有料クラウドで、アカウントを開設するのに基本料金が必要であり、アカウントのキーを指定することでジョブを実行することが

できる。プログラムは Braket という言語で行う。この言語は IBM の Qiskit 同様 Python ベースであり、ローカル環境で SDK をダウンロードしてシミュレータを用いて開発を行うことができる。しかし、25qubit を超える本格的な利用では、オンデマンドのシミュレータを用いる必要がある。現在、状態ベクトル型のシミュレータ SV1 (34qubit まで)、テンソルネットワーク型の TN1 (50qubit まで)、密度行列シミュレータ DM1 (11qubit まで) がそれぞれの目的に応じて利用可能である。各シミュレータの性質は第 6 章を参照されたい。Braket を用いた量子コンピュータのプログラムは AWS の Jupyter Notebook 環境で開発することも可能である。どの量子コンピュータを利用するか、あるいはシミュレータを利用するかは、Braket の API の記述により選択可能であり、実行時に動的に制御することもできる。プログラムは指定された量子コンピュータの待ち行列に入れられ、順番が来たら実行され、指定数のショットの結果が確率分布の形で戻って来る。プログラムの指定により、この結果をヒストグラムで表示することができる。この方法は、メインフレーム時代のバッチ処理と同じであり、現状でほとんどの時間は待ち行列中の待ち時間により費やされる。場合によっては数分で結果が戻って来るが、場合によっては数時間掛かることもある。最も待ち行列の短いもの、早く実行ができるものを指定することもできる。今回評価に用いた実機の仕様と価格を図 2.10 に示す。Lucy と Apsen-M-3 は超電導型、Aria 1、Aria 2、Harmony は、イオントラップ型に分類される。

Device Information (as of Nov. 2023)				
# Qubits	Technology	Cost	Availability	
11	trapped 171Yb+ ions	\$0.30 / task + \$0.01 / shot	Weekdays, 12:00:00 - 03:00:00 UTC	
25	trapped 171Yb+ ions	\$0.30 / task + \$0.03 / shot	Weekdays, 12:00:00 - 03:00:00 UTC	
25	trapped 171Yb+ ions	\$0.30 / task + \$0.03 / shot	Weekdays, 12:00:00 - 03:00:00 UTC	
8	superconducting 'Coaxmon' technology	\$0.30 / task + \$0.00035 / shot	Weekdays, 10:00:00 - 13:00:00 UTC	
79	superconducting	\$0.30 / task + \$0.00035 / shot	Everyday, 04:00:00 - 06:00:00, 15:00:00 - 18:00:00 UTC	

図 2.10 調査した量子コンピュータの仕様

対象となるアプリケーションは QASMBench[7] の中で small-scall(2-10qubit) および medium-scall(11-27qubit)、35 種類について実行した。図 2.10 に示す通り、現在 Amazon Braket で利用可能な QPU は、サイズが小さいものが多いいため、large-scale は利用することができなかった。QASMBench は QASM で記述されており、ベンダを問わず広く実行可能な点が特徴である。図 2.11 に結果の一例を示す。図中で灰色の部分はシミュレータによる結果を示し、濃い青色は、実際の QPU での実行結果を示す。シミュレータの結果はノイズを含まない理想値であり、これがぴったり一致するのが望ましい。ベンチマーク全ての実行結果と詳細な検討はオンラインの付録に示す。

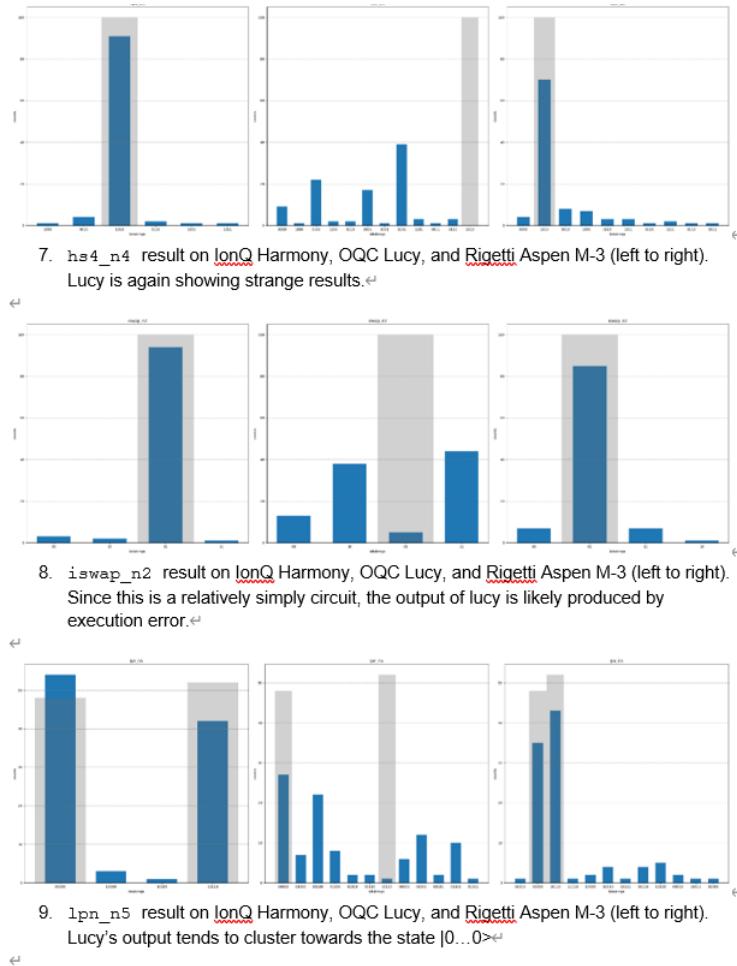


図 2.11 実行結果の一部

まず、ベンチマークによっては実行が不可能なものがある。超電導型は、量子ビット間で量子もつれを生じさせて CNOT を構成できる関係が決まっている。これをトポロジと呼ぶが、これにマッピングできないと量子ビットの数が小さくても実行することができない。マッピングはコンパ

イラが行い、SWAP ゲートを用いた交換を行ってできるだけうまく割り当てるようとするが、現在の超電導型の結合は図 2.12 に示すハチの巣型が増えており、その結合度は必ずしも十分でない。QPU の量子ビット数を増やしても、有効活用ができない問題は、単体の量子ビット数を増やすよりも分散型を目指す最近の傾向のひとつの要因となっている。

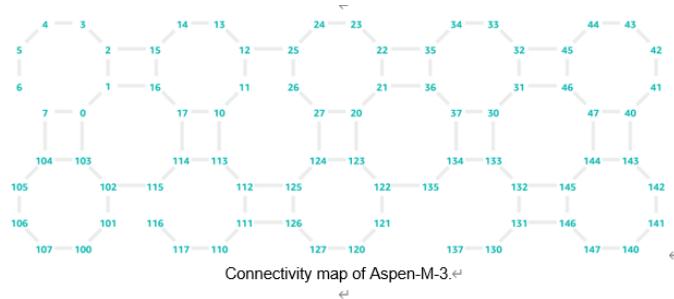


図 2.12 Aspen-M-3 の結合

これに対してイオントラップ型の QPU は完全結合なので、マッピングの問題はない。しかし、イオントラップ型は超電導型の 100 倍以上遅い。これは、クラウドにおいては待ち行列内の待ち時間が長くなる結果を招く。

結果についての詳細はオンラインの付録に示すが、結論として今回のベンチマークでは、イオントラップ型の QPU は超電導型よりも、高い忠実度を示している。超電導型は、問題サイズが大きい場合、ほとんどノイズに近い結果を出す。しかし全体として両者ともに忠実度は実用レベルにはかなり遠いのが実態である。

### 2.3.2 量子コンピュータ周辺アーキテクチャ

量子コンピュータで話題になるのは、QPU の構成そのものをどのように実現し、どの程度の量子ビット数と忠実度があるのかである。しかし、本調査では、QPU をどのようにクラウドに接続して運用するのか、というのが重要なテーマである。現在、量子コンピュータの利用は、ベンダの開発中のマシンを除いてすべてクラウド経由で行われる。QPU をクラウドを経由してアクセスするための典型的な構成を図 2.13 に示す。ここで示す QPU は超電導型、イオントラップ型などの方式を問わないが、マシン依存のコントローラに接続されている。コントローラの目的は QPU を制御するための電気的な信号を発生するためのジェネレータと計算結果を取得するためのセンサから成る。実際に制御対象となる QPU は希釈冷凍装置内に格納されているため、制御用の信号と計測用の信号を伝搬する配線の束は、量子ビット数の増加に対する壁の一つとなっている。量子ビットの制御と計測は対象の量子ビットに対して高速かつ並列に行う必要があるため、専用の AD/DA 変換器に接続された FPGA (Field Programmable Gate Array) 上の専用ハードウェアを用いる。専用の ASIC を用いない理由は、量子コンピュータの数が少ないと、マシンによって規模や制御

が異なるためである。コントローラについては、従来ベンダにより秘匿されていたが、最近は [5] にオープンソースのシステムが公開されている。

クラウドからの要求に応じてコントローラに対して指示を与えるため、専用のサーバーが必要になる。<sup>6)</sup> プリミティブは、ジョブの要求に応じて、動的コンパイルを行う。量子コンピュータのジョブ実行は、その時の量子の状態に依存するものが多く、これに対するコンパイル作業が必要となる。<sup>7)</sup> コンパイル作業は、物理的結合に対するマッピング、制御パルス列への変換を含む場合がある。またエラー修正、エラー緩和処理等を行う必要があり、かなりの性能が要求される。ただし、基本的には現在、(あるいはこれから) QPU で実行される単一ジョブに対する制御を行うものである。QPU、コントローラ、専用サーバは同一サイトに置かれて低遅延で密結合される必要がある。量子コンピュータの制御はコヒーレンス時間の制約からリアルタイム処理になる。とかく QPU の部分に目が行きがちだが、本来、ここまでを量子コンピュータと呼ぶべきであろう。

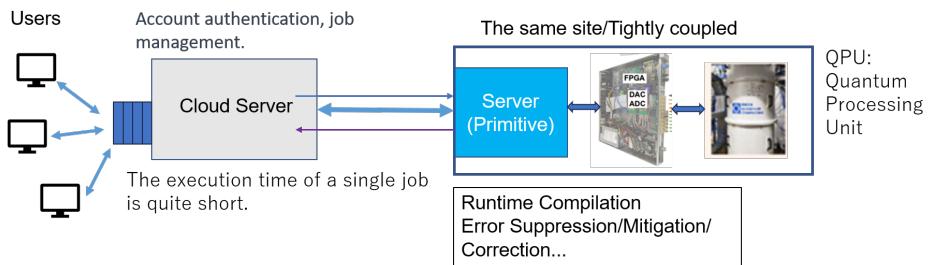


図 2.13 量子コンピュータのクラウドへの接続

プリミティブに対して、クラウド用のサーバーが接続される。この接続は特に低遅延である必要はなく、通常のインターネット接続でも問題がないのが普通である。クラウド用のサーバーは、通常のクラウドで用いるサーバーと同じで、ユーザの要求を待ち行列に入れ、優先順位の高いものから順にプリミティブに回してやる。また、測定結果をプリミティブから受け取り、ユーザに対して戻してやる。上記の構成は汎用クラウドでも専用クラウドでも同様であり、専用クラウドを用いている理研の量子コンピュータ「叡」も、ほぼ同じ構成である。

上記の構成は、单一 QPU に基づいている点で、一般性、将来性に欠けるかもしれない。IBM は、複数の QPU と分散量子コンピューティングをどのように接続するかについて、2022 年度からすでに考えており、図 2.14 は、将来の量子コンピュータと従来型コンピュータの接続の様子を示している。

6) IBM はこのサーバを primitive と呼んでいる。この用語は定着してはいないが、単純なサーバと区別するため、ここでもプリミティブと呼ぶことにする。

7) IBM はこのコンパイラをトランスペイラと呼んでいるが一般的な名称になってはいないようである

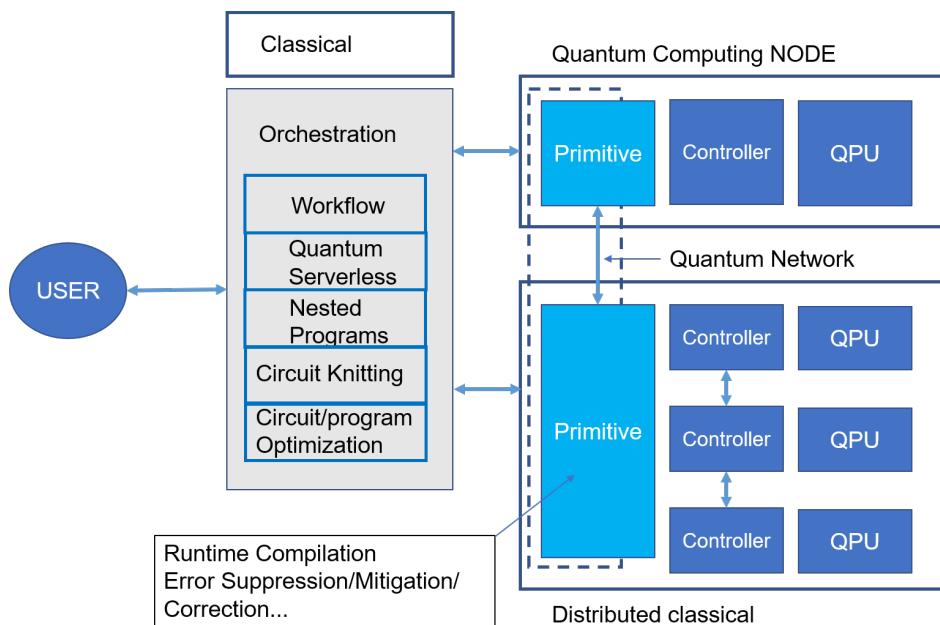


図 2.14 IBM による複数の量子コンピュータの接続

ここでは、単一のプリミティブに複数の量子コンピュータが接続されている場合、それぞれのプリミティブが接続された量子コンピュータ間を接続する場合が示されている。将来、分散量子コンピューティングが行われる場合、複数の量子コンピュータの qubit 間に量子もつれを実現可能な量子ネットワークで接続することで、多数の量子ビットを一つのシステムとして活用できる。これは、FTQC の実現への道を拓く点で十票である。通常のネットワークで接続した場合でも、複数の量子コンピュータ間で大きな量子回路を分割実行したり、並列実行した結果を照合してエラー抑制を行ったりすることが可能である。図 2.14 では、オーケストレーションという従来型のコンピュータが想定されており、ここは強力な計算能力が必要であることからスーパーコンピュータの利用が期待される。

### 2.3.3 ハイブリッドジョブの実行

NISQ アルゴリズムの多くは、量子コンピュータと従来型コンピュータのハイブリッドジョブを行う。最も一般的な手法である変分法は、図 2.15 に示すように、QPU での実行結果を従来型のコンピュータで処理し、パラメータを振りなおして量子コンピュータで実行する処理を繰り返すことで、最適解に近い解を求めていく。変分量子固有値法 (Variational Quantum Eigensolver: VQE)、この手法を最適化問題に適用した QAOA(Quantum Approximate Optimal Algorithm) がよく知られている。量子化学計算や、量子回路学習などでも同様の手法を用いる。詳細は第 3 章を参照されたい。2020 年度でのヒアリング調査では、研究者の多くは量子コンピュータでの実行結果を自分の PC で時間をかけて解析したのち、再び量子コンピュータを利用するといった形で、人手によるハイブリッド実行を行っていた。しかし、現在クラウドでは自動的に量子コンピュータと従来型コ

ンピュータ間でジョブのやり取りをするハイブリッド実行が可能になっている。

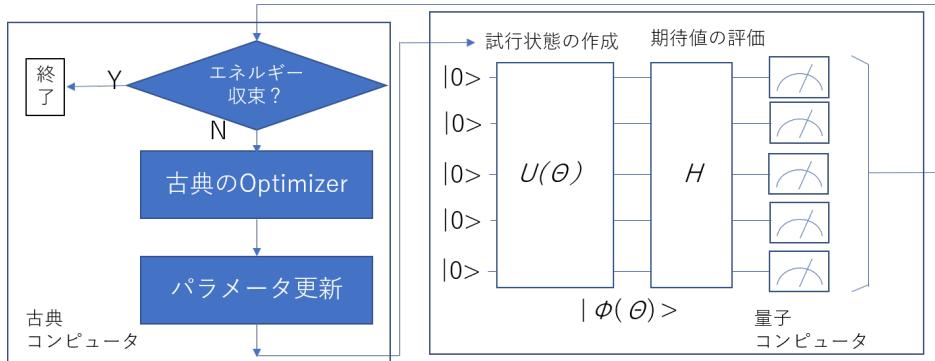


図 2.15 変分法の一例

Amazon Braket を例にとり、クラウドでのハイブリッド実行について紹介する。付録では実際に QAOA を含む 3 種類のハイブリッドジョブを実行した様子を示している。

ハイブリッドジョブの記述は、単一のジョブと同様 Braket 上の Jupyter Notebook 上で Braket のプログラムの API として QPU と従来型のジョブの両方が記述される。二種類のジョブ間のデータのやりとりと実行は自動的に行われ、通常、NISQ アルゴリズムが収束するか、何かの基準に停止するまで実行される。Amazon Braket 上での説明図を図 2.16 に示す。

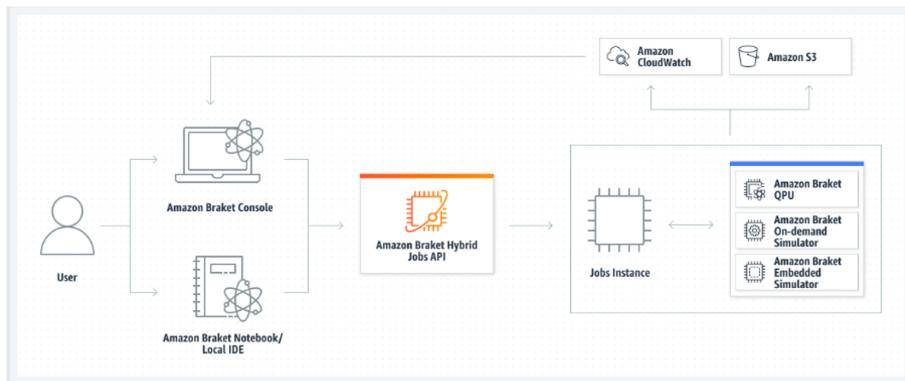


図 2.16 Amazon Braket におけるハイブリッドジョブの実行

この方式では、一つのハイブリッドジョブが、終了するまで QPU と従来型コンピュータを占有するものではない。計算結果と次のジョブは、通常の処理同様に待ち行列を介して行われる。この関係を図示したものが図 2.16 である。QPU の計算結果は、クラウド上のサーバに戻され、そこでの従来型ジョブの実行結果は、通常のジョブと同様に QPU のサーバーの待ち行列に入れられる。このため、ハイブリッドジョブにおいても QPU サーバーでの待ち行列時間が実行時間の大半を占めることになる。ただし、条件の設定によっては待ち行列の優先順位を通常のジョブよりも上げることができる。

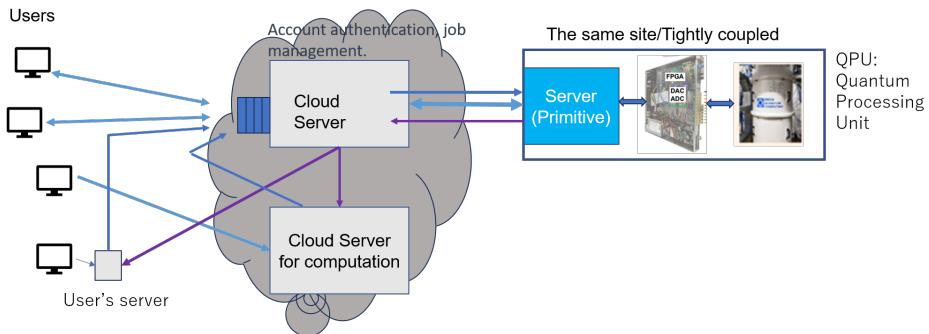


図 2.17 Amazon Braket におけるハイブリッドジョブの実行

この方式はユーザにとって便利だが危険もはらんでいる。収束性の悪さは、NISQ アルゴリズムの問題点の一つになっており、設定が悪いと QPU と従来型コンピュータの間で際限なくジョブが行き来して、膨大な使用料が掛かる可能性がある。これを防ぐため Amazon Braket では料金や実行回数による制限を設け、ユーザの指定したパラメータの変化を観測できるようにしてある。ユーザは反復によっても指定したパラメータの値が思ったように変化しなければジョブを打ち切ることができる。

Amazon Braket の利点の一つは、従来型のコンピュータにおけるジョブの実行に、ユーザの望んだプログラム環境を Docker で用意可能な点である。量子機械学習など、量子コンピュータの利用と AI 環境の融合は今後の研究に必要不可欠だが、AI 研究者の多くは自分の普段使っている AI プラットフォーム (PyTorch など) を用いたい欲求が強い。AWS は今までのクラウド技術を利用し、このような環境を提供しており、必要があればユーザ側で用意した実行環境との間でハイブリッドジョブを実現できる。さらに、XANADO 社が開発している PennyLane という量子機械学習用のフレームワークが一時期利用可能になっていたが、現在は利用を停止している。

### 2.3.4 量子コンピュータとスーパーコンピュータの連携についての検討

我が国には数多くのスーパーコンピュータと呼べる計算資源があるが、本プロジェクトでは性能が高いコンピュータは高性能コンピュータと呼び、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) により接続され、研究用に利用される高性能コンピュータのみをスーパーコンピュータと呼んで区別する。HPCI は、国内の大学や研究機関の計算機システムやストレージを高速ネットワークで結んだ共用計算環境基盤であり、文部科学省委託事業「HPCI の運営」の代表機関として、一般財団法人高度情報科学技術研究機構 (RIST) が運用を行っている。HPCI には、かつて大型計算機センターと呼ばれていた施設が運用するスーパーコンピュータを始め、多くの研究機関の計算資源が提供されている。これらの計算資源の多くは共同利用の仕組みを備えており、研究者は研究提案を行うことで、無料ないし少額でスーパーコンピュータの利用が可能となっている。現在、量子コンピュータは未だ実証試験段階にあるが、今後、順調に発展していく場合、既存のスーパーコンピュータなどのように全国共同利用として利用者に提供できる可能性がある。量子コンピュータを計算資源として利用者に資源提供をする際、既存のインフラを活用することで効

率的に運用できると期待される。すでに全国の計算資源やストレージを高速なネットワークで結び、またアカウントの管理も行っている HPCI はその提供インフラとして有力な候補である。以下に、HPCI 上に計算資源としての量子コンピュータをどのように接続するか、その際、既存のスーパーコンピュータとの接続にはどのような形があり得るかを検討する。

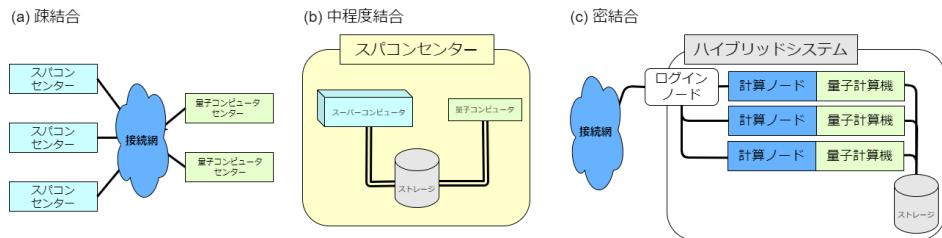


図 2.18 量子コンピュータとスーパーコンピュータの結合度のレベル。(a) 疎結合。量子コンピュータとスーパーコンピュータが SINETなどのネットワークで結合し、アクセス認証や利用ソフトウェアを共通化することでユーザが双方を利用する形。(b) 中程度結合。疎結合よりも結合を進めた形であり、スーパーコンピュータセンターの中に基本的な計算資源として量子コンピュータをオンサイトで運用する。スーパーコンピュータと量子コンピュータは別の計算資源として独立しているが、例えばストレージを共有することで、ユーザは比較的高速にデータをやりとりできる。(c) 密結合。計算資源としてスーパーコンピュータと量子コンピュータが完全に結合した形であり、例えば計算ノードと GPGPU のように、量子コンピュータとアクセラレータとしてシステムに取り込む。ユーザは、一定の大きさの計算ノードと量子コンピュータを同時に専有することで、双方を同時に利用するハイブリッド計算が最も効率的に実行可能となる。

量子コンピュータとスーパーコンピュータを、HPCI を通じて接続する際、その結合の強さに応じて以下の 3 段階が考えられる(図 2.18)。

1. **疎結合** アカウント管理のみ共通化し、量子コンピュータとスーパーコンピュータはネットワークでのみ接続される。
2. **中程度結合** いくつかの量子コンピュータは、スーパーコンピュータの設置場所と同じ場所に設置され、バッチシステムなどを通じて連携する。
3. **密結合** 量子コンピュータはスーパーコンピュータと高速なネットワークで直接結合され、アクセラレータとして機能する。

以下、それぞれについてのメリット、デメリットなどを論じる。

#### 2.3.4.1 疎結合

この段階は、量子コンピュータを保有する研究機関が HPCI に参加する形で実現する。利用者は、HPCI アカウントを持っていれば簡単に HPCI に接続された量子コンピュータを用いることができる。量子コンピュータは既存のスーパーコンピュータとは独立して存在しており、必要に応じてネットワーク上をデータ転送することで連携させる必要がある。

計算資源としては、量子コンピュータはスーパーコンピュータとほとんど連携されておらず、効率的なハイブリッド実行を行うことは困難であるが、利用者登録、管理を HPCI に任せることができる、というメリットが存在する。GPGPU など、新しい計算手法を要求するようなハードウェア

が現れた際、利用者にとっては、そのハードウェアの実行環境を構築するのが最大のハードルとなる。量子コンピュータに興味があったとしても、それぞれが個別に、かつ異なるポリシーでプロジェクトの審査、ユーザの追加を行っていた場合、利用者から見れば簡単なテストジョブを投入する「最初の一歩」までに到達することが難しい。一方、HPCI はすでに確立したインフラであり、スーパーコンピュータの利用者の多くは HPCI アカウントを保持している。ユーザから見ると、現状のクラウド利用とあまり変わらない形での利用形態となるが、慣れたシステムから利用申請を行えることで「最初の一歩」までのハードルが下がり、運用者側からすれば利用者の管理の一部を HPCI に任せることができるなど、双方にメリットが存在する。

今後、量子コンピュータ研究の裾野を広げるためには、なにより実機のユーザの数を増やすことが必要であり、その第一歩として HPCI に量子コンピュータを接続し、アカウント管理やプロジェクト申請を統合する、という形が実現することが望ましい。量子コンピュータを保有するサイトが、HPCI に量子コンピュータを資源提供した場合でも、他のスーパーコンピュータのように、独自の審査、ユーザ管理を継続・併用することは可能であり、例えばマシンタイムの 2 割を HPCI に提供し、残りの 8 割はサイト内部、もしくは特に認めた利用者に限る、といった運用も考えられる。

#### 2.3.4.2 中程度結合

先に述べた疎結合状態では、量子コンピュータは高速なネットワークでスーパーコンピュータと接続されているものの、ユーザからは現状のクラウド利用とほとんど変わらず、ハイブリッド利用は困難であった。それに対して、量子コンピュータをスーパーコンピュータと同じ場所において、両者を結合した一つのシステムとして提供する仕組みが考えられる。イメージとしては、スーパーコンピュータで計算した結果を、ストレージを介してポスト処理により可視化を行うようなシステムである。疎結合では、量子コンピュータとスーパーコンピュータはネットワーク上で接続されているものの全く別のシステムとして存在し、ユーザは一度ローカルにデータを転送してからお互いを利用する必要があった。それに対して、中程度結合では、量子コンピュータとスーパーコンピュータはストレージを共有しており、スーパーコンピュータでの計算から量子コンピュータへのデータ転送、逆に量子コンピュータの結果をスーパーコンピュータで解析といった手続きがシームレスに行えるようになる。ストレージだけでなく、バッチシステムも統合した場合、例えば量子コンピュータでの計算をそのままスーパーコンピュータに渡す、といったパイプライン処理が一つのジョブスクリプトで記述できるようになり、スーパーコンピュータと量子コンピュータを交互に何度も使うような計算が簡便に実行可能となる。

デメリットとしては、それぞれが別々の計算資源として存在するため、例えばスーパーコンピュータと量子コンピュータを同時に使いたい、といったニーズには応えることができない。例えばスーパーコンピュータと量子コンピュータを交互に使うジョブを投入した場合、他のユーザから量子コンピュータのみを利用するジョブが大量に投入されると、量子コンピュータの利用待ちが発生し、ハイブリッド実行のメリットが活かしにくい。

なお、中程度結合は、既存のスパコンサイトが、別計算資源として量子コンピュータを保有する形を想定しているため、必ずしも HPCI への接続を必要とするものでないことを注記しておきた

い。大規模計算機センターは一般にスーパーコンピュータを複数同時に保有、運用しているが、そのシステムの一つとして量子コンピュータも同時に運用するようなイメージであり、HPCI に接続しなくとも、大規模計算機センターが運用中のプロジェクト提案、採択、ユーザ追加システムをそのまま活用する形でも運用可能である。

#### 2.3.4.3 密結合

スーパーコンピュータと量子コンピュータが同じサイトに存在し、例えはストレージやバッチシステムを共有することで両者の相互連携が強まったのが中程度結合であるが、それをさらに進め、ユーザがスーパーコンピュータと量子コンピュータの一部を同時にかつ独占的に活用する形が密結合である。イメージとしてはアクセラレータとして GPGPU を持つスーパーコンピュータに近い。多くの場合、スーパーコンピュータはユーザがノード単位で計算資源を排他的に利用する。GPGPU を持つスーパーコンピュータでは、GPGPU はノードに付属しており、GPGPU を持つノードの利用権を得たユーザは、そのノードの CPU による計算資源と GPGPU による計算資源を同時に、かつ独占的に利用可能である。ユーザは、例えは OpenACC や OpenMP といったディレクティブや、CUDA や OpenCL といったプログラミングモデルにより、ホストである CPU とアクセラレータである GPGPU を活用することになる。

一方、量子コンピュータと通常のコンピュータを連携させる仕組みは整備されておらず、現状は同時に計算資源を予約したとしても、ストレージを経由してデータをやり取りして連携させる必要があり、密結合しているメリットを活かせない。また、量子コンピュータとスーパーコンピュータを密結合させる場合、どのような比率で接続させるべきか、という問題もある。GPGPU でも、ノード構成として CPU が 1 ソケットないし 2 ソケットに対して、GPGPU の枚数は 1 枚、2 枚、4 枚と複数の選択肢があり、ユースケースにより最適な比率が異なる。ユースケースにより、量子コンピュータとスーパーコンピュータの利用割合が大きく異なる場合、せっかくの計算資源が遊んでしまうことになる。一方、量子コンピュータを複数のノードで共有する形とすると、中程度結合と同様な問題、すなわち使いたい時に量子コンピュータが使えず、ハイブリッド利用のメリットが活かせない事態となるため、最適な設計は難しい。

また、現状では量子コンピュータと通常のコンピュータを連携して利用するプログラミングモデルや計算プラットフォームは存在しない。プログラミングモデルの候補として、本プロジェクトで提案されるような Remote Procedure Call (RPC) の活用が考えられるが、利用者の開発コストを下げ、裾野を広げるという意味では、OpenMP、OpenACC のようなディレクティブベースのプログラミングモデルの開発が必要であろう。また、アクセラレータとして活用を期待するのであれば、量子・古典アニーラをノードの加速部として追加する形もあり得る。特に、古典アニーラについては実用レベルのシステムが提案されつつあるため、近い将来、スーパーコンピュータのアクセラレータとしての採用もあり得る。同様に、量子アニーラもアクセラレータとしての採用は有望であろう。ゲート型量子コンピュータについては、スーパーコンピュータとの密結合によりどのような価値が生まれるかは未知数である。

## 2.4 まとめと提言

### 2.4.1 調査結果のまとめ

量子コンピュータと高性能コンピュータを接続する場合の留意点を述べる。

#### 2.4.1.1 量子コンピュータと高性能コンピュータの違いはなにか？

クラウド内で利用する場合、量子コンピュータと高性能コンピュータはともに、特殊なジョブを高い性能で実行する点で、バッチ処理で利用する場合にはさほど違いがないように思える。しかし、以下の点は留意すべきである。

- ジョブの実行時間：量子コンピュータでも超電導型とイオントラップ型では実行時間が違つており、前者は1ショット当たり 100-300nsec、後者は数 10-300μsec 程度である。現状では各ショットは連続して実行されるので、1000 ショット実行すれば数マイクロから数秒の実行時間をする。高性能コンピュータでは一つのジョブが数時間から数日かかることがあるのに対して、量子コンピュータではコヒーレント時間が制約されていることからこのようなことは絶対に起きない。すなわち、量子コンピュータのジョブ実行時間はどのジョブでもあまり変わらず、予測可能である。
- 入出力データ量：量子コンピュータはメモリ上にデータを持つことが苦手であるため、入力データはパラメータなどスカラデータの集合である場合が多く、全体のデータ量は小さい。また、出力データもショットの結果が統計処理されたものが多いため、多くない。これは高性能コンピュータが時に膨大なデータ入出力を必要とするのは対照的である。
- プリミティブまでを量子コンピュータと考えると、量子コンピュータは、高度な専用マシンであり、目的としたジョブ以外は実行できない。高性能コンピュータはそれ自体にログインしてジョブを発行できるが、この種のことは量子コンピュータでは期待されていない。

スケジューラの観点から考えると、アクセラレータの中でもさほど扱いが困難なものではないが、現状では極めて高価で競争率が高いので、上記の特徴を生かして可能な限り効率的に運用することが望まれる。

#### 2.4.1.2 量子コンピュータと高性能コンピュータを同一サイトに置く必要があるか？

図 2.13 で示す接続を行う場合、プリミティブまでは同一サイトに置く必要があるが、クラウドサービスを実現するだけならば、必要なネットワーク帯域、遅延時間を考えると、クラウド用のサーバを同一サイトに置く必要性はない。ハイブリッドジョブを考えても、従来型のコンピュータの処理結果を一度待ち行列に入れて運用していることを考えても同一サイトに置く必要性はないといえる。

しかし、将来、複数の QPU が置かれる場合、図 2.14 で示す Orchestration のレベルまで同一サ

イトに置くことにより、新しい分散コンピューティングの可能性が拓ける可能性があり、実験的システムの構築により、Circuit Knitting、Error Mitigationなどの研究が進む可能性がある。したがって将来の構成を考えれば、必要性がありと判断できる。

#### 2.4.1.3 量子コンピュータのカウンターパートしてどの程度の高性能コンピュータが必要か？

調査結果に基づくと現在の NISQ アルゴリズムの多くでは強力なコンピュータを必要としておらず、中レベルのスーパーコンピュータで十分以上だろう。高性能なコンピュータが必要なのはアルゴリズム開発を行う際に、シミュレータと組み合わせる場合である。量子コンピュータシミュレータは、巨大なオンコアメモリを必要とすることから、Top500 の上位に来る高並列のコンピュータが望ましい。量子コンピュータシミュレータの特徴としては、対象の状態ベクトルが主記憶に乗らない場合、実行自体不可能になる点で、高並列型のスーパーコンピュータが有利である。これについては第 6 章を参照されたい。ただし、将来の分散量子コンピュータの利用を考えると、その Orchestration の部分には Top500 上位のスーパーコンピュータがあった方がよい。特に複数のスーパーコンピュータ、量子コンピュータを効率的に運用できるシステム構築の研究が必要である。これについては第 4 章を参照されたい。では、より具体的に、量子コンピュータとポスト富岳などフラグシップマシンを接続すべきか、というと、クラウドのレベルで接続する場合、通常のクラウドに量子コンピュータ、ポスト富岳をともに接続すればよいので、利用方法についてきちんとシステム設計がなされていれば、成果を上げられる可能性がある。しかし、同一サイトで密結合する必要性には乏しく、ともに貴重な計算資源であるフラグシップマシンと量子コンピュータを単に低遅延というだけの目的で同一サイトにおいて接続する必要性を見出すのは難しい。

#### 2.4.1.4 量子コンピュータはスーパーコンピュータの代わりになるか？

将来にわたってもこの可能性はほとんど考えられない。量子ゲート型量子コンピュータは、2030 年前後にある程度 FTQC が実現し、ノイズの少ないシステムが利用可能になったとしても、スーパーコンピュータで実行するのが難しい特殊な問題領域で利用されるアクセラレータとしての使い方になるだろう。量子現象を利用するという量子コンピュータの利点は、量子ビットの扱いにくさ、プログラミングの困難さという欠点につながり、現在のスーパーコンピュータの利用範囲全体をカバーすることは難しい。このため、量子コンピュータの発展を期待して、従来型のコンピュータの発展についての研究開発を疎かにすることがあつてはならない。

### 2.4.2 将來の量子コンピュータ、スーパーコンピュータの運用についての提言

現在の量子コンピュータといわゆるスーパーコンピュータ間には、利用上の大きな壁ができている。図 2.19 に示すように、量子コンピュータは商用クラウドで利用されており、実験用のクラウドを除くと、AWS、Azure、IBM などのプラットフォーマーである。Fixstars が健闘しているものの、ほぼ海外の巨大プラットフォーマに占められている。一方、スーパーコンピュータは、国のサポートに支えられ、富岳を中心に全国各大学の研究センターによって運用し、HPCI などで利用、整備、運用が定められる。両者は完全に断絶しており、現状では実験的に量子コンピュータとス

パーコンピュータの連携を行う場合は第4章に示す理研R-CCSの試みのように、別に予算を獲得して実験的にシステムを構築する必要がある。

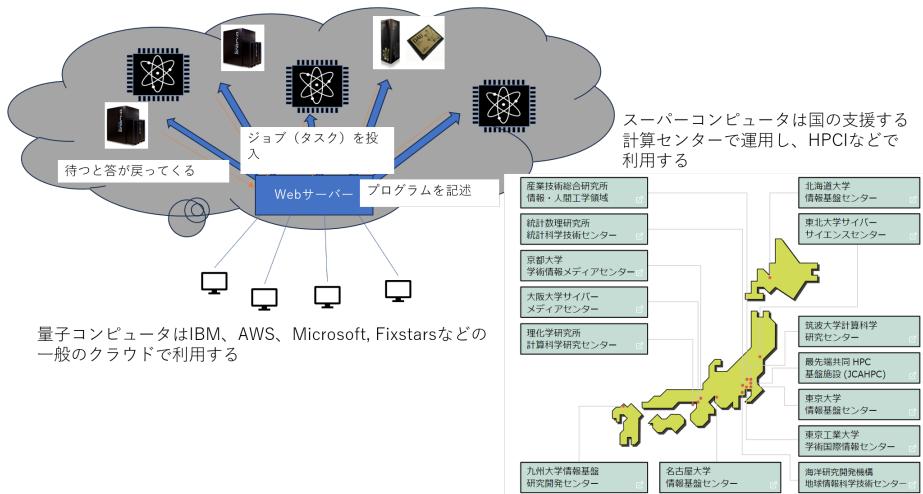


図2.19 量子コンピュータとスーパコンピュータの利用上の壁

量子コンピュータを詳細の計算資源として位置付けるためには、早い時期に量子コンピュータの運用、利用時の申請、利用時のAPIなどのソフトウェアをスーパコンピュータと共に可能なものに統一し、スーパコンピュータの利用の枠組の中に量子コンピュータを取り込むべきである。今回のポスト富岳に向けた調査研究と、理研における量子コンピュータとスーパコンピュータの接続プロジェクトは、このための良い機会となるだろう。これを行わないと、日本における量子コンピュータ研究は海外の巨大プラットフォームに握られ、ハイブリッドジョブの実行が可能な多額の費用と、研究成果がプラットフォームに吸い取られていく可能性がある。

量子コンピュータをスーパコンピュータの環境に取り込むことについての利点は以下の通りである。

- 研究資金に乏しい大学でも量子コンピュータを利用可能となる。多額の研究資金が海外クラウド、プラットフォームに行くことが止められる。
- 量子コンピュータを研究している物理学者、化学者、スーパコンピュータを利用している物理学者、化学者の相互間の交流により研究が発展する可能性がある。
- 現在の商用クラウド環境の非力な量子コンピュータシミュレータに替えて、スーパコンピュータによる強力な量子コンピュータシミュレーション環境が使えるようになる。
- ムーンショットG6などで新しい量子コンピュータを開発している研究者が早い時期にクラウドにその開発成果を公開できる。

最後に、量子コンピュータとスーパコンピュータとの接続を実現するにあたっての懸念を述べる。現状で、量子コンピュータの研究コミュニティは、スーパコンピュータとの接続に関して、ネガティブな声はないものの、さほどの必要性を認めていない。無理に接続することで、量子コン

ピュータ研究者の時間を奪うのは本末転倒であり、接続するのであれば量子コンピュータのコミュニティ、スーパーコンピュータのコミュニティ双方にメリットがあるように、慎重に議論して進めるべきであると考える。また、量子コンピュータ研究では Python と Jupyter Notebook が主要な開発環境であり、C/C++/Fortran が主要な開発言語であって可搬性よりも性能が重視されるスーパーコンピュータの開発環境と大きなギャップがある。調査結果でも述べたが、商用クラウド、特に Amazon Braket の優れた点は、Docker による仮想環境を用いてプログラマが現在利用している AI プラットフォーム (Pytorch や Tensorflow) が容易に利用でき、量子コンピュータと連携可能である点にあるが、現状、Docker がそのまま運用できるスーパーコンピュータはほとんど存在せず、大きな参入障壁となっている。しかし、ローレンス・リバモア国立研究所で開発された、スーパーコンピュータ向けのコンテナ技術である Singularity を標準でサポートするサイトも登場するなど、スーパーコンピュータコミュニティにおいても可搬性と性能の両立の追求が進んでいる。クラウドの発達、GPGPU の発達により容易にある程度の計算能力を使えるようになった今、スーパーコンピュータを使って高い性能が得られるというだけでは、それを魅力に感じる研究者は限定されてしまう。かつてスーパーコンピュータはシステムソフトウェア、プログラムについてコンピュータサイエンスの最先端を行っていたが、徐々に限られた領域の特殊な技術となり、若い研究者にとって魅力を失いつつあるように感じる。量子コンピュータとの連携が契機となり、スーパーコンピューティングコミュニティ自体が輝きを取り戻すことを願っている。

## 参考文献

- [1]Francesco Petruccione (大関正之監訳、荒井俊太ら訳) ” ”Maria Schuld. ”**量子コンピュータによる機械学習**”. 共立出版. [機械学習に特化した著書でかなりレベルが高く難しい]. 2020.
- [2]”天野、柚木、佐藤、谷本、小松、百瀬”. **2022年度 新計算原理調査研究チーム調査報告書**. ”文科省調査研究報告”. 2022.
- [3]”宇津木健著、徳永裕己監修”. ”**絵で見てわかる量子コンピュータの仕組み**”. SHOEISHA. [わかりやすく、かつ正確な記述のテキスト]. 2019.
- [4]”木村達也”. ”**量子コンピュータと量子通信 I-III**”. オーム社. [量子通信について詳細に書かれた大作]. 2016.
- [5]“ “QubiC: An open source FPGA-based control and measurement system for superconducting quantum information processors” ”. In: *arXiv:2101.00071v3* (2021).
- [6]”Tsubasa Ichikawa1 and et. al.” ” *A comprehensive survey on quantum computer usage: How many qubits are employed for what purposes?*” ”*arXiv:2307.16130v1quant-ph 30 Jul 2023*”. 2023.
- [7]Ang Li et al. ”**QASMBench: A Low-Level Quantum Benchmark Suite for NISQ Evaluation and Simulation**”. In: *ACM Transactions on Quantum Computing* 4.2 (Feb. 2023). DOI: 10.1145/3550488. URL: <https://doi.org/10.1145/3550488>.

- [8]嶋田義皓. **量子コンピューティング基本アルゴリズムから量子機械学習まで**. 情報処理学会、出版委員会監修オーム社. [量子コンピュータの優れたテキスト、広く書いてあるが、個々の項目の内容が濃い]. 2020.
- [9]束野仁政. **高校数学からはじめる量子コンピュータ**. 有限会社ねこのしっぽ. [難しい数式を使わず、丁寧に解説してある。しかしレベルが低いわけではない]. 2019.
- [10]藤井啓祐. **驚異の量子コンピュータ**. 岩波書店. [縦書きの一般書だが第一人者によって書かれているだけあって正確な内容]. 2019.



# 第3章 量子コンピュータのアルゴリズム

## 3.1 NISQ の有望な応用先と量子アルゴリズム

NISQ の最も有望な応用先として、直接「量子」を対象とする量子化学や物質材料、原子核・素粒子物理などに現れる量子多体系の基底状態および励起状態計算、実時間量子ダイナミクス計算、および有限温度計算などが挙げられる。本章ではこれらの応用先及びエラー緩和法の動向について、具体例を挙げながら報告する。

## 3.2 変分量子計算

### 3.2.1 VQE や QAOA の問題点

量子コンピュータと従来型コンピュータを相補的に利用する計算の枠組みは量子-古典ハイブリッド計算と呼ばれる。量子-古典ハイブリッド計算の中で、量子ビットの回転角度を変分パラメータとして用いる変分量子アルゴリズム、その中でも特に、量子回路を変分量子状態とする変分量子固有値 (variational quantum eigensolver, VQE) 法が有望な方法として世界中で盛んに研究されてきた。黎明期には  $H_2$ 、 $LiH$ 、 $BeH_2$  といった小さな分子に対する量子コンピュータ実機を用いた VQE 計算が IBM グループから報告されており [16]、最近では物性物理で用いられるハバード模型に対して VQE を適用した例が Phascraft と Google らのチームから報告されている [31]。また、VQE 法あるいは変分量子アルゴリズムは、量子多体系のハミルトニアン行列の基底状態や励起状態計算だけでなく、逆行列、連立一次方程式や特異値分解の解法など広く応用先が報告されている。また、量子最適化に対する変分量子アルゴリズムとしては、QAOA (quantum approximate optimization algorithm) が広く知られている。ただし、これらの変分量子計算は以下に列挙するいくつかの問題点をもつ。

1. 変分パラメータ数が多くなった場合に、コスト関数に対する変分パラメータの微分がゼロになる現象 (Barren plateau 現象、BP 現象) が多々起こることが知られている。
2. 解きたい問題に対する最適な量子回路構造 (どのような量子ゲートをどういう順番で操作するか) が一般にわからない。あるいは、用いた変分量子回路の表現能力が解きたい問題に対して十分か一般にはわからない。
3. 変分パラメータ数が多くなった場合に大きな系にまでスケール可能か非自明である。
4. 量子コンピュータ実機を用いた場合、量子コンピュータのノイズのために得られた解が変分原

理を満たしていない場合が多々起こる。

これらの問題点の詳細及び VQE や QAOA の枠内での解決へ向けた動向は昨年度の報告書を参照されたい [36]。

### 3.2.2 部分空間対角化法における量子コンピュータとスーパーコンピュータ双方の利用例

VQE や QAOA は、量子化学や物性物理分野においては、与えられたハミルトニアンの固有値や固有状態（特に基底エネルギーや基底状態）を得ることを目的として用いられる。言い換えると、この目的のために必ずしも VQE や QAOA を手段として用いる必要はない。

この目的のために、最近、QunaSys と大阪大学の研究者らにより提案された部分空間対角化法に基づく量子-古典ハイブリッド計算法が [17, 25]、IBM と理研のチームにより実践された [26]。この量子-古典ハイブリッド計算法では、量子コンピュータを用いて基底状態を近似する適當な状態から電子配置をサンプルし、その電子配置の基底で張られる部分空間でのハミルトニアン行列（エルミート行列）の固有値問題を従来型コンピュータで解いて基底状態の情報を得る。そのため、VQE や QAOA の問題点のうち、変分パラメタの最適化に関する問題や変分原理に対するノイズの影響に起因する問題（上に列挙した例では問題点 1,3,4）を回避している。なお基底状態を近似する適當な状態としては、VQE や QAOA で利用して準備した状態を用いることや、従来型コンピュータで計算した近似的な基底状態を量子回路に直して用いること [30] も考えられる。

論文 [26] に関して、より具体的には量子コンピュータとして ibm\_torino と ibm\_nazca が用いられ、従来型コンピュータとして富岳が用いられた。量子コンピュータからサンプルする電子配置はノイズの影響を受けて誤った占有数を示す場合があるが、その場合は正しい占有数になるように修正した電子配置を部分空間の基底としている。占有数に基づき修正された電子配置は複数の組にまとめられ、電子配置の各組は富岳の各ノードで固有値問題を定義する部分空間の基底として用いられる。各部分空間の基底状態を Davidson 法で求めて、それら基底状態に関する占有数の平均値を計算する。計算された占有数はノイズの影響を受けた占有数の修正に改めて用いられる。部分空間の次元が大きいほど基底状態に近づくため、より精度を上げるためににはより多くの従来型コンピュータのリソースが要求される。

## 3.3 量子ダイナミクス計算

量子ダイナミクスとは量子状態の実時間発展現象のことを指すこととする。量子ダイナミクスは量子コンピュータ上における量子ゲート操作に他ならず、量子計算の自然な応用のひとつである。あるいは、既知の量子多体系の量子ダイナミクスの知見に基づいた NISQ 実機のベンチマークも行われている [24]。ここで想定する量子ダイナミクス計算は、従来型コンピュータとの反復的なデータのやり取りは行わず、量子回路のパラメタの最適化も行わない。

### 3.3.1 量子ダイナミクス計算に対する NISQ の応用例

量子状態の時間発展は一般にその量子状態を保持する量子ビット間の量子エンタングルメントの増大を伴うため、発展させる時間が長くなるほどテンソルネットワークに基づく従来型コンピュータシミュレーションは難しくなる。2023年6月中旬に発表された IBM の Eagle プロセッサー 127 量子ビット機を用いて二次元横磁場 Ising 模型の Floquet 量子ダイナミクス計算を実証した Kim らの論文 [19] では、当時習慣的に用いられていたある種のテンソルネットワーク法による従来型コンピュータを用いた計算では信頼性のある結果を得ることが困難な時間領域（最大時間ステップ 20/最大回路深さ 60）まで量子コンピュータ実機で計算を行なったとされた。ただし、この論文が発表されてから約 2 週間後の 6 月下旬には、実機で計算された物理量の結果は従来型コンピュータを用いた計算により再現可能であるというプレプリントが複数発表されている [34, 18, 11]。

上記の通り、量子ダイナミクスは量子計算の自然な応用であるものの、従来型コンピュータを用いた計算と比較した際の優位性は実証されていない。また、実機を利用して得た結果はノイズの影響を受けているため、その正当性は慎重に検証する必要がある。しかし量子コンピュータへのアクセスがあれば、最先端のテンソルネットワーク法の知識やコード無しに量子ダイナミクス計算を手軽に試すことができる。実際、NISQ 実機を用いた量子ダイナミクスは、量子多体系局在現象（quantum many-body localization, MBL）や離散時間結晶（discrete time crystal, DTC）現象といった、適度にエンタングルした量子多体系で見られる非平衡現象に研究に利用されはじめている [23, 12]。結果の正当性は実機の性能や測定する物理量に依存するが、例えば IBM の Heron プロセッサーを用いて局所磁化のダイナミクスを測定した例では  $O(10)$  の時間ステップ程度まで従来型コンピュータを用いた計算結果と定性的に一致する結果が得られている [29]。

## 3.4 有限温度計算

ここでの有限温度計算とは平衡統計力学の計算を指すこととする。代表的な統計集団としてはミクロカノニカル集団やカノニカル集団等があるが、特にここではミクロカノニカル集団に着目する。ミクロカノニカル集団は与えられたエネルギーの区間内（エネルギー窓）に収まるエネルギーを持つ状態の集団である。その集団に関する物理量の平均（ミクロカノニカル平均）を計算することが目的である。

ミクロカノニカル集団の基本的な物理量はエントロピー（エネルギー窓内の状態数の対数）である。エネルギーの関数としてエントロピーまたは状態密度が計算できれば、原理的には温度を定義することやカノニカル集団へ移行することが可能である。

状態密度はエネルギー固有値を引数に含むデルタ関数の固有値のラベルに関する和として定義される。すると状態密度は時間発展演算子のトレースのフーリエ変換に比例することがわかる [15]。したがって時間発展演算子のトレースを量子コンピュータで計算し、それをフーリエ変換すれば状態密度が得られることになる [21]。実際には、無限時間だけ時間発展させることはできないので、フーリエ変換の時間積分の区間には適当な時間のカットオフを入れることになる。この時間のカッ

トオフの逆数がミクロカノニカル集団を定義するエネルギー窓の幅に相当する [27]。

時間発展演算子のトレースを計算する方法として、ランダム量子回路を用いる方法 [32]、直積状態に関してサンプルする方法 [13]、スクランブリング量子回路を用いる方法 [28] が、Quantinuum のイオントラップ型量子コンピュータ実機を用いて実証された。ただし、演算子のトレースの推定を効率的に行う古典アルゴリズムはなさそうであるものの [20]、ミクロカノニカル平均の計算には状態密度による規格化（カノニカル平均でいうところの分配関数による規格化）が必要であることに注意を要する。平衡統計力学の計算にしばしば共通することだが、この規格化により、対象とする統計集団の状態密度またはエントロピーが小さいほど（規格化の分母が小さいほど）計算が困難になる。具体的には、論文 [28] で用いられたアルゴリズムの場合、物理量のミクロカノニカル平均を与えた誤差  $\epsilon$  で計算するために必要なショット数は、 $S$  をエントロピー、 $N$  を量子ビット数として  $[2^N / (\epsilon e^S)]^2$  程度となり、一般には  $N$  に関して指数関数的なショット数が必要である。極端な場合としてエントロピーがゼロ ( $S = 0$ ) の場合が、これは一つのエネルギー固有状態を求ることと等価だが、最も難しい。

## 3.5 エラー緩和法

### 3.5.1 Depolarizing ノイズの低減

ノイズのもとでは、量子回路の深さが大きいほど、測定のシグナル（例えばパウリ演算子の期待値）が小さくなることが起こる。量子回路の深さを大きくすることは、例えば量子ダイナミクス計算においては、発展させる時間を長くすることに対応する。したがって、減少したシグナルを適切に復活させることは長時間の量子ダイナミクス計算から意味のある結果を見出すために重要である。ここでは執筆者らが調査研究期間中に実践した、シグナルの減少を軽減するエラー緩和法を一つ紹介する。

シグナルの減少を表すノイズモデルとして、global depolarizing ノイズモデル

$$\mathcal{E}_{\hat{U}}(\hat{\rho}) = f \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger + (1 - f) \frac{\hat{I}}{2^N} \quad (3.1)$$

がある [33, 35]。ここで  $\hat{\rho}$  は密度行列として表現した量子状態、 $\hat{U}$  は量子回路に対応するユニタリ演算子、 $\hat{I}$  は恒等演算子、 $N$  は量子ビット数、 $f \in [0, 1]$  はノイズモデルを特徴づける未知のパラメタである。このモデルでは、量子回路  $\hat{U}$  をノイズのもとで量子状態  $\hat{\rho}$  に作用させると（左辺）、所望の状態  $\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$  と完全混合状態  $\hat{I}/2^N$  がそれぞれ確率  $f$  と  $1 - f$  で混合した状態が得られる（右辺）としている。 $f = 1$  はノイズが無い場合に相当する。 $f$  は量子回路  $\hat{U}$  の忠実度と呼ばれることがある。

このノイズモデルのもとで、物理量  $\hat{O}$  の期待値は

$$\text{Tr} [\mathcal{E}_{\hat{U}}(\hat{\rho}) \hat{O}] = f \text{Tr} [\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger \hat{O}] + (1 - f) \frac{\text{Tr} [\hat{O}]}{2^N} \quad (3.2)$$

で与えられる。左辺はノイズの影響下で観測される物理量の期待値であり、右辺第一項が所望の物理量の期待値  $\text{Tr}[\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger\hat{O}]$  に  $f$  をかけたものである。ノイズの影響下で観測される物理量の期待値  $\text{Tr}[\mathcal{E}_{\hat{U}}(\hat{\rho})\hat{O}]$  を実機から得られた値とすれば、あとは  $f$  と  $\text{Tr}[\hat{O}]$  がわかれば、所望の物理量の期待値を見積もることができる。

$\hat{O}$  がパウリ演算子の直積やそれら線型結合で与えられる場合、すなわち  $\hat{O}$  がトレースレス ( $\text{Tr}[\hat{O}] = 0$ ) の場合がしばしばある。その場合、所望の物理量の期待値は以下のように見積もられる。

$$\text{Tr}[\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger\hat{O}] = \frac{\text{Tr}[\mathcal{E}_U(\hat{\rho})\hat{O}]}{f} \quad (3.3)$$

$f$  の見積り方としては、エコー回路を利用する方法や [23]、 $\hat{U}$  と量子回路の体積は類似しているが所望の物理量の期待値が自明な値（例えば  $\pm 1$ ）になる量子回路を参照する方法や [22, 29]、 $\hat{U}$  に含まれてかつ物理量の測定に寄与するゲートのフィデリティの積から見積もる方法 [28] がある。

このエラー緩和法を用いてある与えられた誤差  $\epsilon$  で物理量の期待値を見積もるには、 $N_{\text{shots}} \sim 1/(f^2\epsilon^2)$  程度のショット数が必要である。 $f$  は回路の忠実度に対応するので、量子回路の体積（幅と深さ）に関して指数関数的に減少すると考えられる。その場合、分母  $f$  の指数関数的に減少に従い、指数関数的なショット数のオーバーヘッドが生じる。実際に量子計算を実行する際には、 $f$  の減少に応じて  $N_{\text{shots}}$  を大きくすることよりも、 $N_{\text{shots}}$  予め定めて計算を行うことが多いと思われる。そこで  $N_{\text{shots}}$  と  $\epsilon$  を固定した場合を想定すると、 $f$  が  $1/(\epsilon\sqrt{N_{\text{shots}}})$  程度より大きい量子回路に対してこのエラー緩和法は実践的だと考えられる。

### 3.5.2 Heron プロセッサーにおける dynamical decoupling の効果の薄さ

IBM の NISQ 実機のうち現行の Heron プロセッサーと先代の Eagle プロセッサーを比較した論文 [24] の例では、先代の Eagle プロセッサーでは必須といえるほど効果的であった dynamical decoupling は、Heron プロセッサーではほぼ効果が見えないことが報告されている。これは Eagle プロセッサーに比べて Heron プロセッサーでは量子ビット間の不要な相互作用（クロストーク）が低減されたことによる。この例は実機の性能に依存して有効なエラー緩和法が変わり得ることを示唆している。

## 3.6 平均使用量子ビット数の動向

Ichikawa ら大阪大学の研究グループによる調査論文 [14]において、2016年1月1日から2022年11月10日の期間にarXivのquant-phセクションに投稿された、量子コンピュータを用いたプレプリントで用いられた量子ビット数の平均値、中央値、最大値等が報告されている。これによると2022年のデータでは平均値は10.46、中央値は6、最大値は102であった。

QUANTUMatter2024におけるJay Gambetta(IBM)のプレゼンテーションでは、Ichikawa らの2022年までの使用量子ビット数の平均値のデータにIBMが取得したIBMの外部ユーザーの2023の使用量子ビット数の平均値のデータを加えて、2次多項式でフィットすると、使用量子ビット数

の平均値をそのように外挿した値は 2038 年に 100 程度になると議論された。同プレゼンテーションでは、使用量子ビット数 100 というのは量子計算が実用に供するための一つの目安 (utility scale) として据えられている。ただしフィッティングのエラーバーは付与されていない。

## 参考文献

- [11] Tomislav Begušić and Garnet Kin-Lic Chan. *Fast classical simulation of evidence for the utility of quantum computing before fault tolerance*. 2023. arXiv: 2306.16372 [quant-ph].
- [12] Philipp Frey and Stephan Rachel. “Realization of a discrete time crystal on 57 qubits of a quantum computer”. In: *Science Advances* 8.9 (2022), eabm7652. DOI: 10.1126/sciadv.abm7652. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.abm7652>. URL: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv.abm7652>.
- [13] Kévin Hémery et al. *Measuring the Loschmidt amplitude for finite-energy properties of the Fermi-Hubbard model on an ion-trap quantum computer*. 2023. arXiv: 2309.10552 [quant-ph].
- [14] Tsubasa Ichikawa et al. *A comprehensive survey on quantum computer usage: How many qubits are employed for what purposes?* 2023. arXiv: 2307.16130 [quant-ph].
- [15] Fengpin Jin et al. “Random State Technology”. In: *Journal of the Physical Society of Japan* 90.1 (Jan. 2021), p. 012001. ISSN: 1347-4073. DOI: 10.7566/jpsj.90.012001. URL: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.90.012001>.
- [16] Abhinav Kandala et al. “Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets”. In: *Nature* 549.7671 (Sept. 2017), pp. 242–246. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/nature23879. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nature23879>.
- [17] Keita Kanno et al. *Quantum-Selected Configuration Interaction: classical diagonalization of Hamiltonians in subspaces selected by quantum computers*. 2023. arXiv: 2302.11320 [quant-ph].
- [18] K. Kechedzhi et al. “Effective quantum volume, fidelity and computational cost of noisy quantum processing experiments”. In: *Future Generation Computer Systems* 153 (Apr. 2024), pp. 431–441. ISSN: 0167-739X. DOI: 10.1016/j.future.2023.12.002. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.future.2023.12.002>.
- [19] Youngseok Kim et al. “Evidence for the utility of quantum computing before fault tolerance”. In: *Nature* 618.7965 (June 2023), pp. 500–505. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/s41586-023-06096-3. URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06096-3>.
- [20] E. Knill and R. Laflamme. “Power of One Bit of Quantum Information”. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (25 Dec. 1998), pp. 5672–5675. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.5672. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.5672>.

- [21]Sirui Lu, Mari Carmen Bañuls, and J. Ignacio Cirac. “Algorithms for Quantum Simulation at Finite Energies”. In: *PRX Quantum* 2 (2 May 2021), p. 020321. DOI: 10.1103/PRXQuantum.2.020321. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PRXQuantum.2.020321>.
- [22]Xiao Mi et al. “Information scrambling in quantum circuits”. In: *Science* 374.6574 (Dec. 2021), pp. 1479–1483. ISSN: 1095-9203. DOI: 10.1126/science.abg5029. URL: <http://dx.doi.org/10.1126/science.abg5029>.
- [23]Xiao Mi et al. “Time-crystalline eigenstate order on a quantum processor”. In: *Nature* 601.7894 (Nov. 2021), pp. 531–536. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/s41586-021-04257-w. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41586-021-04257-w>.
- [24]Alexander Miessen et al. *Benchmarking digital quantum simulations and optimization above hundreds of qubits using quantum critical dynamics*. 2024. arXiv: 2404.08053 [quant-ph].
- [25]Yuya O. Nakagawa et al. *ADAPT-QSCI: Adaptive Construction of Input State for Quantum-Selected Configuration Interaction*. 2023. arXiv: 2311.01105 [quant-ph].
- [26]Javier Robledo-Moreno et al. *Chemistry Beyond Exact Solutions on a Quantum-Centric Supercomputer*. 2024. arXiv: 2405.05068 [quant-ph].
- [27]Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki. “Energy-filtered random-phase states as microcanonical thermal pure quantum states”. In: *Physical Review B* 106.15 (Oct. 2022). ISSN: 2469-9969. DOI: 10.1103/physrevb.106.155111. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.106.155111>.
- [28]Kazuhiro Seki et al. *Simulating Floquet scrambling circuits on trapped-ion quantum computers*. 2024. arXiv: 2405.07613 [quant-ph].
- [29]Kazuya Shinjo et al. *Unveiling clean two-dimensional discrete time quasicrystals on a digital quantum computer*. 2024. arXiv: 2403.16718 [quant-ph].
- [30]Tomonori Shirakawa, Hiroshi Ueda, and Seiji Yunoki. *Automatic quantum circuit encoding of a given arbitrary quantum state*. 2021. arXiv: 2112.14524 [quant-ph].
- [31]Stasja Stanisic et al. “Observing ground-state properties of the Fermi-Hubbard model using a scalable algorithm on a quantum computer”. In: *Nature Communications* 13.1 (Oct. 2022). ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/s41467-022-33335-4. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-022-33335-4>.
- [32]Alessandro Summer et al. “Calculating the many-body density of states on a digital quantum computer”. In: *Phys. Rev. Res.* 6 (1 Jan. 2024), p. 013106. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.6.013106. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.6.013106>.
- [33]Brian Swingle and Nicole Yunger Halpern. “Resilience of scrambling measurements”. In: *Phys. Rev. A* 97 (6 June 2018), p. 062113. DOI: 10.1103/PhysRevA.97.062113. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.062113>.
- [34]Joseph Tindall et al. “Efficient Tensor Network Simulation of IBM’s Eagle Kicked Ising Experiment”. In: *PRX Quantum* 5.1 (Jan. 2024). ISSN: 2691-3399. DOI: 10.1103/prxquantum.5.010308. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PRXQuantum.5.010308>.

- [35]Joseph Vovrosh et al. “Simple mitigation of global depolarizing errors in quantum simulations”. In: *Phys. Rev. E* 104 (3 Sept. 2021), p. 035309. DOI: 10.1103/PhysRevE.104.035309. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.104.035309>.
- [36]天野、柚木、佐藤、谷本、小松、百瀬. 2022年度 新計算原理調査研究チーム調査報告書.” 文  
科省調査研究報告”. 2023.

# 第4章 量子コンピュータのシステムソフトウェア

## 4.1 量子HPC連携システム

昨年度の調査報告書に記したように、量子コンピュータと HPC の連携は、最終的には HPC アプリから、量子コンピュータの処理に適した一部を量子コンピュータにオフロードする方式が想定される。また、喫緊の課題として、NISQ の量子コンピュータを効果的に利用するためのトランスペイイル等の前処理やエラー処理等の後処理を HPC で行うことも考えられる。

HPC から量子コンピュータへのオフロードを行うために、量子コンピュータ側の API や認証を調査した。

### 4.1.1 HPC から量子コンピュータを利用する API

現在利用可能な量子コンピュータの多くは、REST-API を介してサービスを提供している。ユーザは WEB ブラウザを用いてジョブを投入するか、ローカル環境等にインストールされた SDK に含まれる REST-API をサポートするライブラリによってジョブを投入する。よって、HPC から量子コンピュータを利用するためには、量子コンピュータの側のサーバの REST-API の定義する方法でジョブを投入するのが簡便である。

### 4.1.2 HPC から量子コンピュータを利用する認証

HPC アプリケーションから処理の一部を量子コンピュータへカーネルをオフロードする場合、このアプリケーションを実行するものは HPC および量子コンピュータの両方の利用資格を持っている必要がある。将来的には HPCI や学認のようなシステムを用いて HPC および量子コンピュータの両者での同時もしくは非同期の統一的な認証が行えることが望ましいが、中短期的には、HPC の認証方法は ssh 公開鍵認証等の従来通りの手法とし、加えて、使う側の HPC のアプリケーション（の実行者）を使われる側である量子コンピュータに認証させることが現実的である。そこで、連携システムの設計のために、現時点での量子コンピュータのユーザ認証方法について調査した。

Amazon Braket のような商用クラウドを介して量子コンピュータを利用する場合、その認証やアクセス権の管理はクラウドサービスのそれに準じ、ブラウザを通してパスワード等を利用してログインしたのち、Jupyter Notebook 等と同じブラウザの上で利用して、量子アルゴリズムを実行する<sup>1)</sup>。Virtual Private Cloud (VPC) を介した利用の可能である。また、後述のトークン等を利用した認証が用いられる場合もある。

1) 商用クラウドベンダーと量子コンピュータベンダーが異なる場合、以降に述べるトークン等の認証をクラウド内部で別途おこなっていると考えられる

一方で、ユーザがローカルにインストールした量子 SDK から、直接、量子コンピュータ側のサーバに量子アルゴリズムの実行を依頼することも可能である。Qiskit 等の量子 SDK では、さまざまな量子コンピュータと通信するためのバックエンドが提供されている。この際の認証は、トークンと呼ばれる文字列が用いられる。ユーザはまずブラウザを通じてポールサイトにログインしてサービストークンを取得し、これを SDK 上のプログラムの適当な場所に貼りつけるか、もしくは指定されたファイルに保存する。トークンを通じた認証を提供している量子コンピュータは以下がある：

- IBM [45]
- IQM [47]
- IonQ [42]
- Rigetti [50]
- AQT Cirq [39]
- Pasqal [48]

パスワード認証から credentials を取得する方法を取っているものとしては以下がある：

- Quantinuum [49]

SDK を利用して、クラウドサービスの認証と連携した認証を行うものとしては以下がある：

- Google Quantum [43]

以上から、多くの量子コンピュータサービスはトークンに基づく認証を採用していることがわかる。HPC のプログラムから量子コンピュータに一部をオフロードする場合、HPC のプログラムがアクセス可能なところにトークンのファイルを置いて必要に応じて読み込むか、トークンをハードコードしてクライアントプログラムにリンクし、所定の API を介して認証を行うことが可能である。ただし、ユーザがローカルにインストールした量子 SDK を利用する場合と異なり、HPC のストレージは複数のユーザで共有されることが通常である。HPC のストレージについては、各 HPC の運営主体のポリシーに従ってパーミッション等のアクセスの管理はなされているが、トークンの管理には通常よりも慎重な扱いが必要である。

## 4.2 記述言語

量子コンピュータを利用する際のさまざまな段階における量子アルゴリズムの記述言語・中間表現について調査した。

量子 HPC 連携システムの提供と実装において重要な記述言語や方式は

- ユーザが量子アルゴリズムを記述する言語
- HPC から量子コンピュータに送られる言語・中間表現

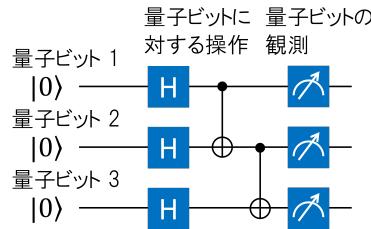


図 4.1 GUI による量子回路の記述

```

from qiskit import QuantumCircuit
qc = QuantumCircuit(5, 5, name="ghz")
qc.h(0)
for i in range(4):
    qc.cx(i, i + 1)
qc.barrier()
for i in range(5):
    qc.measure(i, i)
sim_backend = BasicSimulator()
job = sim_backend.run(
    transpile(qc, sim_backend), shots=1024)
result = job.result()
print("Basic simulator : ")
print(result.get_counts(qc))

from qulacs import QuantumState
qc = QuantumCircuit(5)
qc.add_H_gate(0)
for i in range(4):
    qc.add_CNOT_gate(i, i + 1)
state = QuantumState(5)
qc.update_quantum_state(state)
print(state)

```

図 4.2 Python により記述される回路の例。右が Qiskit[37]、左が Qulacs

であることから、以降はこれらについての調査結果を述べる。

#### 4.2.1 ゲート型量子コンピュータの記述言語

ゲート型量子コンピュータは、少数の量子ビットに作用する基本的な操作である量子ゲート操作によって、量子状態を望ましい状態に変化させることで計算を行う。量子コンピュータのプログラムは、量子回路とも呼ばれ、一連の量子ゲート操作とその対象となる量子ビットを並べたものである。ユーザレベルにおいては、GUI による回路記述、Python や C++ 等の既存言語による記述、独自の言語の記述が主に用いられる。

図 4.1 に GUI による量子回路の記述例を示す。典型的には、各横線を量子ビットとし、線上もしくは複数の線にまたがって、対応する量子ビットに作用する量子ゲート操作や観測操作を配置する。

図 4.2 に Python による量子回路の記述例を示す。多くの量子ハードウェアベンダーや量子シミュレータの開発者等が Python 等の既存言語により量子回路を記述する API を提供している。多

```

QUBITS 5
H 0
CNOT 0 1
CNOT 1 2
CNOT 2 3
CNOT 3 4
BEGIN MEASUREMENT

```

図 4.3 量子アセンブラー言語 bra

表 4.1 記述言語と中間表現 [46]

System	RQC (叢)	IBM	Quantinuum	IQM
User	qulacs, OpenQASM	qiskit	tket	qiskit
REST	OpenQASM	OpenQASM, qpy	OpenQASM, QIR	IQM transfer format

の場合、アプリケーションの開発者は量子回路クラスに対して順次ゲートオブジェクトを追加することで、量子回路を定義する。

図 4.3 に伊藤らによって開発された量子コンピュータシミュレータ ket に向けた独自の量子アセンブラー言語である bra を示す [41]。bra では、量子ビット数を提議した後に、ゲート操作およびそのオペランドを記述する。ループや分岐等のコントロールフローをもたないシンプルな言語である。量子アセンブラー言語としては、OpenQASM がよく知られるが、これについては次の節で述べる。

#### 4.2.2 量子コンピュータ側のサーバが受け取る記述言語・中間表現

量子コンピュータ側のサーバは、REST-API を介してユーザから量子回路を受け取り、これを適切にトランスパイルおよびコンパイルして、量子コンピュータの制御機に送り、実行させる。ユーザが量子 SDK 上で記述した量子回路は、そのままの形で量子コンピュータ側のサーバに送られることは少なく、特定の量子コンピュータ側のサーバがサポートする記述言語や中間表現に変換して、量子コンピュータ側のサーバに送信される。よって、量子 HPC 連携システムにおいて、HPC から量子コンピュータへカーネルをオフロードする場合にも、量子回路をそれぞれの量子コンピュータ側のサーバに合わせて変換する必要がある。

表 4.1 に、量子コンピュータおよびその SDK がサポートするユーザ向け記述言語（代表的なもの）と、量子コンピュータ側のサーバがサポートする記述言語もしくは中間表現を示す。広く用いられる中間表現である OpenQASM や QIR に加えて、量子コンピュータハードウェアベンダが定める独自形式も利用される。例えば、IBM の量子コンピュータでは、OpenQASM と qpy と呼ばれる直列化されたバイナリフォーマットをサポートする [38]。

図 4.4 に OpenQASM の記述例を 2 例示す。図の右に示すように、OpenQASM3 では、ループや分岐も定義されている [40]。

以上のように、ユーザレベルの記述言語は多様性に富むが、相互に変換が容易でありそのための

```

OpenQASM 3;

qubit[4] q;
bit b;
angle[4] theta = 0;
reset q;
h q;
barrier q;

h q[0];
cnot q[0], q[1];
cnot q[1], q[2];

c = measure q;
for i in [0:3]{
    theta >>=1;
    p(-theta) q[i];
    h q[i];
    measure q[i]->b;
    theta[3] = b;
}

```

図 4.4 OpenQASM の例

ツールも複数提供されている。量子コンピュータが受け取る中間言語は OpenQASM に加えてベンダ独自の中間表現である。また、ユーザレベルの記述言語から中間表現に変換するツールはベンダ等により提供されており、より容易である。よって量子 HPC 連携のためのプログラミング言語としては、広くつかわれる SDK がサポートする言語および OpenQASM の利用を想定し、ミドルウェアによって特定の量子コンピュータに向けた表現に変換することが妥当である。さらに、将来的には、量子コンピュータ側のサーバの負担を軽減し、量子コンピュータのする一プロットをあげるために、これらの変換やその先にある回路最適化を HPC 側に移行することも考えられる。

### 4.3 量子 HPC 連携のためのプログラミングとスケジューリング戦略

量子 HPC 連携に際しては、いずれも貴重な計算資源である量子コンピュータと HPC のスループットを最大化すること、とくに一方の計算結果を待つためにもう一方に待機時間が生じないようになることが重要である。本調査では、昨年度の報告に記したように、量子コンピュータと HPC の連携は、最終的には HPC アプリから、量子コンピュータの処理に適した一部を量子コンピュータにオフロードする方式が想定し、量子 HPC ハイブリッドアプリケーションに対してワークフローおよびタスクベースプログラミングの二階層からなるプログラミングモデルを設計した。図 4.5 に、量子 HPC 連携のためのプログラミングを示す。ワークフローにおけるタスクは、互いにプログラム開始時および終了時の入出力のみに依存関係を持つ独立のプログラムとする。このタスクはスーパーコンピュータではジョブに相当する。これらのジョブのうち、いくつかのジョブは遠隔手

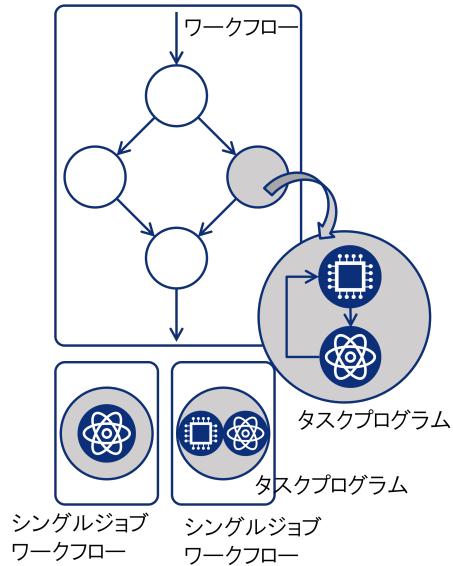


図 4.5 量子 HPC 連携のためのプログラミング

手続き呼び出し (Remote Procedure Call, RPC) による量子コンピュータへのオフロードを含む。これを QC ジョブと呼ぶものとする。また、MPI や OpenMP 等を用いて記述される並列のプログラムをジョブとすることもできる。ワークフローは粗粒度なタスクを扱う。ワークフローの実行エンジンは、

- ユーザによるジョブの依存関係の記述に従い
- スーパーコンピュータのジョブスケジューラと連携してジョブを投入する

ことが必要とされる。たとえば、Perl によるジョブ記術と管理を可能とする Xcrypt [44] などが利用可能である。

1 つの QC ジョブにおいて、HPC による制御に基づいて、RPC による量子コンピュータへのオフロードを行うことも可能である。また、オフロードに並行して OpenMP や MPI を用いて HPC でのタスクを実行することもできる。以降では、このような QC ジョブを HPC-QC ジョブと呼ぶ。ハイブリッドではなく量子コンピュータのみを利用するジョブは Simple-QC ジョブと呼ぶ。HPC-QC ジョブは図 4.5 の上に示すように、ワークフローの一部とすることも、HPC-QC ジョブのみを単独で実行するシングルジョブワークフローとしてすることも可能である。同様に図 4.5 の右下に示すように、Simple-QC ジョブをシングルワークフローとしても可能である。

ジョブの間の依存関係が比較的単純なワークフローを第一階層のワークフロープログラミングモデルで記述し、第二階層においてより密に連結した HPC と量子のタスクを細粒度タスクプログラムモデルで記述することを想定している。量子および HPC のいずれにおいても、ワークフローエンジンによってそれらを管理するジョブスケジューラにジョブとして投入されたジョブは、それぞれのジョブスケジューラのポリシーや戦略にしたがって適切にスケジューリングされ、それぞれの計算資源の利用率を高いレベルに保つことが期待される。コスケジューラ等を用いてワークフロー

全体の開始に合わせて HPC および量子コンピュータの計算時間を確保すると、HPC もしくは量子コンピュータがどちらかのジョブを待つためにアイドル状態となることが起こり得るが、本プログラミングモデルにおいては、それを回避することができる。

ただし、HPC-QC ジョブの場合は、さらなる考慮が必要である。量子コンピュータの混雑時に、HPC-QC ジョブの内部の HPC に向けたタスクが量子コンピュータに向けたタスクを待つ必要がある場合、ここで確保された HPC 側の計算資源はアイドルになってしまふ。HPC-QC ジョブのみコスケジューラを用いて、これらの計算資源を同時に確保することも一つの手段であるが、HPC-QC ジョブの内部での両コンピュータへのオフロードが少ない場合、今度は量子コンピュータ側がアイドルとなる恐れがある。本調査では、超伝導型の量子コンピュータの実行時間は、数千から数万ショットを実行する場合でも数秒から数十秒程度と非常に短いことに着目した。

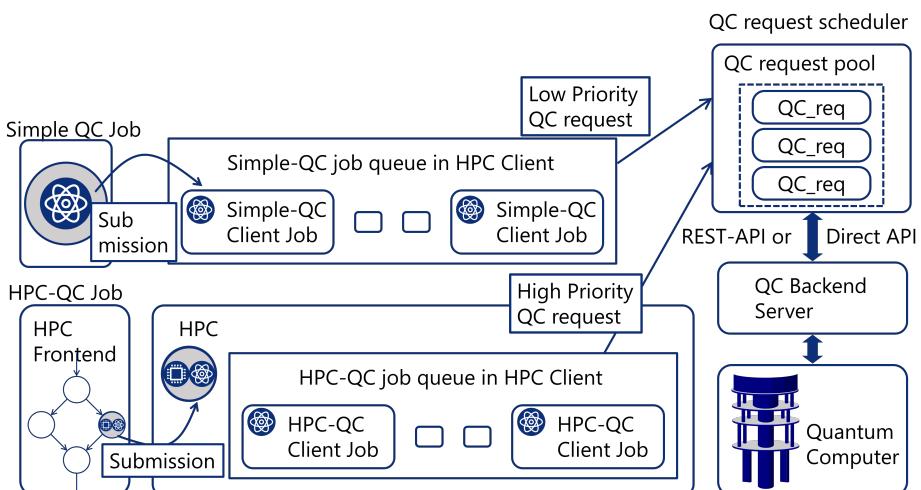


図 4.6 量子 HPC 連携のためのスケジューリング

図 4.6 に量子 HPC 連携のためのスケジューリング案を示す。量子コンピュータに向けたすべてのリクエストは RPC を介してリクエストスケジューラに集められる。このとき Simple-QC ジョブからのリクエストは低優先度とし、HPC-QC ジョブからのリクエストは高優先度とする。低優先度のジョブは何らかのスケジューリングポリシーにのっとって実行されるが、高優先度のジョブは即座に実行されるか、すでに実行中のジョブがある場合、その終了を待って実行される。すでに実行中のジョブが低優先度である場合でも、これは数秒から数十秒程度で終了することが想定されるため、割り込みなどの複雑な処理を設ける必要はない。ただし、HPC-QC ジョブが複数存在し、それぞれから量子コンピュータに対するリクエストが出されると、HPC-QC ジョブの間で量子コンピュータを取り合うことになるため、結果的に HPC 側に待ち時間が生じる可能性がある。これを防ぐため、HPC 側のジョブスケジューラによって、HPC-QC ジョブは 1 つもしくは少数に制限される。

ここで、デコヒーレンス時間の短い超伝導型の量子コンピュータは、量子回路の実行時間も短いが、性質の異なる量子コンピュータの場合は、量子回路の実行時間も異なる。たとえば、イオント

ラップ型の量子コンピュータの場合は、デコヒーレンス時間は数時間 [51] と長く、また、回路の実行にもより多くの時間を要し、1000 ショットで数時間かかる場合もある。このようなタイプの量子コンピュータを用いて量子 HPC アプリケーションを実行する場合には、第一階層のワークフローのみを用いることが推奨される。

## 参考文献

- [37]<https://github.com/Qiskit/qiskit/blob/main/examples/python/ghz.py>.
- [38]<https://docs.quantum.ibm.com/api/qiskit/qpy>.
- [39]*AQT Cirq Tutorial.* url[https://quantumai.google/cirq/hardware/aqt/getting\\_started](https://quantumai.google/cirq/hardware/aqt/getting_started).
- [40]Andrew Cross et al. “OpenQASM 3: A Broader and Deeper Quantum Assembly Language”. In: *ACM Transactions on Quantum Computing* 3.3 (Sept. 2022), pp. 1–50. ISSN: 2643-6817. DOI: [10.1145/3505636](https://doi.org/10.1145/3505636). URL: <http://dx.doi.org/10.1145/3505636>.
- [41]Hans De Raedt et al. “Massively parallel quantum computer simulator, eleven years later”. In: *Computer Physics Communications* 237 (2019), pp. 47–61. ISSN: 0010-4655. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.11.005>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465518303977>.
- [42]*Get started with Qiskit on IonQ Hardware.* <https://ionq.com/docs/get-started-with-qiskit>.
- [43]*Getting set up to use Google’s quantum processors.* <https://quantumai.google/cirq/tutorials/google/start>.
- [44]Tasuku Hirahisi et al. “Xcrypt: A Perl Extension for Job Level Parallel Programming”. In: *Second International Workshop on High-performance Infrastructure for Scalable Tools (WHIST)*. 2012.
- [45]*IBM Quantum.* <https://quantum.ibm.com/>.
- [46]*IQM. Integration Guide.* [https://github.com/iqm-finland/iqm-client/blob/main/INTEGRATION\\_GUIDE.rst](https://github.com/iqm-finland/iqm-client/blob/main/INTEGRATION_GUIDE.rst).
- [47]*IQM API.* <https://api.iqm.com/docs>.
- [48]*Pasqal hardware: Access and Authentication.* url<https://quantumai.google/cirq/hardware/pasqal/access>.
- [49]*Qiskit Quantinuum Provider.* <https://github.com/qiskit-community/qiskit-quantinuum-provider/blob/master/README.md>.
- [50]*Rigetti QCS API.* <https://docs.api.qcs.rigetti.com/>.
- [51]Manjin Zhong et al. “Optically addressable nuclear spins in a solid with a six-hour coherence time”. In: *Nature* 517 (2015), pp. 177–180. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature14025>.

# 第5章 量子コンピュータの現実化技術

## 5.1 NISQ コンピュータにおける誤り緩和手法

NISQ コンピュータにおいては、計算結果がノイズの影響を大きく受けるため、これを抑制することが重要である。これまでに複数のエラー抑制手法が提案されている。例えば、外挿法 [64]、確率誤り除去法 [64]、仮想蒸留法 [57, 58]、部分空間展開法 [60]、一般化部分空間展開法 [70] などが知られている。外挿法は、計算結果におけるノイズの影響が線形に結合されると仮定したうえで、ノイズの影響だけを独立に増大できると仮定した場合に外挿によりノイズがない場合の計算結果を推定する。これは実験の設計が容易である一方で、簡単なノイズモデルを仮定するため推定結果の正確さを保証できない。確率誤り除去法はノイズもモデルが既知である場合にそれを打ち消す逆演算を考えるものである。仮想蒸留法はノイジーな量子状態のコピーを複数用意可能な場合に、それらを使って寄与率の低い成分の影響を指数的に小さくする手法である。これらの手法は組合せて利用できる場合が多いが、その組合せ方が重要である。その方法として、一般化量子部分空間法が提案されている。これは複数のノイジーな量子状態を互いに作用させ、古典計算機による後処理を組み合わせることで最終出力を得るものである。

エラー抑制に関しては、その理論的な限界についても明らかになっており、高精度なエラー抑制のためには指数的なサンプル数が必要であることが示されている。このことは、従来型（古典）計算機に対する量子計算機の優越性、すなわち量子加速を考えるうえで重要な結果である。もちろん、量子計算機の実行コストが指数的に増加する場合であっても、その基準によっては量子加速が得られる可能性はある。

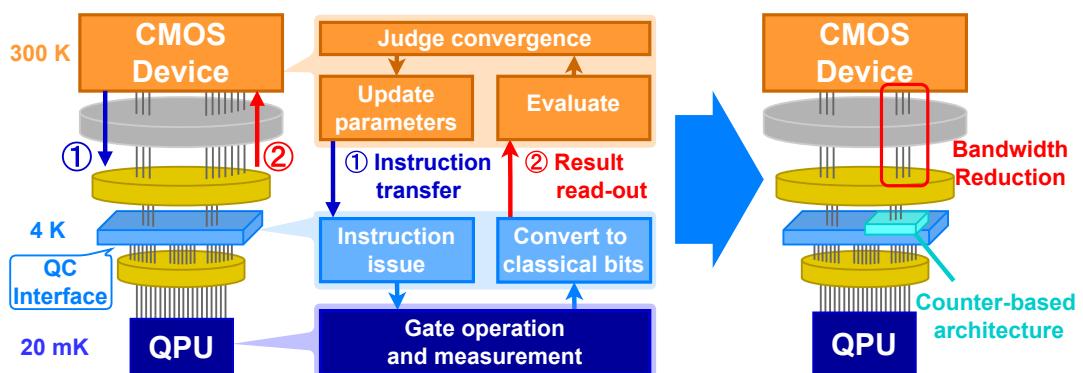


図 5.1 大規模化を志向した NISQ コンピュータ・システムの例 [66]

しかしながら、その交差点、すなわち損益分岐点は大きな問題サイズを必要とすることになる

[71]。図 5.1 に示すように、NISQ コンピュータの大規模化における諸問題を緩和するため、スケーラブルな NISQ コンピュータ・システムの提案がなされている [66]。その上で、真に検討すべき重要な問題は、そのような大きな問題サイズを指数コストで解くことができる計算機を実現するのがよいのか、誤り耐性のある量子計算機を目指すべきなのかであろう。

## 5.2 誤り耐性向上技術について

量子エラー訂正による誤り耐性量子計算機 (Fault-Tolerant Quantum Computer) の実現に向けた取り組みが本格化している。現在の主流は表面符号と呼ばれる二次元格子状に配置された量子ビットに埋め込み可能な符号である [59]。多数の物理ビットを用いて論理ビットを構成する。量子ビットをデータビットと、アンシラビットに二分し、エラーシンドローム測定によりデータビットの情報を間接的にアンシラビットから観測することでデータビットに生じている X もしくは Z エラーを推定することでエラー訂正する枠組みである。エラー推定処理は符号長に対して計算量の増加が大きく、FTQC 実現における大きな課題であると認識されている。例えば、表面符号においては、エラー推定処理の厳密解法は NP-hard であるため、最小重み完全マッチング (Minimum Weight Perfect Matching; MWPM) に帰着して解くことで精度のよい推定が可能である。しかしながら MWPM の計算オーダーは符号距離の 3 乗でスケールする。そのため、十分に良い論理エラーレートを実現するためには、エラー推定器の実行時間が FTQC の実行時間を決める律速要因になると考えられている。

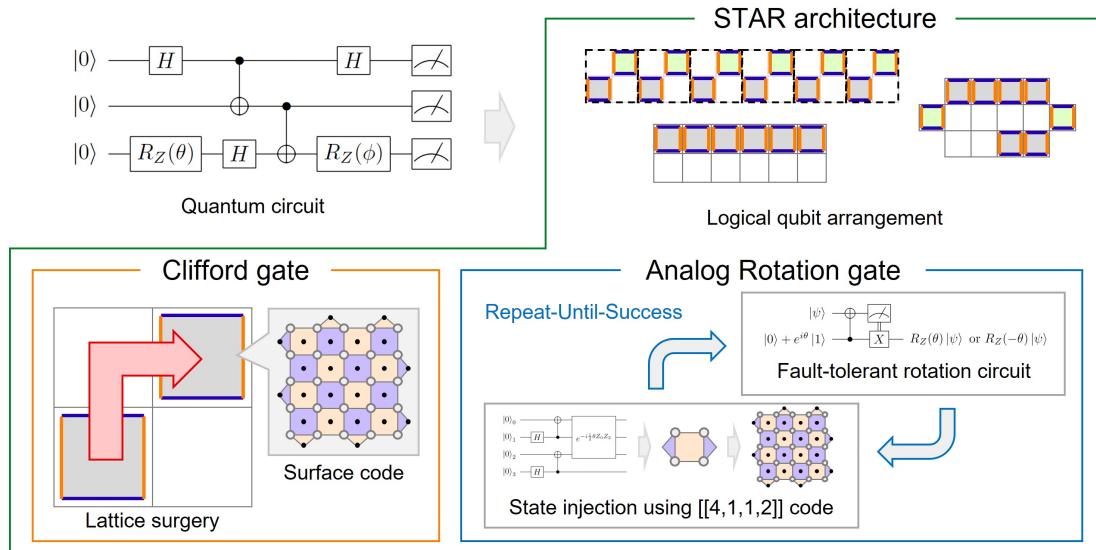


図 5.2 Early-FTQC システムの例 [52]

エラー訂正により、計算に活用可能な論理エラーレートの実現には膨大な数の物理ビットが必要となるため、エラー緩和技術と組合せることで早期に量子加速を実現する研究もおこなわれてい

る。例えば、図 5.2 に示す訂正のコストが小さいクリフォードゲートの訂正を行う手法 [52] や、エラー緩和と訂正の中間的な手法 [65] などが挙げられる。

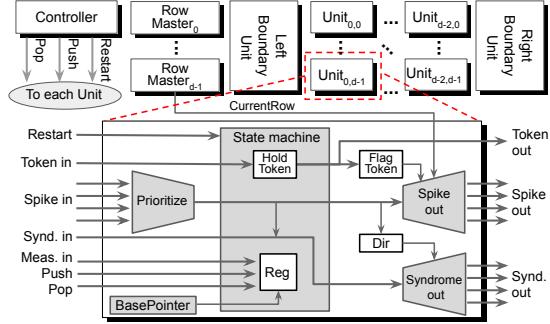


図 5.3 SFQ 回路を用いた誤り推定器の提案 [67]

表面符号はこれまでの研究の蓄積の結果、様々なエラー推定手法や、そのハードウェア実装方法の提案、複数論理ビットの操作方法など検討が進んでいる。例えば、極低温超伝導デジタル回路である Single-Flux Quantum (SFQ) 回路を用いた量子誤り推定器の提案 [56, 67, 68] やルックアップテーブルを用いた実装 [55] などが挙げられる。図 5.3 に示す推定器 [67] は SFQ 回路のパルス駆動という特徴を生かして、表面符号の推定に必要なマッチング問題を解く。

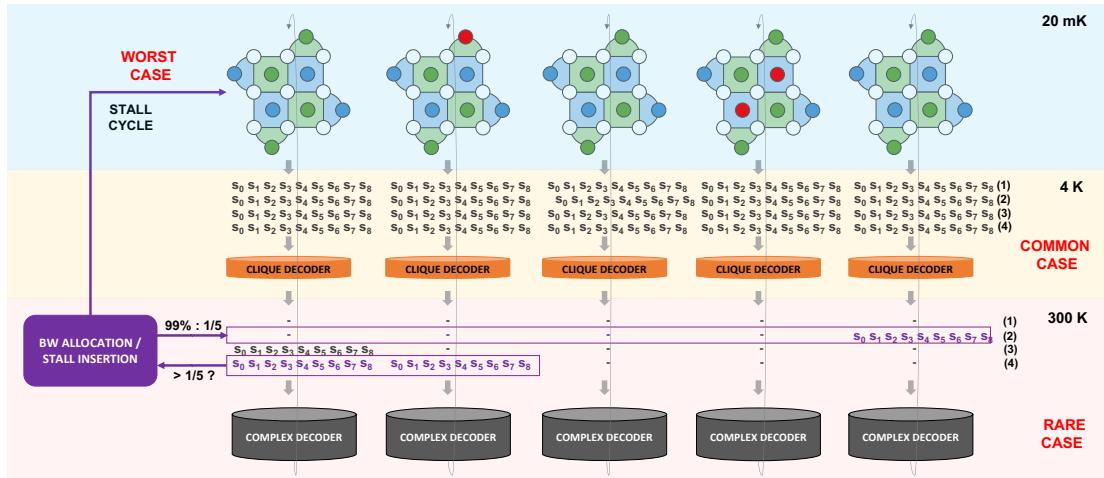


図 5.4 複数種の推定器を組み合わせた階層化工エラー推定システム [63]

さらには、図 5.4 に示すように、複数種のエラー推定アルゴリズムを組み合わせて階層化し、デコーディングシステム全体のスループットと推定精度（論理エラーレート）を両立することも提案されている [63]。しかしながら、符号化効率、すなわち物理ビット数に対する論理ビット数の比が悪い問題が指摘されており、量子 LDPC 符号 [53, 69] など、より符号化効率の優れた符号の探索が進んでいる。

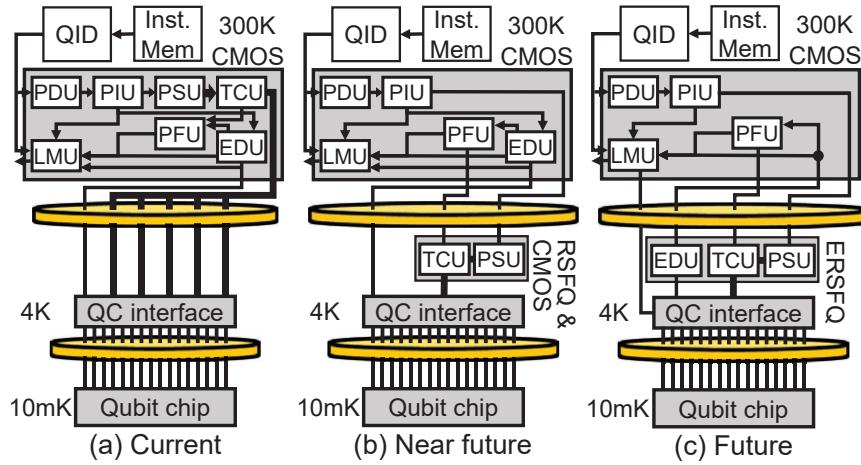


図 5.5 XQsim[54]におけるシステム設計空間

FTQC のシステムレベルでのスケーラビリティ探索は重要な課題である。システムを構成する要素技術の提案は様々なされているが、それらを組み合わせてシステムを構築した場合のスケーラビリティを評価することは一般に困難であるためである。この問題に取り組んでいる研究として、XQsim[54]、QIsim[61]などがある。XQsim では、極低温超伝導 FTQC を対象に、そのスケーラビリティにおける課題が冷凍機内外の通信バンド幅とエラー推定処理性能、それと 4 K ステージの熱散逸にあるとの分析を示している。その上で、設計制約下における量子ビット収容数（制御、観測可能な物理処理ビット数）を最大化するためのシステム・レベル設計最適化を行っている。この際、図 5.5(c) に示す通り、量子ビットに近い 4 K 温度ステージに SFQ 回路を導入することを提案している。QIsim では、量子古典インタフェースを対象としたスケーラビリティ分析を行っている。Intel Horse Ridge II[62] など CMOS デバイスを用いた極低温量子古典インタフェースが開発されているが、スケーラブルなシステム実装のためには SFQ 回路を用いて実装することが有効であるとの結果を示している。

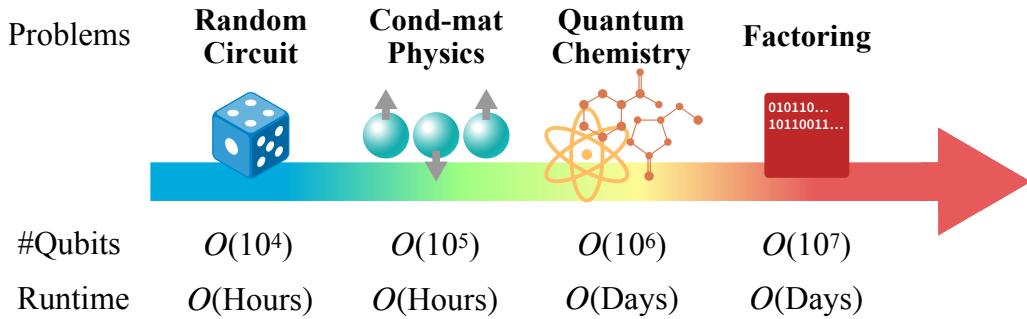


図 5.6 FTQC アプリケーションのリソース推定 [71]

これまでに述べた通り、FTQC を実現するためには、量子ビットデバイスの物理学的な研究のみならず、大規模化するためのエンジニアリング的な取り組みが不可欠である。それらは、スケーラ

ブルな量子古典インタフェースなどのエレクトロニクスや、誤り訂正符号の理論整備、量子エラー訂正アルゴリズムの実装など、様々な分野に渡っている。

さらには、社会実装可能なアプリケーションの整備とアプリケーション実行に必要なリソース（量子ビット規模、論理エラー率、実行時間など）の推定も重要である。図 5.6 に示す通り、FTQC が古典コンピュータと比較して初めに量子加速を実現するのは物性物理における問題であり、50 万物理量子ビット程度の FTQC が必要であると推定されている [71]。

現在、量子コンピュータ開発を牽引しているのは超伝導トランズモン型の量子ビットである。しかしながら、FTQC における量子加速を実現する量子ビットデバイスが他のデバイスである可能性も否定できない。FTQC 実現の成否は、スケーラブルに実装可能かつ量子加速に十分な規模を経済的に実現可能な量子人デバイスとそのシステム設計を確立できるかどうかにかかっていると思われる。

## 参考文献

- [52]Yutaro Akahoshi et al. “Partially Fault-Tolerant Quantum Computing Architecture with Error-Corrected Clifford Gates and Space-Time Efficient Analog Rotations”. In: *PRX Quantum* 5 (1 Mar. 2024), p. 010337. DOI: 10.1103/PRXQuantum.5.010337. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PRXQuantum.5.010337>.
- [53]Sergey Bravyi et al. “High-threshold and low-overhead fault-tolerant quantum memory”. In: *Nature* 627.8005 (Mar. 2024), pp. 778–782. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/s41586-024-07107-7. URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07107-7>.
- [54]Ilkwon Byun et al. “XQsim: modeling cross-technology control processors for 10+K qubit quantum computers”. In: *Proceedings of the 49th Annual International Symposium on Computer Architecture*. ISCA ’22. New York, New York: Association for Computing Machinery, 2022, pp. 366–382. ISBN: 9781450386104. DOI: 10.1145/3470496.3527417. URL: <https://doi.org/10.1145/3470496.3527417>.
- [55]Poulami Das, Aditya Locharla, and Cody Jones. “LILLIPUT: a lightweight low-latency lookup-table decoder for near-term Quantum error correction”. In: *Proceedings of the 27th ACM International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems*. ASPLOS ’22. Lausanne, Switzerland: Association for Computing Machinery, 2022, pp. 541–553. ISBN: 9781450392051. DOI: 10.1145/3503222.3507707. URL: <https://doi.org/10.1145/3503222.3507707>.
- [56]Adam Holmes et al. “NISQ+: boosting quantum computing power by approximating quantum error correction”. In: *Proceedings of the ACM/IEEE 47th Annual International Symposium on Computer Architecture*. ISCA ’20. Virtual Event: IEEE Press, 2020, pp. 556–569. ISBN: 9781728146614. DOI: 10.1109/ISCA45697.2020.00053. URL: <https://doi.org/10.1109/ISCA45697.2020.00053>.

- [57]William J. Huggins et al. “Virtual Distillation for Quantum Error Mitigation”. In: *Phys. Rev. X* 11 (4 Nov. 2021), p. 041036. DOI: 10.1103/PhysRevX.11.041036. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.11.041036>.
- [58]Bálint Koczor. “Exponential Error Suppression for Near-Term Quantum Devices”. In: *Phys. Rev. X* 11 (3 Sept. 2021), p. 031057. DOI: 10.1103/PhysRevX.11.031057. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.11.031057>.
- [59]Daniel Litinski. “A Game of Surface Codes: Large-Scale Quantum Computing with Lattice Surgery”. In: *Quantum* 3 (Mar. 2019), p. 128. ISSN: 2521-327X. DOI: 10.22331/q-2019-03-05-128. URL: <https://doi.org/10.22331/q-2019-03-05-128>.
- [60]Jarrod R. McClean et al. “Hybrid quantum-classical hierarchy for mitigation of decoherence and determination of excited states”. In: *Phys. Rev. A* 95 (4 Apr. 2017), p. 042308. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.042308. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.95.042308>.
- [61]Dongmoon Min et al. “QIsim: Architecting 10+K Qubit QC Interfaces Toward Quantum Supremacy”. In: *Proceedings of the 50th Annual International Symposium on Computer Architecture*. ISCA ’23. Orlando, FL, USA: Association for Computing Machinery, 2023. ISBN: 9798400700958. DOI: 10.1145/3579371.3589036. URL: <https://doi.org/10.1145/3579371.3589036>.
- [62]Jong-Seok Park et al. “13.1 A Fully Integrated Cryo-CMOS SoC for Qubit Control in Quantum Computers Capable of State Manipulation, Readout and High-Speed Gate Pulsing of Spin Qubits in Intel 22nm FFL FinFET Technology”. In: *2021 IEEE International Solid-State Circuits Conference (ISSCC)*. Vol. 64. 2021, pp. 208–210. DOI: 10.1109/ISSCC42613.2021.9365762.
- [63]Gokul Subramanian Ravi et al. “Better Than Worst-Case Decoding for Quantum Error Correction”. In: ASPLOS 2023. Vancouver, BC, Canada: Association for Computing Machinery, 2023, pp. 88–102. ISBN: 9781450399166. DOI: 10.1145/3575693.3575733. URL: <https://doi.org/10.1145/3575693.3575733>.
- [64]Kristan Temme, Sergey Bravyi, and Jay M. Gambetta. “Error Mitigation for Short-Depth Quantum Circuits”. In: *Phys. Rev. Lett.* 119 (18 Nov. 2017), p. 180509. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.180509. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.180509>.
- [65]Kento Tsubouchi et al. “Virtual quantum error detection”. In: *Physical Review A* 108.4 (Oct. 2023). ISSN: 2469-9934. DOI: 10.1103/physreva.108.042426. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.108.042426>.
- [66]Yosuke Ueno et al. “Inter-Temperature Bandwidth Reduction in Cryogenic QAOA Machines”. In: *IEEE Computer Architecture Letters* 23.1 (2024), pp. 9–12. DOI: 10.1109/LCA.2023.3322700.
- [67]Yosuke Ueno et al. “QECCOOL: On-Line Quantum Error Correction with a Superconducting Decoder for Surface Code”. In: *2021 58th ACM/IEEE Design Automation Conference (DAC)*. San Francisco, CA, USA: IEEE Press, 2021, pp. 451–456. DOI: 10.1109/DAC18074.2021.9586326. URL: <https://doi.org/10.1109/DAC18074.2021.9586326>.

- [68]Yosuke Ueno et al. “QULATIS: A Quantum Error Correction Methodology toward Lattice Surgery”. In: *2022 IEEE International Symposium on High-Performance Computer Architecture (HPCA)*. 2022, pp. 274–287. DOI: [10.1109/HPCA53966.2022.00028](https://doi.org/10.1109/HPCA53966.2022.00028).
- [69]Qian Xu et al. *Constant-Overhead Fault-Tolerant Quantum Computation with Reconfigurable Atom Arrays*. 2023. arXiv: 2308.08648 [quant-ph].
- [70]Nobuyuki Yoshioka et al. “Generalized Quantum Subspace Expansion”. In: *Phys. Rev. Lett.* 129 (2 July 2022), p. 020502. DOI: [10.1103/PhysRevLett.129.020502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.129.020502). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.129.020502>.
- [71]Nobuyuki Yoshioka et al. “Hunting for quantum-classical crossover in condensed matter problems”. In: *npj Quantum Information* 10.1 (Apr. 2024), p. 45. ISSN: 2056-6387. DOI: [10.1038/s41534-024-00839-4](https://doi.org/10.1038/s41534-024-00839-4). URL: <https://doi.org/10.1038/s41534-024-00839-4>.



# 第6章 量子コンピュータシミュレータ

## 6.1 はじめに

デジタル革新の進展に伴い、日々生成されるデータ量は増大し、複雑さを増している。これらを高速に処理するためにコンピューティングパワーが一層求められるようになっている。現状のコンピューティング性能の向上を支えているシリコン半導体の微細化技術は限界に近付きつつあり、従来のコンピュータとは全く異なる原理で計算を行う「量子コンピュータ」への期待が高まっている。「量子コンピュータ」は、究極ともいえる並列処理が可能と考えられており、従来のコンピュータでは計算量が爆発して有限の時間での計算の実行が困難な問題を解決できるのではないかと期待され、実用化に向けた研究開発競争がグローバルに展開されている。量子現象を活用するコンピュータには、動作原理の違いにより、汎用的な量子ゲート方式と、組合せ最適化問題に特化したイジングマシン方式の二つに分けることができる。本項では、特に断らない限り、量子コンピュータと表記した場合は、量子ゲート方式の量子コンピュータを指す。量子ゲート方式は、超伝導方式のほか、電場でトラップしたイオンを使う方式、中性原子方式、シリコン量子ドット方式、ダイヤモンドスピン方式など、様々な方式が提案され、世界中で研究が拡大している。

2019年にGoogleが、超伝導方式の量子コンピュータを用いて量子超越性を達成したと発表して以降[73]、IBMが433量子ビットチップOspreyを搭載した量子コンピュータを発表するなど[125]、世界レベルでの研究開発が活発になるとともに、搭載される量子ビット数も年々増加している。日本国内においても、2023年3月に理化学研究所を中心とする研究グループが、超伝導方式の64量子ビット量子コンピュータを国産初号機として公開したのを契機[142]として、10月に理研RQC—富士通連携センター[141]、12月に大阪大学の研究グループ[139]から、64量子ビットの超伝導量子コンピュータが立て続けて公開されている。2024年の時点で、最も大規模化が進んでいる超伝導以外の方式でも、様々な方式の量子コンピュータの研究開発が活発で、利用できる量子ビット数はまだ多くはないものの、研究者がクラウド経由で利用可能な量子コンピュータは増えている。

量子ゲート方式の量子コンピュータは、従来コンピュータのように、汎用的な計算プログラムを実行することができる方式であるが、全ての計算プログラムが高速に実行できるわけではない。量子ゲート方式の量子コンピュータの性能を引き出して、最大限發揮させるには、量子コンピュータ上で高速に処理できる、量子コンピュータ専用の量子アルゴリズムを開発する必要がある。現在クラウド上で利用可能な量子コンピュータを用いて、従来コンピュータの限界性能を凌駕できる量子アルゴリズム確立を目指して、世界各地で量子ソフトウェアの研究開発が進められている。しかし、クラウド経由で利用できる量子コンピュータは限られており、多くの研究者が量子コンピュータに自由にアクセスできない状態であるとともに、利用のためのコストも高額となっている。また

現行の量子コンピュータの演算に用いられる量子ビットは、様々なノイズの影響を受けてエラーを発生しやすく、計算ステップごとにエラーが重畠するため、実用的なアルゴリズム開発に利用しにくい問題点がある。

従来コンピュータ上で、量子コンピュータを模倣する量子コンピュータシミュレータは、現状利用できる量子ビット数は少なく、量子加速を用いた高速な計算処理はできないものの、エラーフリーで計算できるメリットがある。従って量子シミュレータを用いた研究開発は、実用的な量子コンピュータが出現するまでの間、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と考えられる。

## 6.2 量子シミュレータの推定市場規模

Persistence Market Researchによれば、エンタープライズ向け量子コンピューティングハードウェア、クラウドシステムより提供されるソフトウェアコンポーネントなどの量子コンピューティング産業全体で、2023年の418.0百万米ドルから、2033年に1505.7百万米ドル、CAGR13.7パーセントの大きな比率で市場規模が伸長すると予測されている [111]。その中で、量子シミュレーション&量子テストアプリケーションなどの量子ソフトウェア分野は、2022年に39.9%の市場シェアを占めたと推定されている。これらの商用利用には、エンドユーザ側の研究開発活動の支援、企業要件に基づく量子コンピューティング、量子アプリケーションの開発およびテスト、量子シミュレータによる量子コンピュータの挙動や、量子アルゴリズムの実行などの取り組みが含まれている。

## 6.3 量子シミュレータの分類

### 6.3.1 状態ベクトル型量子コンピュータシミュレータ

現在、最も一般的に利用されている量子シミュレータは、状態ベクトル型 (state vector) である。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である。現状は、IBMのQiskit Aer[108]やQulacs[124]などが稼働している。行列ベクトル演算を高速に行うためにGPUを活用することもできる[78]。例えば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が必要である。この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であると言える。富士通はMPI通信を用いて複数ノードにまたがるメモリ空間をまとめて活用する手法で状態ベクトル型の量子シミュレータの拡張を続け、2024年の時点で、常設のシステムとしては世界最大級となる、40量子ビットの量子コンピュータシミュレータを運用している [93]。計算に必要なメモリ量は量子ビット数に対して指数的に増加するため、例えば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である。

### 6.3.2 テンソルネットワーク型量子コンピュータシミュレータ

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を解決するために、いくつかの手法が提案されている。その一つがテンソルネットワーク型で、状態ベクトルを MPS(Matrix Product State, 行列積状態)[129] 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 [106] である。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という欠点がある。本手法は、特に量子機械学習で活用されている [98], [90]。

### 6.3.3 決定グラフ型量子コンピュータシミュレータ

決定グラフ型は、論理関数を表現するためのデータ構造として古くから用いられてきたが [81], [86]、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することも可能である [100]。グラフ構造を用いることで、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できる。しかし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。実装として DDSIM[134] や SliQSim[126] が有名である。富士通では、マルチスレッド化に対応した決定グラフ型量子シミュレータを開発している [96]。加えて、QCBM (ランダム回路)、QASM Bench、VQE、Shor、Grover などの様々な種類のアルゴリズムを用いて決定グラフ型と状態ベクトル型の実行時間を比較し、特性の違いを理解することで、種々のシミュレータを組合せて利用した場合に、アルゴリズム開発をより効率的に行うことが出来るようになる研究を推進している [140]。

## 6.4 稼働している量子シミュレータ

2024 年時点で、利用されている量子シミュレータを表 6.1、表 6.2 にまとめた。利用者は、クラウド経由で量子シミュレータに計算ジョブを投入する形で利用している。利用の形態は、既に仮想マシン課金やタスク課金などの商用の形で提供されているものもあれば、無償で提供されているもの、コミュニティ内の専用システムとして運用されているものなど様々である。各システムの詳細については、表中に文献番号を付与しているので、そちらを当たられたい。これらの参考文献は 2024 年 3 月時点で、インターネット上で公開されている情報をベースにまとめている点も注意されたい。

量子コンピュータシミュレータの一例として、富士通で稼働している状態ベクトル型システムの概要を紹介する。量子コンピュータシミュレータは、量子ビットの状態変化を通常のコンピュータ上でシミュレーションするシステムで、量子ビットの状態をメモリ上の数値として表現している。ビット数が増えるごとに、取りうる状態の空間が $2^n$ で広がるので、量子ビット数を増やすためには膨大なメモリおよびそれらに対する演算が必要となる。例えば、40 量子ビットで 16 TiB が必要であるため、なるべく多くの量子ビットを計算で利用できるようにするためにクラスタ型計算機が不可欠である。富士通では、スーパーコンピュータ「富岳」で用いられている高性能計算向け Arm CPU を採用したサーバを用いてクラスタを構築している [138]。ソフトウェアは全ての要素を

OSS で構成しており、全計算資源はジョブスケジューラを介して利用する形で提供している。40 量子ビットシミュレーションジョブを実行する場合、ほぼ全てとなる 1024 ノードを使用する必要があるため、それを投入すると実行前・実行中に他のジョブの実行が滞る課題がある。富士通では、タイムスライス実行により大規模ジョブを効率的に実行できる機能を実現して提供している。大規模ジョブを他ジョブと細粒度タイムスライス実行することで、ほぼ全系を占める 40 量子ビットジョブをいつでも円滑に実行でき、計算ノード利用率を向上させている。タイムスライス実行のためには、全てのノードで高精度なジョブ状態の同期が必要となるが、富士通では細粒度タイムスライス実行機能を Slurm と統合させ、大規模環境においても高精度にジョブ切り替えを行う機構を開発しており、キューを指定してジョブを投入するだけで利用可能としている [138]。

表 6.1 稼働している量子シミュレータその 1

提供元	シミュレータ名	Default Framework	State Vector (qubit 数)	Tensor Network (qubit 数)	他方式 (qubit 数)	文献
IBM	Qiskit Aer	Qiskit	32	100	Stabilizer (5000)	[92]
Google	Cirq	Cirq	built-in 20, qsim 45	-	QVM	[88]
Amazon	Amazon Braket	Amazon Braket	オンプレ 25, クラウド 34	50	DM (オンプレ 12, クラウド 17)	[80]
Microsoft	Sparse Simulator	QDK	110	-	-	[99]
Intel	Intel QS	Intel QSDK	40	x	x	[94]
NVIDIA	cuQuantum	CUDA Quantum	50	1668	-	[103]
Atos	QLME Appliance	QLM	オンプレ 41 クラウド 38	x	x	[76]
Rigetti	QVM	Forest SDK	26	-	DM(26)	[120]
IonQ	Simulator	IonQ Quantum Cloud	25	-	-	[95]
Quantinuum	System Model H1 Emulator	TKET	20	x	Stabilizer	[110]
Xanadu	lightning	PennyLane	○	x	x	[132]
	Jet	PennyLane	x	○	x	[133]
National Supercomputing Center(China)	-	-	-	10x10	-	[97]
Alibaba	TaiZhang2.0	ACQDP	-	○	-	[72]

表 6.2 稼働している量子シミュレータその 2

提供元	シミュレータ名	Default Framework	State Vector (qubit 数)	Tensor Network (qubit 数)	他方式 (qubit 数)	文献
Huawei	HiQ3.0 All-in-one QS server	HiQ Quantum Computing Cloud Platform	42	81	-	[89]
Quantum Origin	Wuben	Panda 2	-	○	-	[105]
Baidu	QCompute	Quantum Leaf				[77]
QuTech	QXSimulator	-	-	-	-	[117]
QunaSys	Qulacs	-	○	x	-	[124]
Univ. Oxford	QuEST	-	38	-	-	[107]
ETH	ProjectQ	ProjectQ	45	-	-	[135]
Jurich スパコン センター	JUQCS-G	-	○	-	-	[130]
QuantEx プロジェクト	QXTool	-	-	○	-	[109]
NASA	qFlex	-	-	○	-	[102]
富士通	Fujitsu Quantum Simulator	mpiQulacs	40	○	Decision Diagram	[93] [96]

## 6.5 量子コンピュータシミュレータのユースケース

量子コンピュータシミュレータは、現状、利用できる量子ビットが数十量子ビットに限られることが、量子の性質を利用して計算を加速させることができないが、現状の量子コンピュータでの大きな課題となっている、量子ビットへのノイズの影響がなく、エラーフリーで量子計算が実行できる特徴がある。実用的な計算に必要な量子ビット数やパフォーマンスは不足しているものの、新規に開発した量子アルゴリズムの正しさの検証や、量子アルゴリズムのパフォーマンスの検証のために活用されている。表 6.3、表 6.4 に量子コンピュータのユースケースとして公開されている情報をまとめた。

活用されている分野は、物流配送問題や生産ラインの最適化、新材料開発に向けた量子化学計算、金融商品の価格設定、薬物の分子シミュレーションなど、材料開発、金融、創薬のそれぞれの分野で、先駆的な研究に活用されている。量子コンピュータ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も開催されている。その取り組みの一つとして、富士通で2023年に開催された Fujitsu Quantum Simulator Challengeについて紹介する[87]。量子アプリケーション開発においては、量子コンピュータシミュレータ利用者からのフィードバックを得ることが大変重要であり、量子コンピュータシミュレータのリソースを一部開放し、応募があった研究機関や大学、企業が様々な分野で量子アプリケーション開発を競い、そのフィードバックを得ることを目的として開催した。スタートアップや大学を中心に17の国と地域の43チームから応募があり、量子コンピュータシミュレータ上で取り組む問題解決の革新性や社会課題への貢献性などが評価された20チームにより、2023年6月から9月にかけて、39量子ビットの量子コンピュータシミュレータ上でそれぞれが設定した問題解決テーマに取り組み、成果が競われた。上位に入賞したチームの研究内容は、以下の通りとなっている。

#### <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な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し、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て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。

量子計算と相性の良い、材料開発や創薬分野の量子化学計算の事例以外にも、計算規模はまだ大きくはないが、様々な領域に、量子コンピュータシミュレータのユースケースは広がりつつある。

表 6.3 量子コンピュータシミュレータのユースケース（その 1）

利用者	分野	検討項目	参考文献
ExxonMobil	最適化	配送最適化、VQE、QAOA、ADMM	[91]
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	[128]
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	[83]
Airbus-BMW Group	航空 自動車	量子シミュレーションによる腐食抑制、量子最適化に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	[121]
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)	[85]
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)	[122]
Goldman Sachs	金融	金融契約の価格設定、モンテカルロ法	[127]
ENEOS/QunaSys	材料科学	触媒研究、分子振動解析	[84]
BASF	材料科学	分子シミュレーション	[123]
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	[123]
HP	材料科学	量子化学における磁気相転移	[123]
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	[118]
University of Applied Sciences Upper Austria	基礎検討	暗号プロセス改善、情報セキュリティ	[74]
The Centre of Computation Research and Technology (CCRT)	基礎検討	Sim、ビッグデータ、AI、機械学習、等	[82]
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	[75]
Oak Ridge National Laboratory (ORNL)	基礎検討	化学、材料科学、生物学などの物理学、応用科学、データ科学	[104]

表 6.4 量子コンピュータシミュレータのユースケース（その 2）

利用者	分野	検討項目	参考文献
Moody's Analytics and Imperial College London	金融	不況予測、量子機械学習	[119]
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	[110]
JSR	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	[114]
Volkswagen	材料科学	電池材料検討、量子位相推定	[132]
BMW	自動車	量子機械学習	[133]
Menten AI	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	[131]
旭化成	材料科学	量子化学計算、業務効率化、機械学習	[101]
凸版印刷	基礎検討	光量子計算の高速化	[136]
博報堂 DY ホールディングス	最適化	最適輸送問題	[137]
富士フィルム／慶應大	材料科学	量子化学計算、QPE	[79]
JXTG ホールディング	材料科学	材料開発、最適化、機械学習	[115]
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	[112]
パナソニックホールディングス	材料科学	準粒子バンド計算、量子化学計算、VQE + QSE	[116]
富士通	材料科学	グリーン関数を用いた物性計算、LVQC	[113]

## 6.6 まとめ

本章では、量子コンピュータシミュレータの現在の活用状況をまとめた。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あり、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となっているが、他には流体工学や金融分野、への応用が始まっている。位置づけとしては、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、従来のコンピュータでは計算量が爆発して有限の時間での計算の実行が困難な問題を解決できる、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したい。

## 参考文献

- [72]Alibaba. “alibaba-acqdp”. In: (). URL: <https://github.com/alibaba/acqdp>.
- [73]F. Arute et al. “Quantum supremacy using a programmable superconducting processor”. In: *Nature*, 574 (7779 Oct. 2019), p. 505. DOI: 10.1038/s41586-019-1666-5. URL: <https://www.nature.com/articles/s41586-019-1666-5>.
- [74]“Atos delivers new quantum simulator to leading University in Austria”. In: (July 2018). URL: [https://atos.net/en/2018/press-release/general-press-releases\\_2018\\_07\\_02/atos-delivers-new-quantum-simulator-leading-university-austria](https://atos.net/en/2018/press-release/general-press-releases_2018_07_02/atos-delivers-new-quantum-simulator-leading-university-austria).
- [75]“Atos delivers one of the most powerful quantum simulators in the world to Hartree Centre in the UK”. In: (Feb. 2019). URL: [https://atos.net/en/2019/press-release\\_2019\\_02\\_05/atos-delivers-one-powerful-quantum-simulators-world-hartree-centre-uk](https://atos.net/en/2019/press-release_2019_02_05/atos-delivers-one-powerful-quantum-simulators-world-hartree-centre-uk).
- [76]Ats. “Quantum Learning Machine”. In: (). URL: [https://atos.net/wp-content/uploads/2023/02/QLM\\_brochure.pdf](https://atos.net/wp-content/uploads/2023/02/QLM_brochure.pdf).
- [77]Baidu. “Baidu-QCompute”. In: (). URL: <https://github.com/baidu/QCompute>.
- [78]H. Bayraktar et al. “cuQuantum SDK: A High-Performance Library for Accelerating Quantum Science,” in: (2023). URL: <https://arxiv.org/abs/2308.01999>.
- [79]blueqat. “富士フィルム株式会社様、慶應義塾大学様と量子化学計算のFTQC アルゴリズムを GPU シミュレータで実行”. In: (Jan. 2024). URL: [https://blueqat.com/blueqat\\_official\\_news\\_ja/a6570e84-37c9-4007-a4cc-7bf89bec4c89](https://blueqat.com/blueqat_official_news_ja/a6570e84-37c9-4007-a4cc-7bf89bec4c89).
- [80]Amazon Braket. “Amazon Braket”. In: (). URL: <https://docs.aws.amazon.com/braket/latest/developerguide/braket-devices.html>.
- [81]R. E. Bryant. “Graph-Based Algorithms for Boolean Function Manipulation”. In: *IEEE Transactions on Computers* C-35 (8 Aug. 1986), p. 677. DOI: 10.1109/TC.1986.1676819. URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/1676819>.
- [82]“CEA uses Atos simulator at the CCRT to explore the potential of quantum computing in industry”. In: (June 2018). URL: [https://atos.net/en/2018/press-release\\_2018\\_06\\_27/cea-uses-atos-simulator-ccrt-explore-potential-quantum-computing-industry](https://atos.net/en/2018/press-release_2018_06_27/cea-uses-atos-simulator-ccrt-explore-potential-quantum-computing-industry).
- [83]H. Celoria. “A guide to BMW’s Quantum Computing for Automotive Challenges”. In: (July 2022). URL: <https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/a-guide-to-bmw-quantum-computing-for-automotive-challenges/>.
- [84]“ENEOS leads the way to sustainable hydrogen fuel by validating computing algorithms using Azure Quantum”. In: (June 2022). URL: <https://customers.microsoft.com/ja-jp/story/1508526643598641548-eneos-energy-azure-quantum>.
- [85]P. et al. Ettenhuber. “Towards practical molecular electronic structure simulations on NISQ devices with Amazon Braket and Kvantify’s FAST-VQE algorithm”. In: (Nov. 2023). URL:

<https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/towards-practical-molecular-electronic-structure-simulations-on-nisq-devices-with-amazon-braket-and-kvantifys-fast-vqe-algorithm/>.

- [86]M. Fujita, P. C. McGeer, and J. C.-Y. Yang. “Multi-Terminal Binary Decision Diagrams: An Efficient Data Structure for Matrix Representation”. In: *Formal Methods in System Design* 10 (2 Apr. 1997), p. 149. DOI: 10.1023/A:1008647823331. URL: <https://link.springer.com/article/10.1023/A:1008647823331>.
- [87]Fujitsu. “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”. In: (Jan. 2024). URL: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2024/01/25.html>.
- [88]Google. “Cirq”. In: (). URL: <https://quantumai.google/cirq>.
- [89]Huawei. “HiQ 量子☒算云服☒”. In: (). URL: <https://hiq.huaweicloud.com/home>.
- [90]W. Huggins et al. “Towards quantum machine learning with tensor networks”. In: *Quantum Science and Technology* 4 (2 Jan. 2019), p. 024001. DOI: 10.1088/2058-9565/aaea94. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2058-9565/aaea94/meta>.
- [91]IBM. “ExxonMobil strives to solve complex energy challenges”. In: (). URL: <https://www.ibm.com/case-studies/exxonmobil>.
- [92]IBM. “qiskit-aer”. In: (). URL: <https://github.com/Qiskit/qiskit-aer>.
- [93]S. Imamura et al. “mpiQulacs: A Distributed Quantum Computer Simulator for A64FX-based Cluster Systems”. In: (2022). URL: <https://arxiv.org/abs/2203.16044>.
- [94]Intel. “intel-qs”. In: (). URL: <https://github.com/iqusoft/intel-qs>.
- [95]IonQ. “IonQ”. In: (). URL: [https://docs.olcf.ornl.gov/quantum/quantum\\_systems/ionq.html](https://docs.olcf.ornl.gov/quantum/quantum_systems/ionq.html).
- [96]S. Li et al. “Parallelizing quantum simulation with decision diagrams”. In: *IEEE Transactions on Quantum Engineering* 5 (Feb. 2024), p. 2500212. DOI: 10.1109/QSW59989.2023.00026.
- [97]Y. et al. Liu. “Closing the “Quantum Supremacy” Gap: Achieving Real-Time Simulation of a Random Quantum Circuit Using a New Sunway Supercomputer”. In: (Nov. 2021). URL: <https://arxiv.org/pdf/2110.14502.pdf>.
- [98]J. R. McClean et al. “Barren plateaus in quantum neural network training landscapes”. In: *Nature Communications* 9 (1 Nov. 2018), p. 4812. DOI: 10.1038/s41467-018-07090-4. URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-018-07090-4>.
- [99]Microsoft. “Sparse quantum simulator”. In: (). URL: <https://learn.microsoft.com/en-us/azure/quantum/sparse-simulator>.
- [100]D. Miller and M. Thornton. “QMDD: A Decision Diagram Structure for Reversible and Quantum Circuits”. In: *36th International Symposium on Multiple-Valued Logic (ISMVL’ 06)* 10 (May 2006), p. 30. DOI: 10.1109/ISMVL.2006.35. URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/1623982>.

- [101]Y. Minato. “旭化成様の量子コンピュータにおける先進的取り組み、量子化学から量子機械学習まで”. In: (May 2021). URL: [https://blueqat.com/yuichiro\\_minato2/4041b240-f8fa-432b-87be-3bb95607a978](https://blueqat.com/yuichiro_minato2/4041b240-f8fa-432b-87be-3bb95607a978).
- [102]“ngnrsaa-qflex”. In: (). URL: <https://github.com/ngnrsaa/qflex>.
- [103]NVIDIA. “NVIDIA-cuQuantum”. In: (). URL: <https://github.com/NVIDIA/cuQuantum>.
- [104]“Oak Ridge National Laboratory acquires Atos Quantum Learning Machine to support US Department of Energy research”. In: (Nov. 2017). URL: [https://atos.net/en/2017/press-release/deals-contracts-press-releases\\_2017\\_11\\_13/oak-ridge-national-laboratory-acquires-atos-quantum-learning-machine-support-us-department-energy-research](https://atos.net/en/2017/press-release/deals-contracts-press-releases_2017_11_13/oak-ridge-national-laboratory-acquires-atos-quantum-learning-machine-support-us-department-energy-research).
- [105]Quantum Origin. “QPanda2”. In: (). URL: <https://qpanda-tutorial.readthedocs.io/zh/latest/>.
- [106]R. Orus. “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states”. In: *Annals of Physics* 349 (Oct. 2014), p. 117. DOI: 10.1016/j.aop.2014.06.013. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491614001596?via%3Dihub>.
- [107]Univ. of Oxford. “QuEST”. In: (). URL: <https://quest.qtechtheory.org/>.
- [108]“Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing”. In: (2019). URL: <https://zenodo.org/records/2562111>.
- [109]“QuantEX プロジェクト”. In: (). URL: <https://github.com/JuliaQX/QXTools.jl>.
- [110]Quantinuum. “Quantinuum System Model H1 Emulator Product Data Sheet”. In: (Feb. 2023). URL: [https://quantinuum.co.jp/assets/pdf/system\\_model\\_h1\\_emulator\\_product\\_data\\_sheet.pdf](https://quantinuum.co.jp/assets/pdf/system_model_h1_emulator_product_data_sheet.pdf).
- [111]“Quantum Computing Market Outlook”. In: (2023). URL: <https://www.persistencemarketresearch.com/market-research/quantum-computing-market.asp>.
- [112]QunaSys. “三菱ケミカルと有機材料の光学特性の精密制御を目指した共同研究契約を締結しました。”. In: (Sept. 2019). URL: [https://qunasys.com/news/posts/jd\\_h0vmqb/](https://qunasys.com/news/posts/jd_h0vmqb/).
- [113]QunaSys. “大規模電子系のグリーン関数を効率よく計算する手法を開発～量子コンピュータの強相関電子系への応用へ向けた着実な一步～”. In: (Aug. 2023). URL: <https://qunasys.com/news/posts/230804jp/>.
- [114]QunaSys. “量子コンピュータの活用を目指した共同研究契約をJSRと締結”. In: (Mar. 2019). URL: <https://prttimes.jp/main/html/rd/p/000000002.000041464.html>.
- [115]QunaSys. “量子コンピュータの活用を目指した共同研究契約をJXTGホールディングスと締結”. In: (June 2019). URL: <https://prttimes.jp/main/html/rd/p/000000003.000041464.html>.
- [116]QunaSys. “量子コンピュータ実機で結晶材料の準粒子バンド計算に成功”. In: (Aug. 2023). URL: <https://qunasys.com/news/posts/230822jp/>.

- [117]Qutech. “The QX Simulator”. In: (). URL: <http://quantum-studio.net/>.
- [118]C. Rhodes. “Qubit Pharmaceuticals Accelerates Drug Discovery With Hybrid Quantum Computing”. In: (Nov. 2022). URL: <https://blogs.nvidia.com/blog/qubit-pharmaceuticals-accelerates-drug-discovery-quantum-computing/>.
- [119]Rigetti. “Quantum-Enhanced Machine Learning with Moody’s Analytics”. In: (Jan. 2024). URL: <https://medium.com/rigetti/quantum-enhanced-machine-learning-with-moody-s-analytics-543d37df0549>.
- [120]Rigetti. “QVM Reference”. In: (). URL: <https://docs.rigetti.com/qcs/references/qvm>.
- [121]M. et al. Schuetz. “Exploring industrial use cases in the Airbus-BMW Group Quantum Computing Challenge”. In: (Jan. 2024). URL: <https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/exploring-industrial-use-cases-in-the-airbus-bmw-group-quantum-computing-challenge/>.
- [122]P. et al. Singh. “Exploring quantum chemistry applications with Tangelo and QEMIST Cloud using Amazon Braket”. In: (May 2023). URL: <https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/exploring-quantum-chemistry-applications-with-tangelo-and-qemist-cloud-using-amazon-braket/>.
- [123]S. Stanwyck. “Researchers Poised for Advances With NVIDIA CUDA-Q”. In: (Nov. 2023). URL: <https://blogs.nvidia.com/blog/basf-cuda-quantum-momentum/>.
- [124]Y. Suzuki et al. “Qulacs: a fast and versatile quantum circuit simulator for research purpose”. In: *Quantum* 5 (2021), p. 559. DOI: 0.22331/q-2021-10-06-559. URL: <https://zenodo.org/records/2562111>.
- [125]“The IBM Quantum Development & Innovation Roadmap”. In: (2024). URL: [https://www.ibm.com/quantum/assets/IBM\\_Quantum\\_Development\\_&\\_Innovation\\_Roadmap.pdf](https://www.ibm.com/quantum/assets/IBM_Quantum_Development_&_Innovation_Roadmap.pdf).
- [126]Y.-H. Tsai, J.-H. R. Jiang, and C.-S. Jhang. “Bit-Slicing the Hilbert Space: Scaling Up Accurate QuantumCircuit Simulation”. In: *2021 58th ACM/IEEE Design Automation Conference (DAC)* (Nov. 2021), p. 439. DOI: 10.1109/DAC18074.2021.9586191. URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/9586191>.
- [127]“Using Q# to estimate resources needed for quantum advantage in derivative pricing”. In: (Sept. 2022). URL: <https://cloudblogs.microsoft.com/quantum/2022/09/15/using-q-to-estimate-resources-needed-for-quantum-advantage-in-derivative-pricing/>.
- [128]S. Utsunomiya. “サービスアップデート Quantum 編:Amazon Braket の基礎”. In: (2022). URL: [https://pages.awscloud.com/rs/112-TZM-766/images/AWS-reInvent-2021-Recap-Presentation-Deck-27\\_Compute.pdf](https://pages.awscloud.com/rs/112-TZM-766/images/AWS-reInvent-2021-Recap-Presentation-Deck-27_Compute.pdf).
- [129]G. Vidal. “Efficient Classical Simulation of Slightly Entangled Quantum Computations”. In: *Physical Review Letters* 91 (14 Oct. 2003), p. 147902. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.147902. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.91.147902>.

- [130]D. Willsch. "BENCHMARKING JUWELS BOOSTER WITH THE JÜLICH UNIVERSAL QUANTUM COMPUTER SIMULATOR". In: (Jan. 2021). URL: <https://juser.fz-juelich.de/record/890444/files/ea-juqcs-tosshare.pdf>.
- [131]Xanadu. "Menten AI partners with Xanadu to develop quantum machine learning for protein-based drug discovery". In: (Jan. 2022). URL: <https://www.xanadu.ai/press/menten-ai-partners-with-xanadu-to-develop-quantum-machine-learning-for-protein-based-drug-discovery>.
- [132]Xanadu. "PennyLaneAI-pennylane-lightning". In: (). URL: <https://github.com/PennyLaneAI/pennylane-lightning>.
- [133]Xanadu. "XanaduAI-Jet". In: (). URL: <https://github.com/XanaduAI/Jet>.
- [134]A. Zulehner and R. Wille. "Advanced Simulation of Quantum Computations". In: *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 38 (5 May 2018), p. 848. DOI: 10.1109/TCAD.2018.2834427. URL: <https://ieeexplore.ieee.org/document/8355954>.
- [135]イスス連邦工科大学チューリッヒ校 (ETH) . "ProjectQ Simulator Tutorial". In: (). URL: [https://notebook.community/ProjectQ-Framework/ProjectQ/examples/simulator\\_tutorial](https://notebook.community/ProjectQ-Framework/ProjectQ/examples/simulator_tutorial).
- [136]"凸版印刷と blueqat、光量子計算に関する論文が IEEE の国際会議「QCE21」ポスター セッションに採択". In: (Oct. 2021). URL: [https://www.toppa.co.jp/news/2021/10/newsrelease211019\\_1.html](https://www.toppa.co.jp/news/2021/10/newsrelease211019_1.html).
- [137]"博報堂 D Y ホールディングス、量子ゲート型コンピュータの広告・マーケティング データ活用における第一弾実証を実現". In: (July 2023). URL: <https://www.hakuhododoholdings.co.jp/news/corporate/2023/07/4330.html>.
- [138]大辻弘貴. "Arm CPU 搭載サーバを用いた量子コンピュータシミュレーション用クラスタの構築と運用". In: (Feb. 2024). URL: [https://www.pccluster.org/ja/event/data/240205\\_pccc\\_wsAI-HPC-OSS\\_01\\_ohtsushi.pdf](https://www.pccluster.org/ja/event/data/240205_pccc_wsAI-HPC-OSS_01_ohtsushi.pdf).
- [139]"大阪大学に設置した超伝導量子コンピュータ国産3号機の クラウドサービスを開始". In: (Dec. 2023). URL: [https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2023/20231220\\_1](https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2023/20231220_1).
- [140]木村 悠介 et al. "決定グラフ型量子シミュレータの性能評価". In: *IPSJ SIG Technical Report* (2021). URL: <https://www-sato.cnlt.u-tokyo.ac.jp/Archive/qs10.pdf>.
- [141]"超伝導量子コンピュータを開発し、量子シミュレータと連携可能なプラットフォームを提供". In: (Oct. 2023). URL: <https://pr.fujitsu.com/jp/news/2023/10/5.html>.
- [142]"量子コンピュータを利用できる「量子計算クラウドサービス」開始". In: (Mar. 2023). URL: [https://www.riken.jp/pr/news/2023/20230324\\_1/](https://www.riken.jp/pr/news/2023/20230324_1/).



# 第7章 量子および疑似量子アニーラの調査

## 7.1 今年度の取り組みの概要

国立大学法人東北大学および日本電気株式会社と連携し、量子アニーリングならびに疑似量子アニーリングマシンにおける性能に関する調査を行った。

量子および疑似量子アニーリングマシンにおける性能に関する調査を行うために、性能評価および性能分析を行った。その成果をまとめ、量子計算に関する国際会議 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering 2023 (QCE2023) に投稿して、発表を行っている。

次に、一般的に解の精度が低下することが知られている制約付きの組み合わせ最適化問題において、探索精度を向上させるための、制約重みを分割する手法についての調査を行った。出来るだけ小さいかつ制約違反を防ぐ制約重みを設定することで、代表的な制約付き組み合わせ最適化問題である巡回セールスマン問題において、探索精度を向上できることを明らかにした。

さらに、既に商用化されている技術である量子アニーリングおよび疑似量子アニーリングの活用状況について、アカデミック分野および民需分野での調査を実施した。調査の結果、アカデミック分野よりも民間企業の分野でのアニーリング導入が進んでいることが明らかになった。一方で、アカデミック分野においても膨大な組み合わせの中から最適な組み合わせを探索することが求められる場合があり、今後は HPC と量子アニーリング・疑似量子アニーリングのハイブリッドな活用による実効性能向上が期待されていることが分かった。

## 7.2 アニーリング方式の量子コンピュータの性能評価

まず、量子アニーリングの性能についての調査を行った。顕著な成果の一つとして、実用的なベンチマークに基づいて量子超越性 (Supremacy) を示す成果が挙げられる [157]。磁性材料の研究や磁気メモリ、スピントロニクスデバイスの設計に応用可能な物理現象である磁気スピン系のシミュレーションをベンチマークとして使用し、Frontier や Summit で約 100 万年を要する計算を、量子プロセッサー (QPU) を用いることで約 20 分で求解可能であることを実証している。この計算は 100 万分の 1 ワット未満の消費電力で実現されており、実用的なベンチマークに基づいた世界初の量子超越性 (Supremacy) を示す成果として高く評価されている。

次に、実際に、利用可能な量子および疑似量子アニーリングマシンを用いて、機械学習の一つであるクラスタリングをベンチマークプログラムとして、評価を行った。性能評価には、表 7.1 に示す量子効果を活用した量子アニーリングマシンや、従来のデジタルプロセッサを活用して量子効果

を模擬した疑似量子アニーリングマシンや疑似分岐マシン、そして疑似量子アニーリング向けの専用回路で実現したマシンなどのイジングマシンを用いた。D-Wave 2000Q、D-wave Advantage、D-wave Advantage 2 prototype、および CQM ソルバーを含む D-wave Leap Hybrid [155] は、クラウドサービス D-Wave Ocean SDK を介して利用した。D-Wave Neal は、Intel Xeon Gold6126、92GB のメモリを搭載するサーバにて実行した。NEC Vector Annealing (VA) [164] は、Intel Xeon Gold 6126 および NEC Vector Engine Type 20B からなるベクトルスーパーコンピュータ SX-Aurora TSUBASA [159] にて実行した。Fixstars Amplify Annealing Engine (AE) は、NVIDIA A100 GPU で実行され、Amplify SDK を介して利用した。Hitachi CMOS アニーラ [166] は、Amplify SDK を利用してクラウドサービスを介して利用した。Toshiba SQBM [154] は、Microsoft Azure Quantum を介して利用した。Fujitsu Digital Annealer (FDA) [167] は、富士通のクラウドサービスを介して利用した。

表 7.2 に各イジングマシンに使用される各種パラメータを示す。量子アニーラのアニーリング時間は、D-wave Advantage を使用してハイパーパラメータ調整を行い、0.5 マイクロ秒から 2000 マイクロ秒の間から探索し、最も高い性能を示した 20 マイクロ秒を、各量子アニーラのアニーリング時間として選択した。すなわち、D-wave 2000Q と Advantage 2 prototype のどちらも、D-wave Advantage と同じアニーリング時間 20 マイクロ秒を利用した。Simulated Annealing machine (SA) [158] においては、表 7.2 に示す範囲でハイパーパラメータの調整を行った。D-wave Neal と Hitachi CMOS Annealer に関しては、初期温度と最終温度をそれぞれ 10 と 0.02 に設定し、反復回数を 10 とした。VA に関しては、初期温度を 1000 に、最終温度を 0.02 に設定し、反復回数は 1 から 100 回の範囲で探索を行い、反復回数は解を見つけることが可能な最も少ない回数とした。解を得るために必要な最小反復回数を設定した。VA は制約条件の外部定義を用いた。AE については、反復回数を 100 に設定し、アニーリング時間については 1 から 100,000 秒の間の、解を見つけるのに必要な最小時間を用いた。Toshiba SQBM においては、dSB アルゴリズムを使用し、反復回数は SQBM に搭載されているオートチューニング機能により自動設定した。FDA では、アニーリング時間を問題サイズに応じて 13 秒と設定した。

実験には、人工的に作成したデータセットを利用して、組み合わせクラスタリングを実行した。図 7.1 に示すように、クラスタ数を 3 に設定し、データ点数を 8 から 4096 まで変化させた。データセットは scikit-learn の make blob モジュールで作成した [163]。人工データセットはクラスタ中心とクラスタ分散を元に正規分布に則ってランダムに生成する。各アニーリングマシンで得られた最良のデータを *Lowest* とラベル付けした。全ての実験は、VA および FDA では 10 回、他のイジングマシンでは 100 回の解が得られるまで行った。

評価に用いる指標として、TTS に加えて、解の品質、実行時間、違反率も用いてその分析を行った。TTS は、基準解と同等またはそれ以上に高品質な解を得るまでにかかる計算時間の指標であり、1 回のアニーリング時間  $\tau_{execute}$  と基準解を得るまでにかかるアニーリング回数  $R$  を用いて、次式で表される。

$$TTS = \tau_{execute} R. \quad (7.1)$$

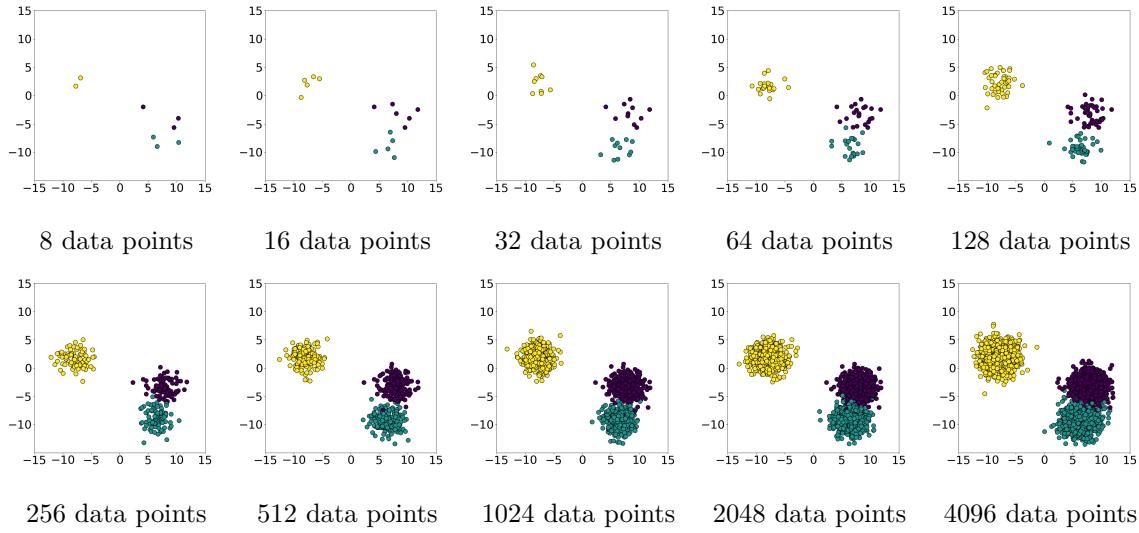


図 7.1 評価に用いた人工データセット.

ここでアニーリング時間  $\tau_{execute}$  は 100 回の試行の平均を取ることで算出する。また、解の品質の評価指標として、同一クラスタ内距離総和を全てのクラスタ間で足しあわせた値である  $Cost$  を用いる。 $Cost$  は値が小さいほど距離が小さいデータ点同士が同じクラスタに属しており、解の品質が高いことを示す。

図 7.2 に各イジングマシンで実行した時の TTS を示す。TTS は、基準解と同等、またはそれ以上に高品質な解を得るまでにかかる時間を表す。基準解は、最も精度の高いクラスタリングの解とした。データ数が 8 の場合には全てのアニーリングマシンにおける TTS が算出できているのに対し、データ数が増えるにつれて TTS を算出できるアニーリングマシンが減少している。まず、データ数が 8 の場合に着目すると、VA、AE の TTS が短い。これは、これらのアニーリングマシンにおいて、精度が高い解を短時間で求められたためである。

次に、データ数が大きい場合を見ると、VA と AE、FDA 以外では算出できていない。この要因として、ビット数不足が考えられる。D-wave 2000Q、D-wave Advantage、Hitachi CMOS annealerにおいては、全結合ビット数がそれぞれ 64 ビット、124 ビット、176 ビットと少なく、データ数がそれぞれ 32、64、128 以上の場合にビット数が不足する。これはビット数が少ないと加え、全結合でないネットワークを持つマシンはエンベディングが必要になり、より大きなビット数を消費してしまうためである。将来のマシンにはビット数が増加する予定となっており、これにより大きな問題においても解けることができるようになることが想定される。

また、疑似量子アニーリングマシン同士で性能を比較すると、局所解からの脱出機構を持つ VA や AE、FDA の性能が高いことが分かる。これは、局所解を脱出して大域的な解を探索することが出来たためだと考えられる。

TTS の算出ができない要因を詳細に調査するために、クラスタリングの精度を表す Cost の分析を行った。図 7.3 に基準解によって正規化されたコストの箱ひげ図を示す。横軸はデータ数、縦軸は正規化された Cost を示している。この図から、TTS を大規模なデータポイントでも計算できる

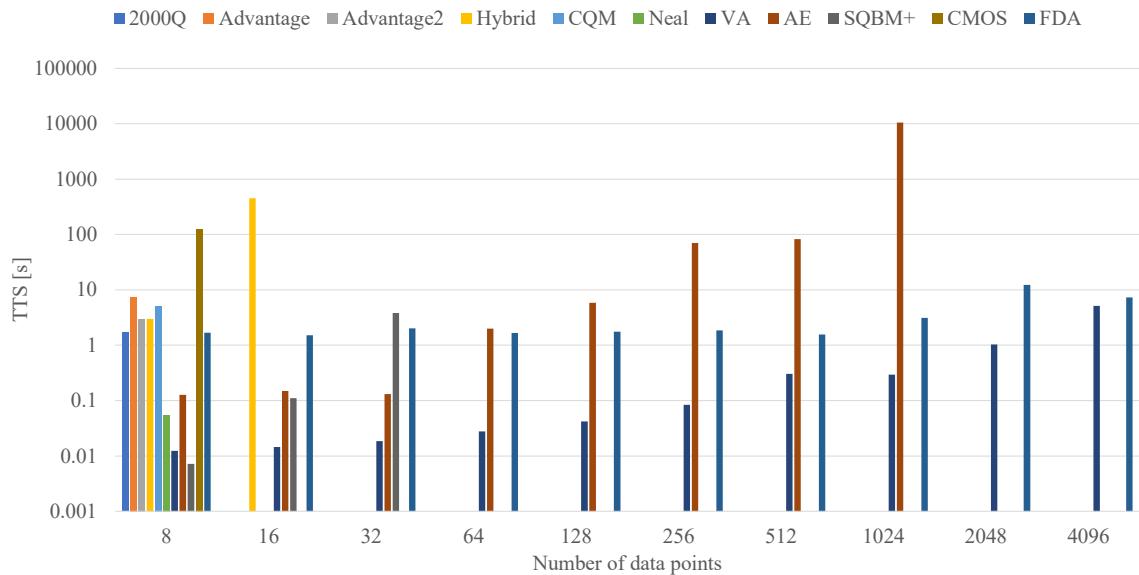


図 7.2 データ点数を変化させた時の各イジングマシンの TTS.

VA と AE、FDA が、基準解と同等の Cost を達成していることが分かる。さらに、100 回の試行で得られる解の変動はほとんどないことが分かる。このような高品質な解によって、VA と AE、FDA においては短い TTS を達成している要因であることが分かる。

すべてのイジングマシンで TTS が算出できたデータ点数が 8 の場合を見てみると、D-wave 2000Q、D-wave Advantage、D-wave Advantage2 Prototype、D-wave Neal および Hitachi CMOS Annealer の分散が、他のアーナーよりも大きいことが分かる。これは、これらのイジングマシンで得られる解に大きな変動があることに加え、基準解に到達できるケースが少なく、コストの平均値が高いためだと考えられる。その原因の 1 つとして接続性が考えられる。D-wave 2000Q、D-wave Advantage、D-wave Advantage2 Prototype、および Hitachi CMOS Annealer は、完全結合ではなく、それぞれ独自のグラフ構造を採用している。そのため、埋め込み時にスピンが複製され、より多くの量子ビットが必要となる。また、チェーンの強度が低いため、複製されたスピン同士が一意に決まりにくくなってしまう。

データポイントが 16 以上の場合、ほとんどのイジングマシンが基準解と同じ品質を達成できないことが分かる。解が得られたとしても、TTS を計算するための精度には達していない。また、D-wave 2000Q、Advantage、Advantage2 Prototype では 32 以上、Hitachi CMOS Annealer では 128 以上の場合、ビット数が不十分であるためクラスタリングが実行できなかったためである。

次に、SA 同士のコストを比較すると、VA、FDA、AE、Toshiba SQBM+、D-wave Leap Hybrid、D-wave Leap CQM、および D-wave Neal の順番にコストが低いことが分かる。これらの SA はデジタル計算機で実装されているため、ビットの精度はほぼ同等であり、主な違いは、局所解からの脱出メカニズムが実装されているかどうかである。Toshiba SQBM+では、個々のビットが独立し

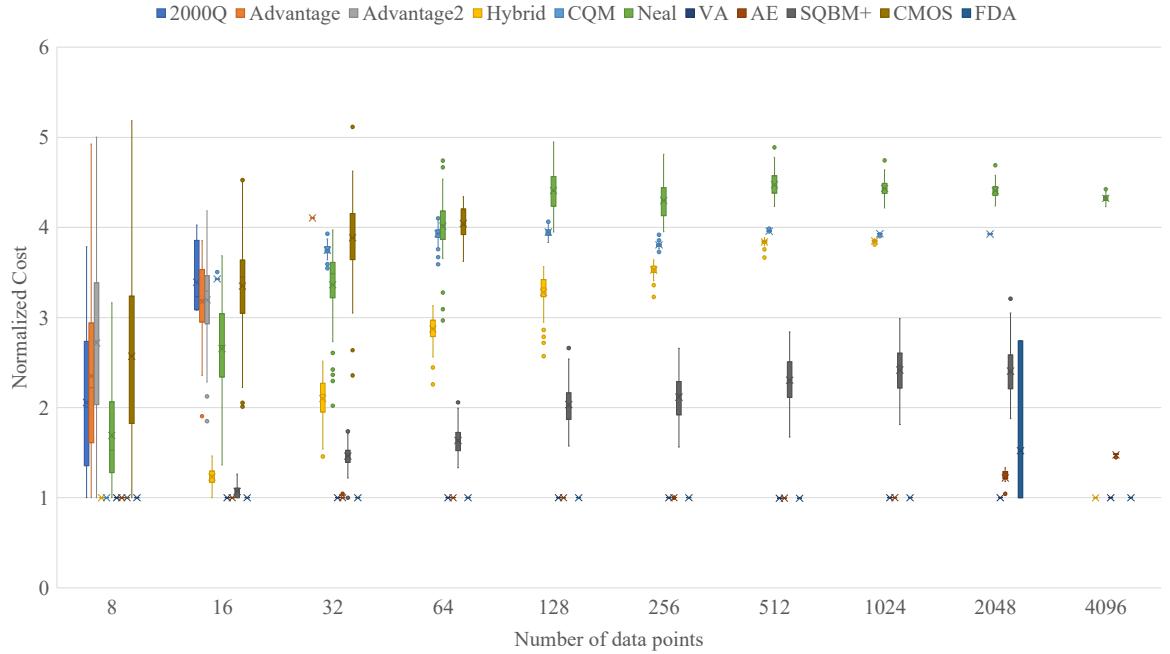


図 7.3 Lowest ラベルのデータで正規化した Cost

て反転し、複数のスピンが確率的に同時に反転できるため、1 つの局所解から別の局所解への脱出が可能となっている。VA は、外部で制約を定義することで、制約を満たす解の間を移動することが可能である。このことから、局所解からの脱出メカニズムを持つ SA が、低コストの解を見つけることができたと考えられる。

図 7.4 に制約の違反率を示す。横軸はデータ数、縦軸は制約を違反する解の割合を示す。この図から、SA では制約の違反がないか少ないのに対し、D-wave 2000Q、D-wave Advantage、D-wave Advantage2 Prototype、および Hitachi CMOS Annealer では、制約違反が多いことが分かる。この要因として、量子ビット間の接続性が考えられる。D-wave Advantage 2 Prototype の制約違反率は、D-wave 2000Q や D-wave Advantage よりも低い。Advantage 2 Prototype で使用される Zephyr グラフは、D-wave 2000Q の Chimera グラフや D-wave Advantage の Pegasus グラフよりも多くの結合をもっている。一般的には、量子ビット間の接続が少ない場合、埋め込みの際に少ない接続を補うために量子ビットが複製されるため、同じ問題でもより多くの量子ビットが必要となる。これによって、複製された量子ビットに関する制約も必要となり、問題自体が難しくなってしまう。

図 7.5 に、各イジングマシンにおける実行時間を示す。横軸はデータ数、縦軸は実行時間を示す。データ数が小さな場合、D-Wave Neal の実行時間は他のイジングマシンよりも短いことが分かる。しかしながら、図 7.3 に示されているように VA の Cost が D-Wave Neal よりも低いため、図 7.2 のように VA の TTS が D-Wave Neal よりも短くなっている。データ数が増えるにつれて、VA と D-Wave Neal の実行時間が逆転している。その結果、VA は短時間で高精度な結果を得られ

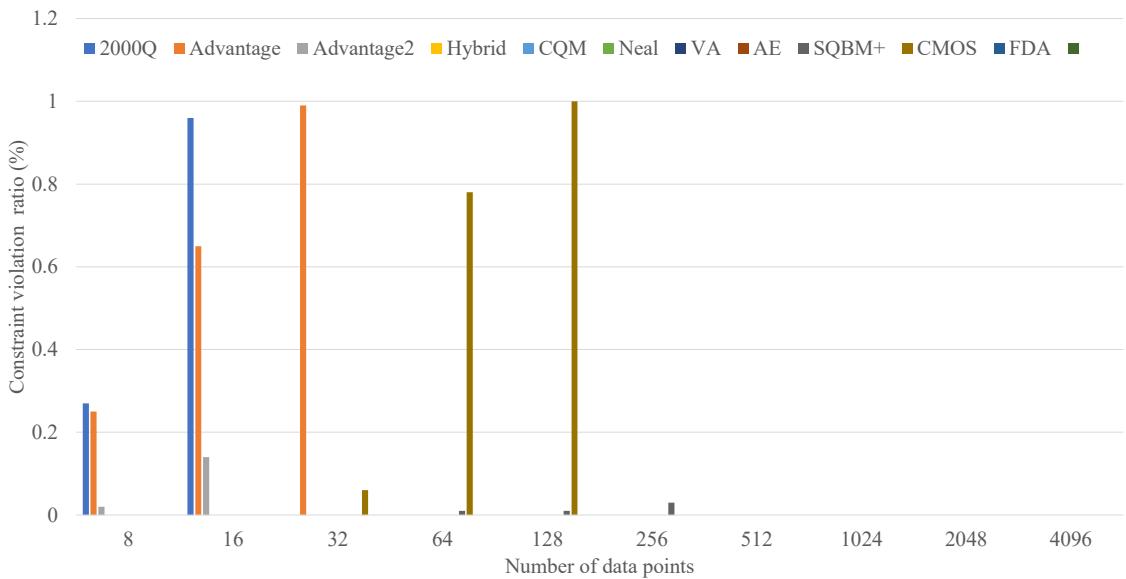


図 7.4 制約の違反率.

るため、 TTS が短くなる。

これらの評価を通じて、ビット数、ビット精度、接続方式、局所解からの脱出能力の 4 つの観点がイジングマシンの性能を評価する際に、重要であることが分かった。ビット数については、不足すると実行ができないため、重要な要素である。ビット精度については、エネルギー関数を正確に捉えるためには十分なビット精度が必要であることが分かる。また、接続方式については、量子アニーリングマシンなど低い接続性を持つマシンでは制約違反率が高く、クラスタリングの品質が低下することが明らかになった。これは、エンベディングの際に、ビットが複製されるため、結果的に多くのビット数が消費され、問題自体が困難になったためだと考えられる。そのため、全結合の接続が理想的であることが分かった。最後に、局所解からの脱出能力については、VA や FDA、SQBM+などのイジングマシンは局所解から脱出できるような機構を持っており、高精度な解を見つけることができている。このように、脱出機構の有無が重要であることが明らかになった。

### 7.3 制約付き組み合わせ最適化問題における精度向上手法

組み合わせ最適化問題は、多数変数の組み合わせの中から条件を考慮した上で目的関数や損失関数などの指標を最適化する組み合わせを求める問題である。実社会においても、組合せ最適化問題として捉えることができる問題が多くある。例えば、配送計画や人員配置、創薬開発や金融におけるポートフォリオ作成など、時間や人員などの損失を表す指標を最小化する組み合わせ、または効能や利益などを最大化する組み合わせを算出する問題が挙げられる。このような組合せ最適化問題を効率的に解くことで、様々な社会課題の解決に貢献することが期待されている。

しかしながら、組み合わせ最適化問題では対応する変数の増加により、組み合わせの数が爆発的

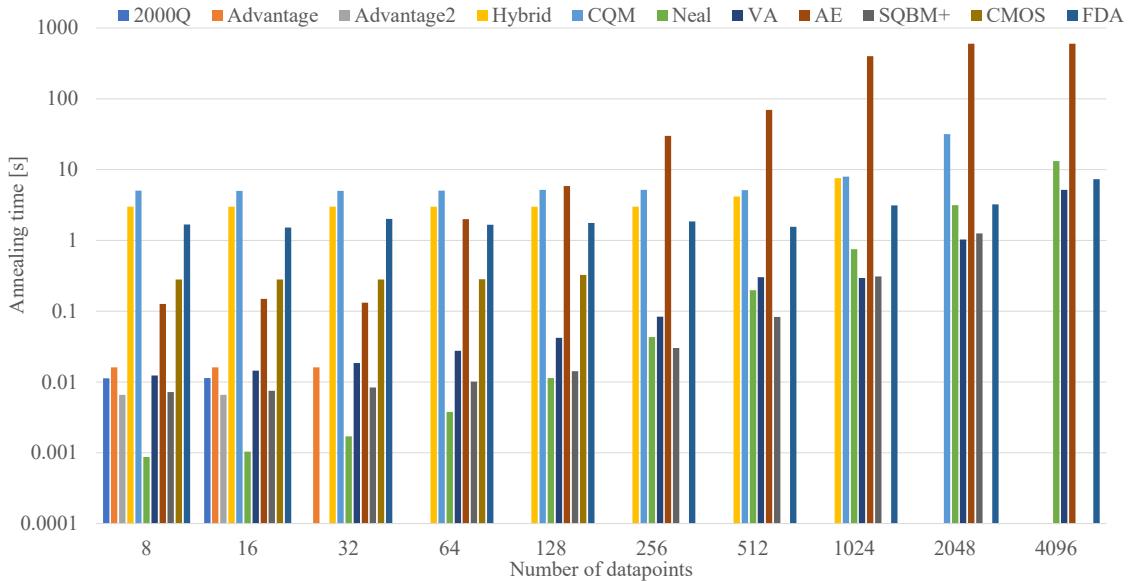


図 7.5 実行時間.

に増加する。このため、従来のデジタル計算機において、最適な組み合わせを求めるのは困難である。膨大な数の変数をもつ組み合わせから最適なものを選択するには、デジタル計算機では非常に長い時間を要することが知られている [153]。

組み合わせ最適化問題を高速に解く可能性のある新たな計算機として、イジングマシンが注目されている。イジングマシンは、組み合わせ最適化問題を解くために、磁性体相互作用を表現するイジングモデルに基づく計算方式を採用した計算機であり、その実装方式は多岐に渡る。例えば、デジタル計算機上に実装されるイジングマシンとして、疑似アニーリング (Simulated Annealing, SA) [158] や疑似分岐 (Simulated Bifurcation, SB) アルゴリズム [154] が知られている。これらは比較的大きなサイズの問題を解くことも可能である。一方で、デジタル計算機上に実装されるため、実行時間は計算機の性能に依存する。また、アナログ回路上に実装されるイジングマシンとして、量子効果を用いてアニーリングを行う量子アニーリング (Quantum Annealing, QA) [156] を用いる量子アニーラが知られている [155]。量子アニーラは D-Wave Systems 社により開発されたイジングマシンであり、量子力学における量子揺らぎを用いて、組み合せ最適化問題を高速に解くことができると期待されているが、ノイズが多く利用可能なビット数に制限があるため、大きなサイズの問題を解くことが難しいとされる [145]。

イジングマシンでは、組み合わせ最適化問題をイジングモデルまたはそれと等価な QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 問題に変換することで解くことが可能である。QUBO 問題は 2 次形式の最適化問題であり、QUBO 形式で様々な組み合わせ最適化問題を表現できるため、多くのイジングマシンにおいて入力形式として用いられる。また、等式や不等式で表される制約条件を含む組み合わせ最適化問題についても、ラグランジュの未定乗数法により QUBO

問題に変換することが可能である。制約条件を表す制約関数を定式化して、目的関数と合わせてハミルトニアンに加えることで制約条件を含む QUBO 問題として定式化する。このような制約条件を含む QUBO 問題を制約問題と呼ぶ。制約問題では、制約を考慮した上で目的関数を最小化する解を求めるため、制約関数を足し合わせる際には、制約重みという大きな値に設定した係数をかけ、制約違反時にハミルトニアンが増加するように定式化する必要がある。

一方で、制約問題では、目的関数のみからなる問題と比較して探索精度が悪化してしまう。これは、制約違反を防ぐために設定した制約重みにより、制約関数の影響が大きくなり、目的関数を小さくするのが難しくなるためである。制約関数を満たす暫定解が得られた際に、目的関数をより小さくする解を新たに探索するよりも制約関数を増加させない暫定解にとどまってしまう。このため制約は満たすものの、目的関数の値を最小化できなくなり、探索精度が悪化してしまう。

イジングマシンによる制約問題の求解において、探索精度を向上させるために、制約問題において制約重みを分割して設定する手法の調査を行った。制約問題では、制約関数を足し合わせて探索を行うため、制約条件を満たす状態だけでなく制約に違反する状態も含めて全体を探索する。制約に違反する領域でも、最小のハミルトニアンを探索するために探索の効率が悪くなる。このため、制約問題をより効率よく探索するために、制約問題の探索空間を分割する手法がある。

探索空間を分割する手法として、制約を満たす領域を事前情報として把握し、探索効率向上のために、制約問題の探索空間を制約領域と非制約領域に分割して、制約領域のみを探索をする制約分割法がある [164]。各変数間の制約を入力データとして与え、探索の途中で制約を違反する操作を避けて、非制約領域をマスクし制約領域のみの探索を行う。探索空間を制約および非制約領域に分けて探索することで、効率よく探索し品質を向上させることができる。

しかしながら、制約分割法は、探索空間を制約領域と非制約領域に分割可能な問題にのみ適用でき、また、分割が可能な問題でも複数の制約を同時に考慮するのは困難である。また、QA などのようなアナログ回路上でビット反転の制御を行う手法は未だ確立されていない。

制約分割法の他に探索空間を分割する手法として、問題そのものを分割し小さい問題を解く問題分割法がある [144]。タブー探索 (Tabu search) によって局所解の探索を行い、QUBO 問題を分割した subQUBO 問題をアニーリングによって解くことで局所解から抜け出す。局所的な最適化に特化したタブー探索と大域的な最適化に優れたアニーリングを繰り返し、最適解を探索する。問題分割法は、問題そのものを分割する手法であるため、様々な問題に適用可能であり、subQUBO 問題は QA を用いても求解可能である。しかしながら、このような問題分割法では、何度も問題を解く必要があり、実行時間が増加してしまう。また、分割した問題を解くため、全体の最適解を導出できる保証はない。

制約を複数のグループに分割できる制約問題において、制約重みを分割して設定する手法を検討した。制約を複数に分けた制約グループにおいて、目的関数に応じ制約重みを分割する。目的関数の変動を捉えた小さい制約重みを設定できることによって、制約関数の影響を削減して、制約問題の探索精度を向上させる。

制約を複数のグループに分割できる制約問題を式(7.2)に示す。

$$H = \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j + \lambda \sum_k C_k. \quad (7.2)$$

式(7.2)の第2項が制約関数であり、複数の制約グループ  $C_k$  に別れている。制約満足時には、全ての制約グループ  $k$  で  $C_k = 0$  となり、最小値をとる。提案手法では、制約グループ  $k$  が目的関数の QUBO 行列  $Q_{i,j}$  の変数である時に、制約グループ  $k$  ごとに制約重みを分割する。これにより、目的関数に応じて、小さい制約重みを与えることができる。式(7.3)に制約グループが目的関数の変数である場合を示す。

$$H = \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_i \lambda_i C_i. \quad (7.3)$$

式(7.3)では制約グループ  $k$  が目的関数  $Q_{i,j}$  の変数である場合として、最も単純に  $k = i$  とし制約グループ  $i$  ごとに制約重み  $\lambda_i$  を分割して設定する。

式(7.3)において、制約重みを、制約グループ  $i$  ごとに分割して設定することができることを示す。バイナリ変数列  $x_i (i = 1, n)$  を制約に違反する場合  $x_i^v$ 、制約を満たす場合  $x_i^s$  とする。制約違反時にはハミルトニアンが増加する必要があり、制約を満たす場合  $x_i^s$  で制約関数が 0 となるため、式(7.3)より、以下の不等式を満たす必要がある。

$$\sum_{i,j} Q_{ij} x_i^v x_j^v + \sum_i \lambda_i C_i \geq \sum_{i,j} Q_{ij} x_i^s x_j^s. \quad (7.4)$$

式(7.4)は以下の式に変形することができる。

$$\sum_i \lambda_i C_i \geq \sum_i \left( \sum_j^i Q_{ij} x_i^s x_j^s - \sum_j^i Q_{ij} x_i^v x_j^v \right). \quad (7.5)$$

全ての  $i$  で、制約重み  $\lambda_i$  について次式が成り立つ場合、式(7.5)を満たす。

$$\lambda_i \geq \frac{\sum_j^i Q_{ij} x_i^s x_j^s - \sum_j^i Q_{ij} x_i^v x_j^v}{C_i}. \quad (7.6)$$

式(7.6)の右辺よりも大きい値を制約重みとして与えれば、式(7.4), (7.5)を満たし、制約違反時にハミルトニアンが増加するような制約重みを設定することができる。具体的な問題であれば、式(7.6)の右辺の最大値を与えるようなバイナリ変数  $x_i^s, x_i^v$  を、近似的に与えることで制約重み  $\lambda_i$  を  $i$  ごとに分割して設定することができる。例えば、 $x_i^s$  が制約を満たしかつ 1 になるバイナリ変数の個数を最大に、 $x_i^v$  が全て 0 になるように取るなどが考えられる。

以上より、制約グループ  $k$  が目的関数  $Q_{i,j}$  の変数である時に、制約グループ  $k$  ごとに制約重みを分割する。この手法では、 $k$  個ある制約グループ全てに同一の重みを与えるのではなく、制約グループ  $k$  ごとに目的関数の変動を捉えて、細かく制約重みを与える。制約グループ  $k$  によらず同じ値を与えた場合と比較して、小さな制約重みを設定可能である。これにより、制約関数がハミルトニアンに与える影響を最小限にすることができる、大域的に目的関数を最小化する解が得られやすくなり、探索精度を向上させることができるものである。

制約重みを減少させるアプローチとして、制約重みの値を実験的に探索することも考えられる。TSPにおいて制約重みの値を探索することで、解の精度が向上することが示されている [165]。しかしながら、何度も実行を繰り返して制約重みを探索する場合には、制約重みを探索する時間がかかるてしまう。

従来のアプローチと比較して、本調査で検討した手法の利点は多く分けて3つある。一つは、上記のように制約重みを探索するのではなく、事前に制約重みを与えることができる点である。制約グループと目的関数の対応により、できるだけ小さな制約重みを事前に設定することが可能である。

2つめの利点は、QUBO問題を入力として利用可能な全てのイジングマシンに対して適用できる点である。QUBO問題の制約重みの与え方に対する手法であるため、入力形式としてQUBO問題を用いることができればアナログ実装、デジタル実装を問わず適用可能である。

最後の利点は、前述した分割法とも併用が可能である点である。QUBO問題の制約重みを分割する手法であり、制約分割法や問題分割法はQUBO問題を分割する手法であるため、どちらの手法とも併用することができる。

評価には、イジングマシンとしてVAとD-wave Nealを用いた。それぞれNEC Vector Engine Type 20BとAMD EPYC 7402Pの計算機上で実行した。評価に用いた問題はTSPであり、データセットとしてTSPLIB [143]におけるburma14、bays29、eil51、eil76の4つを用いた。数字が各データセットの都市数を表す。VAでは、全てのデータセットおよび手法で初期の逆温度は10、終期の逆温度は150、温度分割数を500に設定した。D-wave Nealでは、初期の逆温度は1、終期の逆温度は10とした。VAの実験と温度設定が異なるのは、用いるデータセットを正規化したためである。どちらのイジングマシンでも、burma14、bays29では探索回数を1000回に、eil51、eil76では10000回に設定した。全ての実験は100回の試行を行った。評価に用いる指標はTSPの巡回路長である。

図7.6にVAとD-wave NealのTSPの巡回路長による提案手法の評価結果を示す。横軸が用いたデータセットで、縦軸が巡回路長である。巡回路長は、TSPLIBで与えられている各データセットの最適解の巡回路長により正規化した。VAではどちらの方法においても全ての試行において制約違反が見られないことが分かる。D-wave Nealではeil76の提案手法において、100回の施行中で1回のみ制約に違反していた。その他の全ての試行で制約違反はない。図7.6からわかるように、全てのデータセットにおいて、どちらのイジングマシンとも、従来手法より短い巡回路長を算出できており、解の品質が向上している。VAでは、平均値では全てのデータセットにおいて5%程度低い巡回路長を算出することができた。また、bays29、eil51、eil76の三つのデータセットでは、最小値に関しても低くなっていること、最小値が外れ値となっている。VAでは制約違反を起こさずに、解の精度を向上させることができた。

D-wave NealについてもVAと同様に、解の探索精度が向上していることがわかる。平均値では、burma14、bays29、eil51、eil76でそれぞれ、3%、6%、10%、7%程度低い巡回路長を算出することができた。しかしながら、VAと比較すると、全体的に箱ひげ図のばらつきが大きく、かつ巡回路長も長くなっていることがわかる。これは、D-wave NealはVAと比較して、解の探索精度が低い

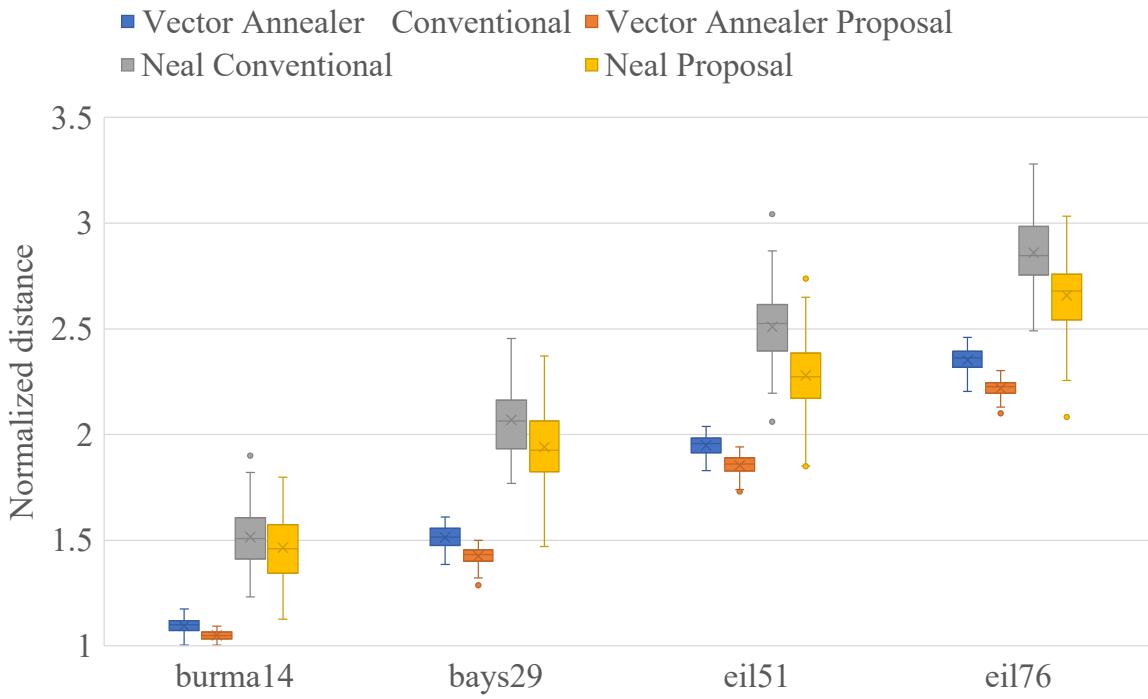


図 7.6 TSP の巡回路長。

ためであると考えられる。また eil76 における一回の制約違反については、制約重みが小さすぎたのではなく、うまくハミルトニアンを最小化することができなかったためであると考えられる。これは、D-wave Neal の解のばらつきが大きく、違反を起こしたのが都市数が最大で探索の困難な eil76 であったことともよく当てはまる。D-wave Neal でもほとんどの場合で制約違反を起こさずに、解の精度を向上させることができた。

以上より、どちらのイジングマシンにおいても制約重みを小さくすることで、制約関数の大きな変動を緩和し、探索精度を向上させることができた。都市制約重みの値を見てみると、従来手法では burma14、bays29、eil51、eil76 のそれぞれで 1261、509、86、85 であり、本調査研究において調査した手法の都市制約の平均値では 945、384、62、64 である。このため、全てのデータセットにおいておおよそ 25%程度制約重みの値を減少させることができた。従って、提案手法では制約違反を防いだ上で、解の探索精度を向上できることができた。

## 7.4 量子アニーリング・疑似量子アニーリング技術の活用

本調査研究では、既に商用化されている技術である量子アニーリング、及び疑似量子アニーリングの活用状況について、アカデミック分野、及び産業利用分野での調査を実施した。調査においては量子コンピュータや量子アニーリング、及び疑似量子アニーリングの研究開発が活発である日本、米国、及び欧州を主な対象地域とした。以下に調査結果を述べる。

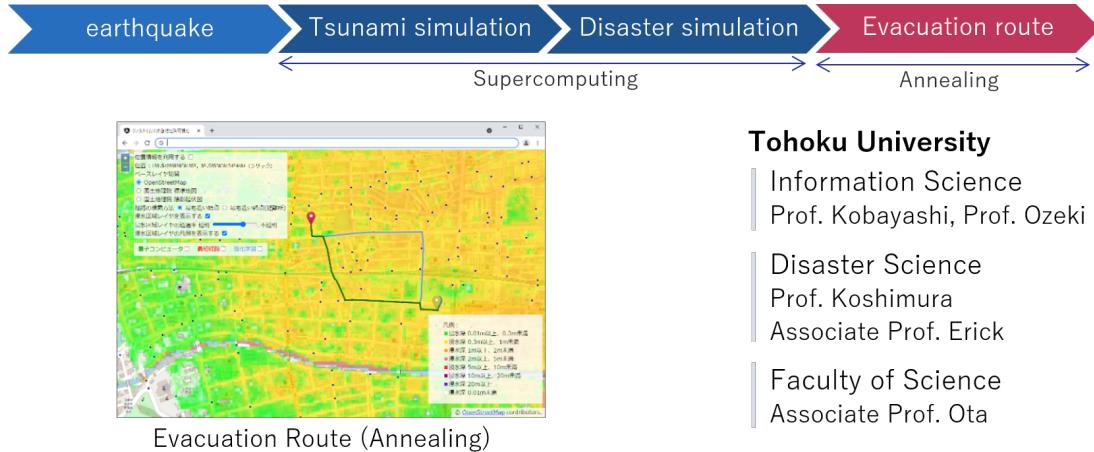


図 7.7 津波被害シミュレーション、及び避難経路最適化の応用例

#### 7.4.1 アカデミック分野における量子/疑似量子アニーリングの活用

アカデミック分野における量子アニーリング・疑似量子アニーリングの応用事例は多くない状況であり、既に量子アニーリング・疑似量子アニーリングに積極的に取組んでいるのは”HPC 分野”、及び“最適化分野”であるという仮説に基づき、国内外におけるこれらの研究者・ユーザを中心としたヒアリングを実施した。

##### 7.4.1.1 HPC 分野におけるアニーリングの活用

日本国内、米国、及び欧州の HPC 計算センターにおけるアニーリングの活用状況について調査を実施した。日本においては HPC のアプリケーションをアニーリングの活用により加速できるのではないかという期待感が強い状況である。HPC とアニーリングのハイブリッド応用の一例として、図 7.7 に東北大学のサイバーサイエンスセンターの取組である「津波避難をアニーリングにより最適化する事例」を示す。HPC により地震発生から津波の予測、さらに津波による被害予測までのシミュレーションを実行する。その後、津波浸水や津波による建物・橋梁などの破壊予測結果に基づき、各個人がどこへ避難すべきかの最適化をアニーリングにより行う。HPC とアニーリングの連成計算と言える非常に先進的な取組みであり、海外の研究機関からも高い関心を集めているものである。

このように HPC 分野においてアニーリングへの期待は非常に高いことが確認できた。一方で、HPC 分野におけるアニーリングの利用は依然黎明期の状態であり今後 HPC とアニーリングのハイブリッドな利用による高速化や高精度化が期待されている。HPC 分野におけるアニーリングの利用が依然黎明期である理由としては、HPC において有用なアニーリングの活用方法が未だ研究段階であること、及びアニーリングが通常のプログラミング型ではなく、問題をイジングモデルに落とし込むことが必要であるため HPC ユーザの導入難易度が高いためであると考えられる。さらに HPC とアニーリングのハイブリッド実行による計算加速の期待が非常に高いものの、HPC 分野で

の有効なユースケースが現段階においては非常に少ないことも HPC におけるアニーリング導入拡大の障壁となっている。

国内、及び欧州の複数の HPC 計算センターにおいて疑似量子アニーリング導入の実証実験を実施した。HPC 計算センターはアニーリング/疑似量子アニーリングへの興味は非常に高いものの、科学シミュレーションを主とする HPC ユーザの中での利用が想定よりも拡がらないケースが多くあった。HPC や科学技術シミュレーションの分野において量子アニーリング、及び疑似量子アニーリングの利用を進める為には、HPC と親和性のある言語の利用などによるアニーリング技術の利用難易度を下げること、及び流体シミュレーションや気象など主要な HPC アプリケーションにおけるアニーリング技術の活用事例・活用方法の開発が急務である。

#### 7.4.1.2 HPC 最適化のためのアニーリングの活用

HPC 分野においては半導体製造プロセスの進化が鈍化し、従来のムーアの法則に従う計算性能向上は得られなくなっている。一方で、システムの計算性能向上ニーズは依然として高いため、システムの計算性能を継続的に高めるためにシステムにおけるプロセッサ数が爆発的に増加し、結果として消費電力が爆発的に上昇している問題がある。さらに、増加したプロセッサによる大規模並列処理においては、システムからより高い実効性能を引き出すことの難しさが増しており、プロセッサやノードに対するジョブ割当や、コア、プロセッサ、及びノード間のロードバランシングが以前にも増して重要な問題となっている。

これら大規模並列処理におけるジョブの割り当てやロードバランシングは一種の組み合わせ最適化問題と言える。このため、米国の複数の研究機関によってアニーリングによる HPC システムのロードバランス最適化の研究が開始されている状況である。システム規模が数千ノードからなる現代の超並列 HPC 環境においては、実効効率や電力効率をいかに高めることができるかが大きな課題であり、これらを最適化するためにアニーリングを用いることは HPC とアニーリング技術の融合を図る上で非常に有用なものと思われる。

既に量子アニーリング、及び疑似量子アニーリングは実用段階にあり商用利用可能であるが、これらの技術を用いて HPC の分野の実課題を解くことが強く求められている。本取組においては将来的 HPC システムと量子コンピュータや疑似量子アニーリング技術を融合させ、より高い実行性能を実現するための調査研究を行っている。HPC システムと既に利用可能な量子技術である量子アニーリング・疑似量子アニーリングシステムのアプリケーションレベルでの融合が、今後 HPC の領域において量子アニーリング・疑似量子アニーリングを利活用していく上で引き続き大きな課題であることが確認できた。

#### 7.4.2 産業分野における量子アニーリング・疑似量子アニーリングの活用

量子アニーリング・疑似量子アニーリングの産業分野での活用状況について、図 7.8 に示す日本・米国・欧州の製造分野、物流分野、金融分野、資源探査分野などの企業にヒアリングを実施した。産業分野においては事業遂行において、例えば物流業界の配送ルート最適化や金融業界におけるポートフォリオ最適化のように NP 困難な問題が多数存在していることが知られている。一般に

これら問題の最適化は熟練の作業者の手作業、または何らかのアルゴリズムや AI、機械学習等を使って最適化の処理が自動化されている。しかしながら産業競争力や経営効率の観点から必要なレベルでの最適な解が出せていないという状況が非常に多いことがわかっている。

産業分野にとってアニーリング技術は膨大な組み合わせの中から競争力・利益・コスト・時間・環境負荷などを考慮しながら適切な組み合わせが得られるツールであり、企業の競争力向上の観点で非常にニーズが高い。以下、各業界におけるアニーリング技術への期待や利用事例について調査した結果を述べる。

#### 7.4.2.1 通信分野

通信分野における組み合わせ最適化問題として、通信のためのネットワーク信号の最適化が挙げられる。特に、移動が発生するモバイル端末位置の把握や通信保持のために発信されるページング信号が増大しており、通信性能への影響が懸念されており、ページング信号を抑制する方法が求められている。

NTT ドコモ社と D-wave 社は、ページング信号数を削減するために、量子アニーリングを活用し、基地局のグルーピングを最適化することでページング信号数を削減することに成功している [151, 147]。ページング信号数を最小化するための基地局のグループを見つける、というページング信号最小化の最適化問題に落としこみ、量子アニーリングによる有効性を検証している。東海、中国、九州の 3 エリアでの実証実験により、ピーク時のページング信号を最大約 15% 削減、平均 7% 削減、約 1.2 倍の端末数が接続できることを確かめている。また、従来の汎用ソルバーで 27 時間掛かっていた処理を、約 40 秒と短い時間で実現したことによって、全国規模にスケールさせることが可能であることが分かった。これによって、通信品質の向上、および通信インフラコストの削減に貢献できる可能性を見出している。

#### 7.4.2.2 マルチメディア分野

マルチメディア分野における組み合わせ最適化問題として、広告の最適化が挙げられる。リクルートは、D-wave の量子アニーリングを活用して、テレビ広告が見られた人数であるリーチ数の最大化を行っている [148]。実際の視聴者のサンプリングから過去の広告視聴データを学習し、機械学習アルゴリズムにより視聴率を推定、その後量子アニーリングによる広告割り当ての最適化を行い、テレビ放送のスケジュールを作成している。複雑な制約がある状況化で、制約を扱うのが得意な量子アニーリングを用いることで、手動のスケジューリング手法よりもリーチ達成度が 90% 向上することが分かり、現場でも活用されている。

#### 7.4.2.3 物流業界

物流業界における組み合わせ最適化問題の主なものとして、配送ルート最適化が挙げられる。配送時間、配送先、配送物、配送手段などを総合的に考慮しつつ、アニーリングにより配送コスト、配送時間、二酸化炭素排出量などの指定された条件を最小化するものである。

従来は熟練の担当者の手作業による最適化、または何らかのアルゴリズムによって自動化する方



図 7.8 アニーリングによる最適化が期待されている応用領域

法が主であり、配送ルート最適化に時間がかかる、または最適化が不十分な解を使わざるを得ないという問題があった。ここにアニーリング技術を適用することにより、計画時間の大幅短縮、配送効率向上によるコスト削減、二酸化炭素排出量削減などの効果が得られることが既にわかっており、物流最適化におけるアニーリングの活用が注目されている。日本・米国・欧州を主体とした地域において、多くの最適化実証実験が実施されているだけではなく、一部の企業は既に実業務にアニーリング技術を導入して物流最適化を実施している状況である。

一例として、NEC フィールディングと NEC が疑似量子アニーリングを用いて物流最適化を行った事例 [161] を図 7.9 に示す。NEC フィールディングの東京地域の物流最適化において、従来は一日分の配送計画作成を人手により実施しており、この配送計画作成に毎日約 2 時間程度の時間を要していた。本配送最適化を疑似量子アニーリングにより実施することにより、計画立案時間を 10 倍程度高速化、さらにトラック台数の 20% 超の削減によりコスト削減、及び二酸化炭素排出量の削減を実現した。世界的にも非常に高い注目を集めしており、今後欧米への拡大が高く期待されている分野である。

Pattison Food Group と D-Wave は E コマースにおける配送計画に量子アニーリングを適用した [162]。E コマース配送を行う店舗は 100 以上で翌日配送が条件であり、従来は配送スケジュールを手動で作成するスタッフが 3 から 4 名程度、一週間に 80 時間の作業をしていた。量子アニーリングを用いて本組合せ最適化を行い配送計画作成時間を 80% 削減した。このような作業はスキルが必要であり後継者不足や人手不足が社会課題となっている。量子アニーリング・疑似量子アニーリングの適用によりこのような社会課題が解決されることが強く望まれている状況である。

また、デンソーは、ライドシェア、そして将来想定されるタクシーとシャトルによるマルチモーダルシェアに向けて、最適化の検証を行っている [160, 146]。D-Wave の量子ソルバーを用いることで、従来のソルバーによるスケジューリングに比べて、京都の実データを利用し、30% の車両数の削減できることを示している。

#### 7.4.2.4 製造業界

製造業界においても多数の組み合わせ最適化問題が存在する。企業にヒアリングして得られた実例の一つとして、工場における生産順序最適化がある。NEC プラットフォームズと NEC は疑似量子アニーリングによる生産順序最低化を実現している [168]。近年、工場の生産ラインにおいては

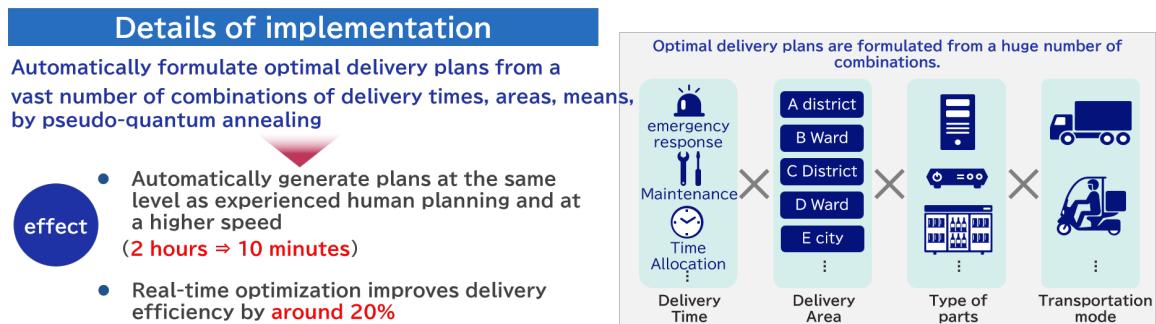


図 7.9 物流業界による配送最適化事例

同一の機械により複数製品の製造が可能となっている場合がある。この生産ラインにおいては複数の製品を製造可能であるが、製造製品を切り替える際の段取り時間が必要となる。ある製品からある製品への製造切替のための段取り時間はそれぞれ異なるため、各製品の生産順序を最適化することにより、生産に要する時間を短縮、または同じ時間でより多くの製品の製造が可能となる。NEC プラットフォームズではプリント基板生産ラインに疑似量子アニーリングによる生産順序最適化を適用し、設備稼働率 15% の向上、及び生産計画立案にかかる時間を 90% 削減した。

また、製造業における製品設計においても、多数の組み合わせ最適化問題があり、これらへの量子アニーリング・疑似量子アニーリング技術の適用が始まっている段階である。このように特に高性能化、低コスト化、高効率化の要求が高い製造業界においてもアニーリング技術が使われ始めている状況であることが確認できた。

#### 7.4.2.5 金融業界

日本、米国、欧州を中心として、複数の金融系企業にヒアリングを実施した。金融業界はアニーリング技術に非常に高い注目をしており、アニーリング技術の活用が広く検討されている状況である。以下に一つの例を示す。

金融業界において株式や債券などのポートフォリオの組み合わせを最適化するニーズがある。これはいわゆる組み合わせ最適化問題であり、設定した条件に基づいてより最適な解ができるだけ高速に得ることが求められている。特に規模の大きい問題に対する求解が可能な疑似量子アニーリングが注目されており、日本のみならず、欧米の金融系企業が実証実験を進めている段階であることが調査によりわかった。図 7.10 に米 ICOSA Computing 社と NEC による金融ポートフォリオ最適化の実証実験例を示す。NEC の疑似量子アニーリングを用いた 25,000 以上の株式ポートフォリオの最適化において、従来手法に対してアニーリング手法を適用することでより優位性の高い結果が得られている [152]。NEC と ICOSA Computing は既に共同でのビジネスを開始しており、金融業界でのアニーリングの活用が大いに期待されている。

現段階ではより大きな規模のポートフォリオ最適化問題を解くために疑似量子アニーリングが用いられているが、今後量子アニーリングが十分なビット数を有した場合、これらポートフォリオ最

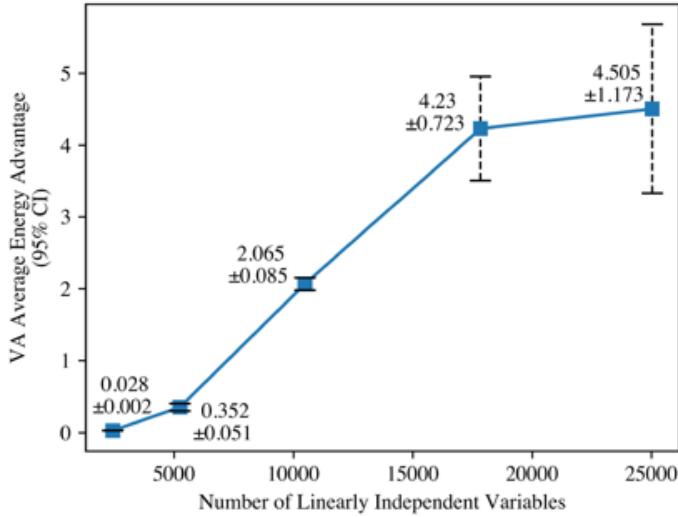


図 7.10 アニーリングによるポートフォリオ最適化事例

適化をより高速に実行することが可能となることが期待される。金融分野においては最適化の処理速度が非常に重要であり、今後の量子アニーリングのビット数拡大が望まれている。

#### 7.4.2.6 資源探査業界

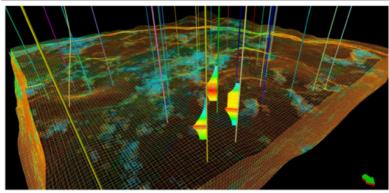
石油資源の探索、及び掘削において、HPC を活用した解析やシミュレーションが使われていることは広く知られている。このため、石油メジャーなどの資源探査企業は TOP500 において上位にランクするような HPC システムを有している場合が多い。

資源探査企業のアニーリング活用状況についてヒアリングを行ったところ、解析精度の向上や、図 7.11 に示す掘削時の掘削順序最適化にアニーリングを活用し大幅な掘削コスト削減などに取組んでいる状況であることがわかった。資源探査分野は石油の埋蔵位置特定のために巨大な HPC システムを活用した解析・シミュレーションを行っており、特定された石油埋蔵位置をより効率的に掘削するための組み合わせ最適化にアニーリング技術を用いている。このように資源探査分野は量子/HPC のハイブリッド計算を既に利活用している先進的な分野であると言える。

#### 7.4.2.7 宇宙・防衛分野

宇宙・防衛分野においても量子アニーリング技術が注目されている。Artificial Brain 社と D-Wave は量子アニーリングを用いて人工衛星の画像キャプチャスケジュールを最適化した [149]。これは撮影の優先度、及びビジネス価値が異なる 10,000 の撮影ターゲットから 400 の撮影対象を適切に選択するものである。量子アニーリングと数理最適手法の比較では量子アニーリングが計算速度で 39% 優位、精度では 23% 優位な結果が得られた。また数理最適手法では 32% のケースで制約条件違反があった。

Davidson Technologies 社と D-Wave は量子アニーリングを用いて防衛設備の被害を最小化するため、飛翔体に対する迎撃装置の割り当てとタイミングの最適化を行った [150]。防衛設備の優先



Subsurface modeling is only the beginning of oil field exploration. Given a map of the distribution of oil and a limited number of resources to develop the field, energy companies must plan a drilling sequence that considers:

- **The value of placing a well at a given location.**
- **The cost of moving a drilling platform from one location to another.**
- **The impact placement of a well has on neighboring locations (well interference)**

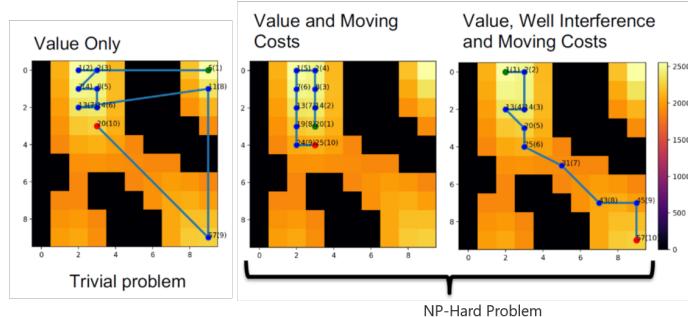


図 7.11 資源探査における最適化事例

順位、迎撃装置、及び迎撃装置の発射時刻から組合せを最適化するものである。量子アニーリングを使った試験では、性能は古典ソルバと同程度であったものの、量子アニーリングの性能が向上することより高い性能優位性が期待されるとしている。古典ソルバや疑似量子アニーリングに対して量子アニーリングは量子効果を用いて瞬時に問題を解くことが可能であり、即応性が求められる防衛領域においては様々な問題に適用することが可能と考えられている。

### 7.4.3 まとめ

以上の調査により、アカデミック分野よりも NP 困難な問題が多い産業分野でのアニーリング活用が進んでいる状況であることがわかった。一方で、アカデミック分野においても大規模 HPC システムにおけるロードバランシングなど膨大な組み合わせの中から最適な組み合わせを探索することにより高速化・高精度化・高効率化・低消費電力化などが期待されており、今後 HPC と量子アニーリング・疑似量子アニーリングのハイブリッドな利活用が強く求められている。

将来的には量子アニーリングのビット数が十分に大きくなり、疑似量子アニーリングで解いている問題を数百～数千倍の速度で求解できることが期待されている。これにより量子アニーリングの適用分野がより広くなると考えられる。

## 参考文献

- [143][online] Available:[http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/..](http://comopt.ifi.uni-heidelberg.de/software/TSPLIB95/)
- [144] Michael Booth, Steven P. Reinhardt, and Aidan Roy. *Partitioning Optimization Problems for Hybrid Classical/Quantum Execution*. Tech. rep. D-wave Systems, Inc., Oct. 2017. URL: [https:](https://)

- //www.dwavesys.com/resources/white-paper/partitioning-optimization-problems-for-hybrid-classical-quantum-execution/.
- [145]Vicky Choi. “Minor-embedding in adiabatic quantum computation: I. The parameter setting problem”. In: *Quantum Information Processing* 7 (2008), pp. 193–209.
- [146]D-Wave. *DENSO: Optimizing Transportation with Quantum Computing*. [https://www.dwavesys.com/media/f1hpibxr/denso-case-study2\\_v3.pdf](https://www.dwavesys.com/media/f1hpibxr/denso-case-study2_v3.pdf). June 2023.
- [147]D-Wave. *NTT DOCOMO and D-Wave Improve Mobile Network Performance by 15% with Quantum Optimization Technology*. <https://www.dwavesys.com/company/newsroom/press-release/ntt-docomo-and-d-wave-improve-mobile-network-performance-by-15-with-quantum-optimization-technology/>. Aug. 2024.
- [148]D-Wave. プロダクションにおける量子: テレビコマーシャルのリーチの最大化. [https://dwavejapan.com/app/uploads/2023/06/DWave\\_Recruit\\_Japan\\_v4.2.pdf](https://dwavejapan.com/app/uploads/2023/06/DWave_Recruit_Japan_v4.2.pdf). June 2023.
- [149]Kshitij Dave et al. *Efficient Earth Observation Satellites Mission Planning with Quantum Algorithm*. Tech. rep. Artificial Brain, 2023.
- [150]Davidson’s President Highlights Quantum Computing for National Defense at D-Wave’s Qubits Conference. Tech. rep. Davidson, June 2024.
- [151]NTT DOCOMO. サービスの最適化をめざし量子コンピューティング基盤を開発. [https://www.nttdocomo.ne.jp/binary/pdf/info/news\\_release/topics\\_240627\\_01.pdf](https://www.nttdocomo.ne.jp/binary/pdf/info/news_release/topics_240627_01.pdf). June 2024.
- [152]M. Esencan et al. *Improved and large-scale portfolio optimization using Vector Annealing*. Tech. rep. ICOSA Computing, Mar. 2023.
- [153]Edward Farhi et al. “A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem”. In: *Science* 292.5516 (2001), pp. 472–475.
- [154]Hayato Goto, Kosuke Tatsumura, and Alexander R Dixon. “Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems”. In: *Science advances* 5.4 (2019), eaav2372.
- [155]Mark W Johnson et al. “Quantum annealing with manufactured spins”. In: *Nature* 473.7346 (2011), pp. 194–198.
- [156]Tadashi Kadowaki and Hidetoshi Nishimori. “Quantum annealing in the transverse Ising model”. In: *Physical Review E* 58.5 (1998), p. 5355.
- [157]Andrew D. King et al. *Computational supremacy in quantum simulation*. 2024. arXiv: 2403.00910 [quant-ph]. URL: <https://arxiv.org/abs/2403.00910>.
- [158]Scott Kirkpatrick, C Daniel Gelatt, and Mario P Vecchi. “Optimization by simulated annealing”. In: *science* 220.4598 (1983), pp. 671–680.

- [159]Kazuhiko Komatsu et al. “Performance evaluation of a vector supercomputer SX-aurora TSUBASA”. In: *SC18: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*. IEEE. 2018, pp. 685–696.
- [160]Akira Miki. *Practical Advantage of Route Optimization Systems*. Tech. rep. DENSO, Nov. 2022.
- [161]NEC と NEC フィールディング、量子コンピューティング技術を活用した保守部品の配送計画立案システムを本格導入. [https://jpn.nec.com/press/202209/20220909\\_03.html](https://jpn.nec.com/press/202209/20220909_03.html). Sept. 2022.
- [162]*Optimizing e-commerce logistics*. Tech. rep. Davidson, 2024.
- [163]F. Pedregosa et al. “Scikit-learn: Machine Learning in Python”. In: *Journal of Machine Learning Research* 12 (2011), pp. 2825–2830.
- [164]Fumiyo Takano et al. *QUBO solver for combinatorial optimization problems with constraints*. Tech. rep. 4. NEC Corporation, Nov. 2019.
- [165]Kota Takehara et al. “A Multiple Coefficients Trial Method to Solve Combinatorial Optimization Problems for Simulated-annealing-based Ising Machines”. In: *2019 IEEE 9th International Conference on Consumer Electronics (ICCE-Berlin)*. 2019, pp. 64–69. DOI: 10.1109/ICCE-Berlin47944.2019.8966167.
- [166]Takashi Takemoto et al. “4.6 A 144Kb Annealing System Composed of  $9 \times 16$ Kb Annealing Processor Chips with Scalable Chip-to-Chip Connections for Large-Scale Combinatorial Optimization Problems”. In: *2021 IEEE International Solid-State Circuits Conference (ISSCC)*. Vol. 64. 2021, pp. 64–66. DOI: 10.1109/ISSCC42613.2021.9365748.
- [167]岩井 大介. 量子インスピアードコンピューティング デジタルアニーラとその応用. Tech. rep. 富士通株式会社, Sept. 2022.
- [168]量子コンピューティング技術の活用で複雑な生産計画立案の自動化に成功～設備稼働率15%向上、計画立案工数90%削減を実現. [https://jpn.nec.com/quantum\\_annealing/case/necplatforms/index.html](https://jpn.nec.com/quantum_annealing/case/necplatforms/index.html). Mar. 2023.

表 7.1 性能評価に用いたイジングマシン.

Ising machines	Hardware	Max bits	Full bits	Connectivity	Bit precision
D-wave 2000Q	QPU	2,048	64	Chimera	5 - 6 bit (Analog)
D-wave Advantage	QPU	5、 760	124	Pegasus	5 - 6 bit (Analog)
D-wave Advantage2 Proto	QPU	563		Zephyr	5 - 6 bit (Analog)
D-wave Hybrid and CQM	QPU & digital	N/A	N/A	N/A	N/A
D-wave Neal	Xeon 6126	N/A	N/A	Full	64 bit
NEC Vector Annealer	VE Type 20B	100,000+	100,000	Full	32 bit
Fixstars Amplify Annealing Engine	GPU A100	262,144+	131,072	Full	32/64 bit
Toshiba SQBM+	GPUs	10,000,000	31,000	Full	Digital
Hitachi CMOS Annealer	GPU	61,952	176	King	3 bit
Fujitsu Digital Annealer	GPU	100,000	100,000	Full	Digital

表 7.2 性能評価に用いたイジングマシンのパラメータ.

Ising machines	Initial temp.	Final temp.	#. iterations	Annealing time
D-wave 2000Q	N/A	N/A	N/A	20 $\mu$ sec
D-wave Advantage	N/A	N/A	N/A	0.5-2000 $\mu$ sec
D-wave Advantage 2 prototype	N/A	N/A	N/A	20 $\mu$ sec
D-wave Hybrid and CQM	N/A	N/A	N/A	N/A
D-wave Neal	10-1000	0.2-0.0002	10-10000	N/A
NEC Vector Annealer	10-10000	0.2-0.0002	10 - 100	N/A
Fixstars Amplify Annealing Engine	N/A	N/A	100	1 - 600,000
Toshiba SQBM	N/A	N/A	Auto	N/A
Hitachi CMOS Annealer	10-1000	0.2-0.0002	10-10000	N/A
Fujitsu Digital Annealer	N/A	N/A	N/A	1 - 3 sec

## 様式第21

### 学会等発表実績 委託業務題目「次世代計算基盤に係る調査研究（新計算原理調査研究）」

機関名 慶應義塾大学

#### 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
“Nex富岳Feasibility Study新計算原理チークの現状報告”、口頭	天野英晴	Qstarワーキンググループ	2023年9月	国内
“量子コンピュータとのハイブリッドコンピューティングの現状”、口頭	天野英晴	アクセラレーターアクション	2023年9月	国内
“Survey of Hybrid Computing of Quantum-Classical”、口頭	H. Amano	HPCI Asia 2024 Keyonte	2024年1月	国際学会
量子コンピュータースーパーコンピュータ連携への期待”、口頭	天野英晴	理研NEDOプロジェクトキックオフシンポジウム	2024年3月	国内

機関名 国立大学法人 東北大学

#### 1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
A feasibility study of quantum annealing for the next-generation computing infrastructure	Kazuhiko Komatsu	35th Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP' 35)	2023年4月	国外
コンピュータ研究者は、量子コンピュータを研	天野 英晴、谷本輝夫、	並列／分散／協調処理に関するサマ	2023年8月	国内

究する(勉強する)必要 があるのだろうか?	上野洋典、 小松一彦、 佐野健太郎、 平木敬	一・ワークショッ プ (SWoPP2023)		
Performance Evaluation of Ising Machines using Constraint Combinatorial Optimization Problems	Kazuhiko Komatsu, Makoto Onoda, Masahito Kumagai, Hiroaki Kobayashi	10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023)	2023年8月	国外
巡回セールスマン問題 による並列ベクトルア ニーリングの評価	小野田 誠、 小松 一彦、 伴内 光太 郎、 百瀬 真 太郎、 佐藤 雅之、 小林 広明	第193回ハイパフ オーマンスコンピ ューティング研究 発表会	2024年3月	国内

## 2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題 目）	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等 名)	発表した時 期	国内・ 外の別
Ising-Based Kernel Clustering	Masahito Kumagai, Kazuhiko Komatsu, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi	Algorithms, 16(4) 214-214	2023年4月	国外
Investigating the Characteristics of Ising Machines	Kazuhiko Komatsu, Makoto Onoda,	Proceedings of IEEE International Conference on	2023年9月	国外

	Masahito Kumagai, Hiroaki Kobayashi	Quantum Computing and Engineering		
A Constraint Partition Method for Combinatorial Optimization Problems	Makoto Onoda, Kazuhiko Komatsu, Masahito Kumagai, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi	2023 IEEE 16th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoC)	2023年12月	国外

機関名　日本電気株式会社

1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
NEC's Strategy and Status of Quantum Computing Business	Shintaro Momose	35th Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP' 35)	2023年4月	国内

機関名 理化学研究所

1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
“富岳と量子コンピュータをつなごう～新時代の異種複合演算加速装置・量子HPC連携ハイブリッドプラットフォームの実現に向けて” 口頭	辻美和子	第15回 自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (ATTA2023)	2023年12月	国内
“Quantum-classical hybrid method for microcanonical ensembles” 口頭	Kazuhiro Seki	RIKEN-Quantinuum Joint Symposium	2023年7月	国内
“Quantum-classical hybrid method for microcanonical ensembles” 口頭	Kazuhiro Seki	The 7th RIKEN - S&TDC Seminar on Quantum Computing	2023年11月	国内
“量子コンピュータによる量子ダイナミクスと量子優位性” 口頭	柚木清司	量子イノベーションイニシアティブ協議会 第9回セミナー	2023年9月	国内
“物性物理学における量子コンピュータ応用” 口頭	柚木清司	KEK素核研物構研連携研究会2024	2024年3月	国内
“テンソルネットワーク法を用いた量子計算のシミュレーション” 口頭	白川知功	第4回量子ソフトウェアワークショップ：NISQ計算機時代の量子シミュレーションと量子コンピュータシミュレーション	2023年12月	国内

2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌等名）	発表した時期	国内・外の別
Efficient variational quantum circuit structure for correlated topological phases	Rong-Yang Sun, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki	Phys. Rev. B 108, 075127 (2023)	2023年8月	国外