

# 量子ソフトウェア・アプリケーション 量子ベンチャー・若手

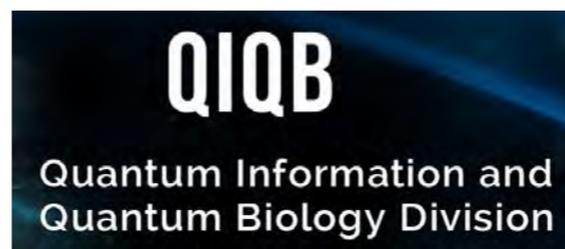
藤井 啓祐

大阪大学基礎工学研究科 システム創成専攻 教授

大阪大先導的学際研究機構 量子情報・量子生命部門 兼任

JSTさきがけ研究者 兼任

株式会社 QunaSys 最高技術顧問 兼任



# 自己紹介：藤井 啓祐



2008年4月～2011年3月

京都大学 工学研究科 原子核工学専攻 博士課程  
日本学術振興会特別研究員 DC1



2011年4月～2013年3月

大阪大学 基礎工学研究科 物質創成専攻 井元研 特任研究員



2013年4月～2015年3月

京都大学 白眉センター  
(情報学研究科 通信情報システム専攻 岩間研 特定助教)



2015年4月～2016年3月

京都大学 白眉センター  
(理学研究科 物理学宇宙物理学専攻 高橋研 特定助教)

2016年4月～

東京大学 工学系研究科 光量子科学研究センター 小芦研 助教  
(理工学専攻 兼担)



東京大学  
THE UNIVERSITY OF TOKYO

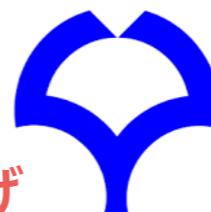
2017年10月～

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻 特定准教授 (卓越研究員)



2019年4月～

大阪大学 基礎工学研究科 システム創成専攻 教授



新たに量子コンピューティング研究グループを立ち上げ

- JST さきがけ研究者
- IPA未踏プロジェクト未踏ターゲット事業ゲート型量子コンピュータ PM
- 文科省QLEAP 基礎基盤研究 研究代表者

# 量子ソフトウェア・アプリケーション

- ・ 大規模な量子コンピュータができれば**指数関数的な計算の加速**を享受できる(今後20年)
- ・ 現在は小・中規模の量子コンピュータ=**NISQ**(noisy intermediate scale quantum devices)
- ・ **NISQの活用は不確実**であるが各国が政府企業の競争が激化する**喫緊の課題**

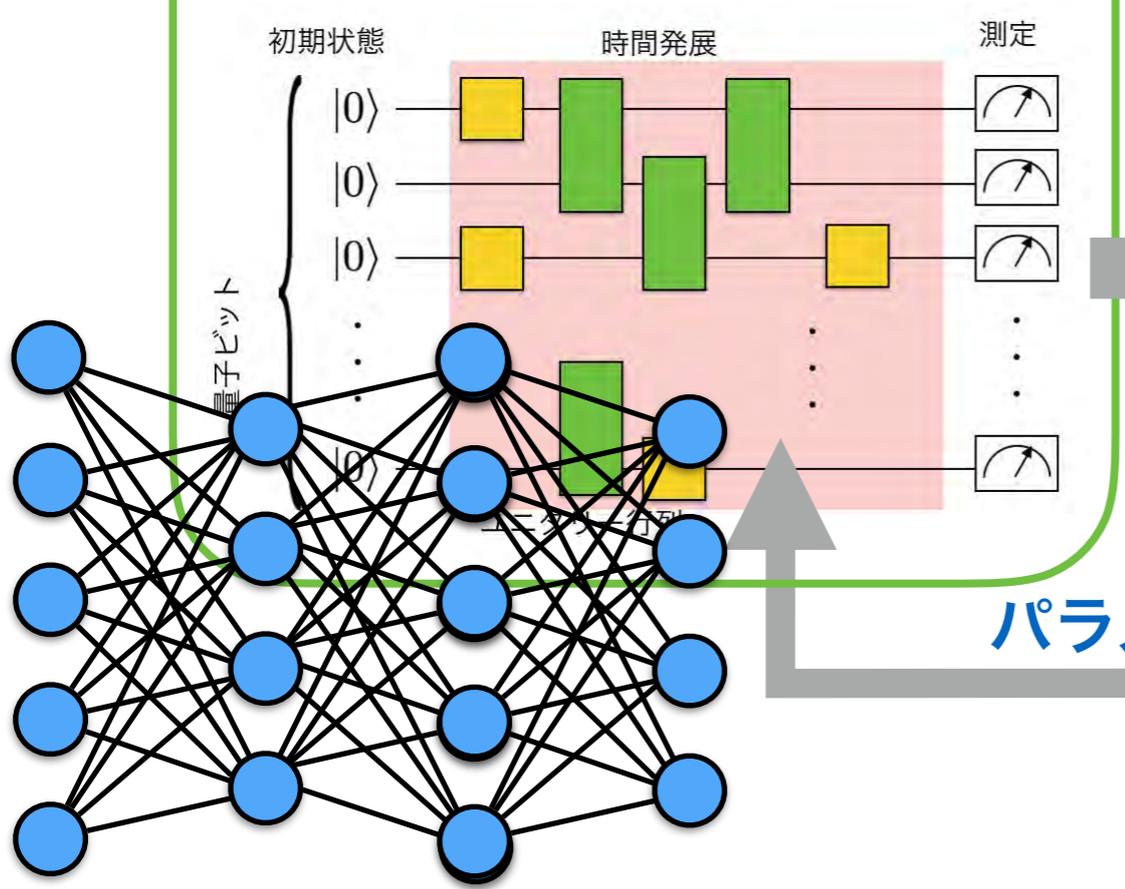
既存の量子アルゴリズムと考え方が少し異なる=ゲームチェンジ

## 量子コンピュータ

## 古典コンピュータ

量子にしかできないタスク

古典でもできるタスク



測定結果の取得



パラメータの調整

量子古典ハイブリッドアプローチ

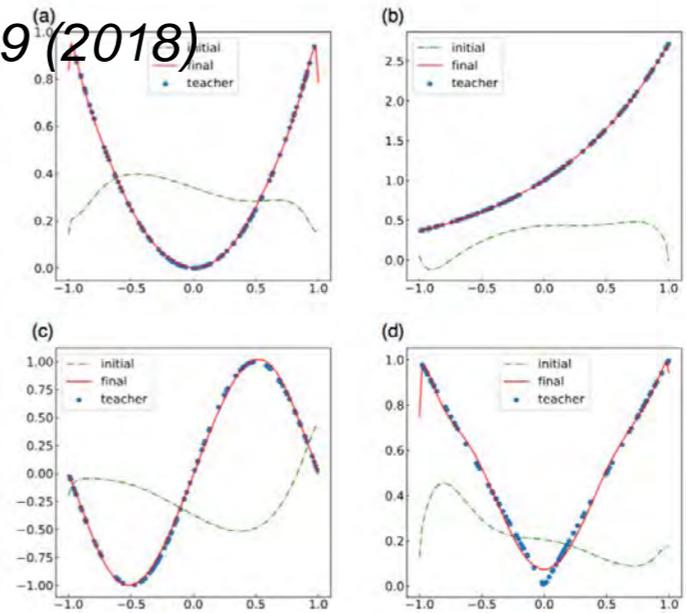
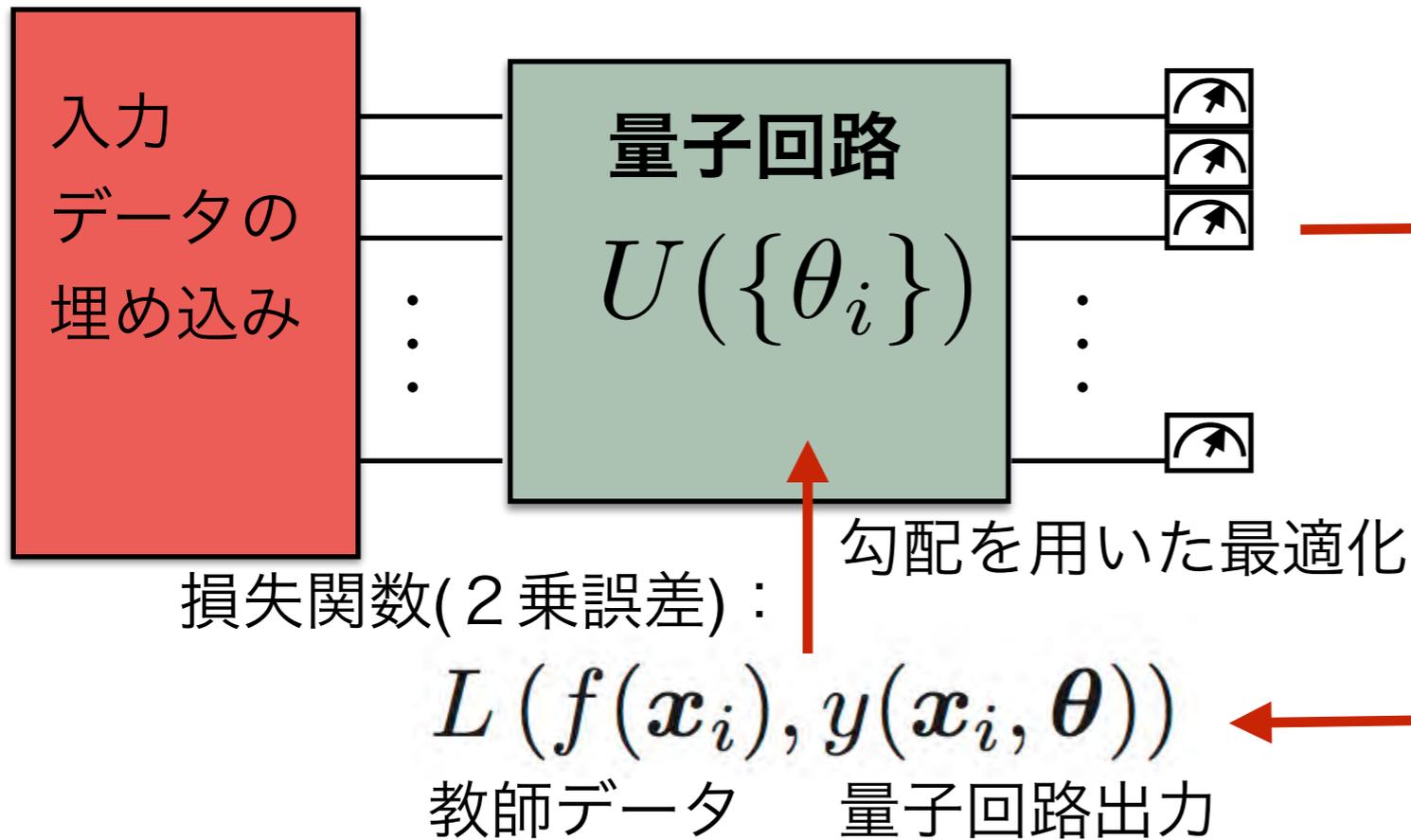
# 量子コンピュータ×AI

AI(機械学習)の産業利用には、**データの整備・計算能力向上・調整法**が大きく寄与。  
**世界に先駆けて**NISQ用量子機械学習アルゴリズムとそのパラメータ調整法を提案。

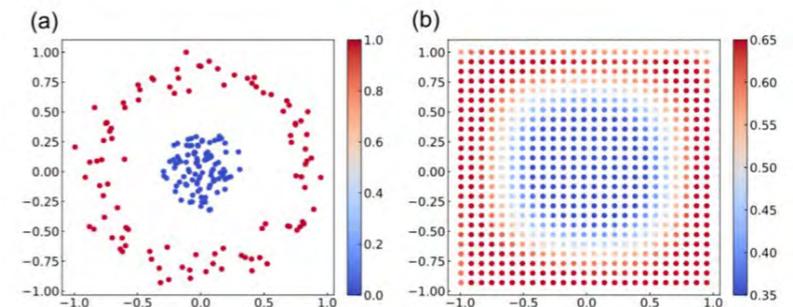
“Quantum Circuit Learning”,

K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)

- 変分量子回路を用いた教師あり学習
- テンソル積構造による非線型性とユニタリ変換



## 非線形関数の学習 (汎化)



## 2値分類問題の学習

AIの歴史では第一次ブームに相当。

根本的な枠組みづくりに貢献できるフェイズ→競争は激化中(特に、米国・中国・カナダ)

# 量子コンピュータ×AI

AI(機械学習)の産業利用には、データの整備・

世界

“Quantum”  
K. Mitarai

- ・変
- ・ラ

1. Mitarai, K., Negoro, M., Kitagawa, M. & Fujii, K. Quantum circuit learning. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1803.00745> (2018).

約1年で36件の引用

IBM(米), Rigetti(米), Xanadu(カナダ), 本源量子(中国), QxBranch(米), QCware(米), Zapata(米) を含む

LETTER

nature  
International journal of science

<https://doi.org/10.1038/s41586-019-0980-2>

and interference. Here we propose and experimentally implement two quantum algorithms on a superconducting processor. A key component in both methods is the use of the quantum state space as a feature space. The use of a quantum-enhanced feature space is only efficiently accessible on a quantum computer provides a possible path to quantum advantage. The algorithms solve a problem of supervised learning: the construction of a classifier. One method, the quantum variational classifier, uses a variational quantum circuit<sup>1,2</sup> to classify the data in a way similar to the method of conventional SVMs. The other method, a quantum kernel estimator, estimates the kernel function on the quantum computer and optimizes a classical SVM. The two methods provide tools for exploring the applications of noisy intermediate-scale quantum computers<sup>3</sup> to machine learning.

The intersection between machine learning and quantum computing has attracted considerable attention in recent years<sup>4-6</sup>. This has led to a number of recently proposed quantum algorithms<sup>1,2,7-9</sup>. Here we present two quantum algorithms that have the potential to run on near-term quantum devices. A suitable class of algorithms for such noisy devices employs short-depth circuits, because they are amenable to error-mitigation techniques that reduce the effect of decoherence<sup>10,11</sup>. There are convincing arguments to indicate that even very simple circuits are hard to simulate classically<sup>12,13</sup>. The algorithm we propose takes on the original problem of supervised learning: the construction of a classifier. For this problem, we are given data from a training set  $T$  and a test set  $S$  of a subset  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ . Both are assumed to be labelled by a map  $m: T \cup S \rightarrow \{+1, -1\}$  unknown to the algorithm. The training algorithm receives only the labels of the training data  $T$ . The goal is to infer an approximate map on the test set  $\tilde{m}: S \rightarrow \{+1, -1\}$  such that it agrees with high probability with the true map  $m(s) = \tilde{m}(s)$  on the test data  $s \in S$ . For this task to be meaningful it is assumed that there is a correlation between the labels given for training and the true map. A classical approach to this problem uses so-called support vector machines (SVMs)<sup>14</sup>. A quantum version of this approach has already been proposed in ref. <sup>15</sup>, where an exponential improvement can be achieved if data is provided in a coherent superposition. However, when data is provided in the conventional way, that is, from a classical computer, then the methods of ref. <sup>15</sup> do not yield this speed-up.

Here we propose two binary classifiers that process data that is provided classically and use the quantum state space as feature

processor with five coupled superconducting transmons, only two of which are used in this work, as shown in Fig. 2a. In the experiment, we want to separate the question of whether the classifier can be implemented in hardware from the problem of choosing a suitable feature map for a practical dataset. The data that are classified here are chosen so that they can be classified with 100% success to verify the method. We experimentally demonstrate that this success ratio is achieved.

Training and classification with conventional SVMs is efficient when inner products between feature vectors can be evaluated efficiently<sup>14,18,19</sup>. Classifiers based on quantum circuits, such as the one presented in Fig. 2c, cannot provide a quantum advantage over a conventional SVM if the feature vector kernel  $K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = |\langle \Phi(\mathbf{x}) | \Phi(\mathbf{z}) \rangle|^2$  can be computed efficiently on a classical computer. For example, a classifier that uses a feature map that generates only product states can be evaluated in time  $\mathcal{O}(n)$  for  $n$  qubits. To obtain an advantage over classical approaches we need to implement a map based on circuits that are hard to simulate classically. Since quantum computers are not expected to be classically simulable, there exists a long list of (universal) circuit families we can choose from. Here we use a circuit that works well in our experiments and is not too deep. We define a feature map on  $n$ -qubits generated by the unitary  $U_{\phi(\mathbf{x})} = U_{\phi(\mathbf{x})} H^{\otimes n} U_{\phi(\mathbf{x})} H^{\otimes n}$ , where  $H$  denotes the conventional Hadamard gate and

$$U_{\phi(\mathbf{x})} = \exp \left( i \sum_{S \subseteq [n]} \phi_S(\mathbf{x}) \prod_{i \in S} Z_i \right)$$

is a diagonal gate in the Pauli  $Z$ -basis; see Fig. 1b. This circuit acts on the initial state  $|0\rangle^n$ . We use the coefficients  $\phi_S(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$  to encode the data  $\mathbf{x} \in \Omega$ . In general any diagonal unitary  $U_{\phi(\mathbf{x})}$  can be used if it can be implemented efficiently. This is, for instance, the case when only weight  $|S| \leq 2$  interactions are considered. The exact evaluation of the inner product between two states generated from a similar circuit with only a single diagonal layer  $U_{\phi(\mathbf{x})}$  is  $\#P$ -hard<sup>20</sup>. Nonetheless, in the experimentally relevant context of additive error approximation, simulation of a single-layer preparation circuit can be achieved efficiently classically by uniform sampling<sup>21</sup>. We conjecture that the additive error approximation of inner products generated from circuits with two Hadamard layers and diagonal gates is hard classically; see Supplementary Information for a discussion.

<sup>1</sup>IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY, USA. <sup>2</sup>Department of Computer Science, University of Oxford, Wolfson Building, Parks Road, Oxford, UK. <sup>3</sup>Center for Theoretical Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, USA. \*e-mail: adoorcoo@us.ibm.com; kptemme@ibm.com

入力  
データの  
埋め込み

量子回路  
 $U(\{\theta_i\})$

損失関数(2乗誤差):

$$L(f(\mathbf{x}_i), y(\mathbf{x}_i, \theta))$$

教師データ 量子回路出力

勾配を用いて

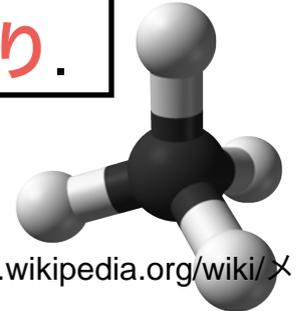
AIの歴史では第一次ブームに相当.

根本的な枠組みづくりに貢献できるフェイズ

脱手は激化中(特に、米国・中国・カナダ)

# 量子コンピュータ×量子化学

化学は、**人類の生命活動**においてもっとも重要なプロセス.DFT(密度汎関数法=従来方法)も非常に強力であるが、**対応できない量子性の強い重要課題あり.**



<https://ja.wikipedia.org/wiki/メタン>

## 例1)遷移金属を含む、多核金属触媒の反応過程

鉄を含むものなどは強相関で、複数のスピン状態をとり複雑

→ **メタン(豊富な炭素源)などを活性化する触媒・エネルギー問題の新たな選択肢**

## 例2)光機能材料(太陽電池・有機発光材料)

DFTは一般的に、励起状態やダイナミクスは不得意

「私たちの研究室の半分ぐらいは**コンピュータを専門とする研究者**に変えてしまいました  
 と思っていますぐらいです。」 (九大安達先生 2017.8.2) [http://www.mext.go.jp/b\\_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/093/gijiroku/1397748.htm](http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/093/gijiroku/1397748.htm)

## 例3)重原子の化学(ウラン・アクチノイド)

核燃料等からの選択的回収の必要性, 軌道が縮退しやすく難しい

ウラン分子U<sub>2</sub> :5重結合(2005Nature)→4重結合(2019NatureChem)

## • NISQを用いた量子化学計算

[励起状態] K. M. Nakanishi, K. Mitarai, **K. Fujii**,

“Subspace-search variational quantum eigensolver for excited states”, arXiv (2018)

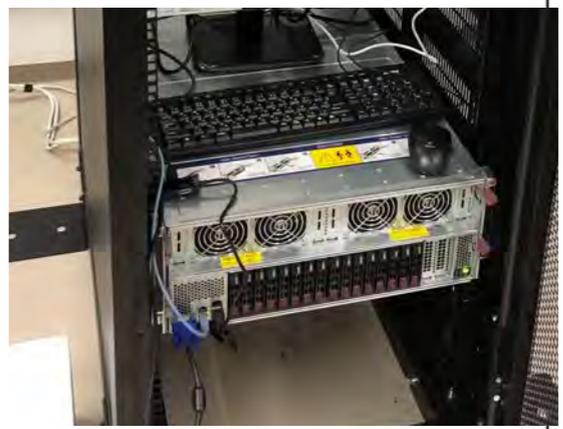
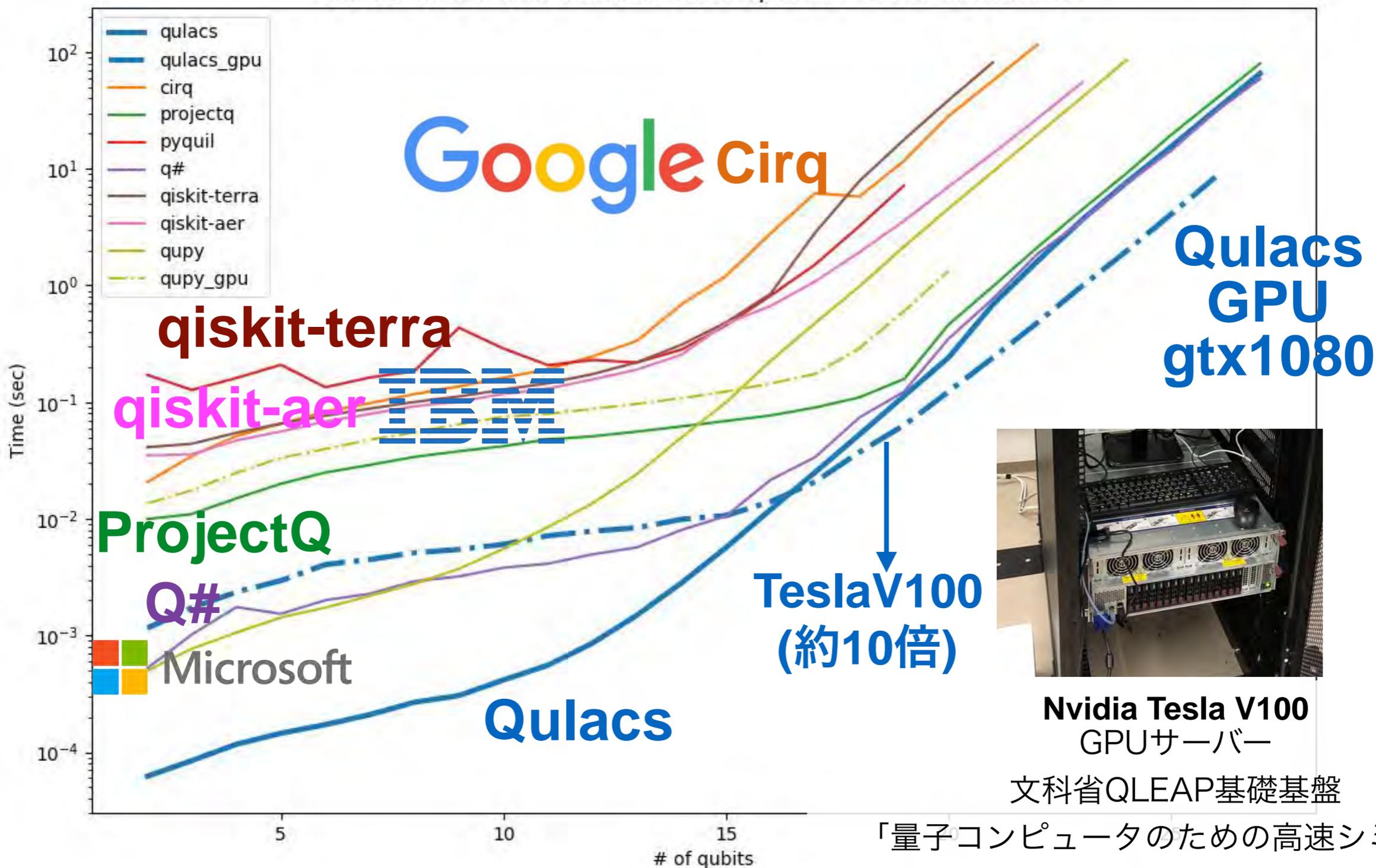
[量子機械学習×量子化学] K. Mitarai, T. Yan, **K. Fujii**, “Generalization of the output of variational quantum eigensolver by parameter interpolation with low-depth ansatz”, Phys Rev Applied (2019)

**物性物理学・量子化学は計算機インフラとともに発展.量子コンピュータは新たなツール.**

# Qulacs: <http://qulacs.org> <https://www.github.com/qulacs/qulacs>

## 世界最高速オープンソース量子コンピュータシミュレータ

10 layers of random-Xrot for each, 9 layers of neighboring-CNOTs, and 100 shots of sampling.  
Device: Core-i7 8700 and GTX1050Ti. Open-MP and MKL are enabled.



Nvidia Tesla V100 GPUサーバー

文科省QLEAP基礎基盤

「量子コンピュータのための高速シミュレーション環境構築と量子ソフトウェア研究の展開」

# 量子コンピュータソフトウェアベンチャ:QunaSys



楊天任  
CEO

## TEAM



御手洗 光祐  
CTO



中川 裕也  
Chief Engineer



山本貴博  
Engineer

## ADVISERS



藤井 啓祐



根来 誠



水上 渉

- ・ 高速シミュレータ
- ・ 材料メーカー等と協業
- ・ 国際学会等で採択
- ・ 論文を発表
- ・ 実機の利用(Rigetti)
- ・ 教育環境の整備

+インターン8人  
(東大・東工大・慶應・  
東京理科・阪大)

- ・ 2016年頃から起業を模索  
→ 2018年2月に起業, ANRIから調達.
- ・ 基礎研究(面白い)が直接産業応用(役に立つ)へのカギを握る稀有な分  
→ **簡単にコモディティー化できない**
- ・ 量子コンピュータは**優秀な学生が集まるキーワード**
- ・ 現在の大学システムが必ずしもこの分野の急激な変化に対応しきれていない  
→ **最先端の研究教育の場**

# 量子コンピュータソフトウェアベンチャ:QunaSys

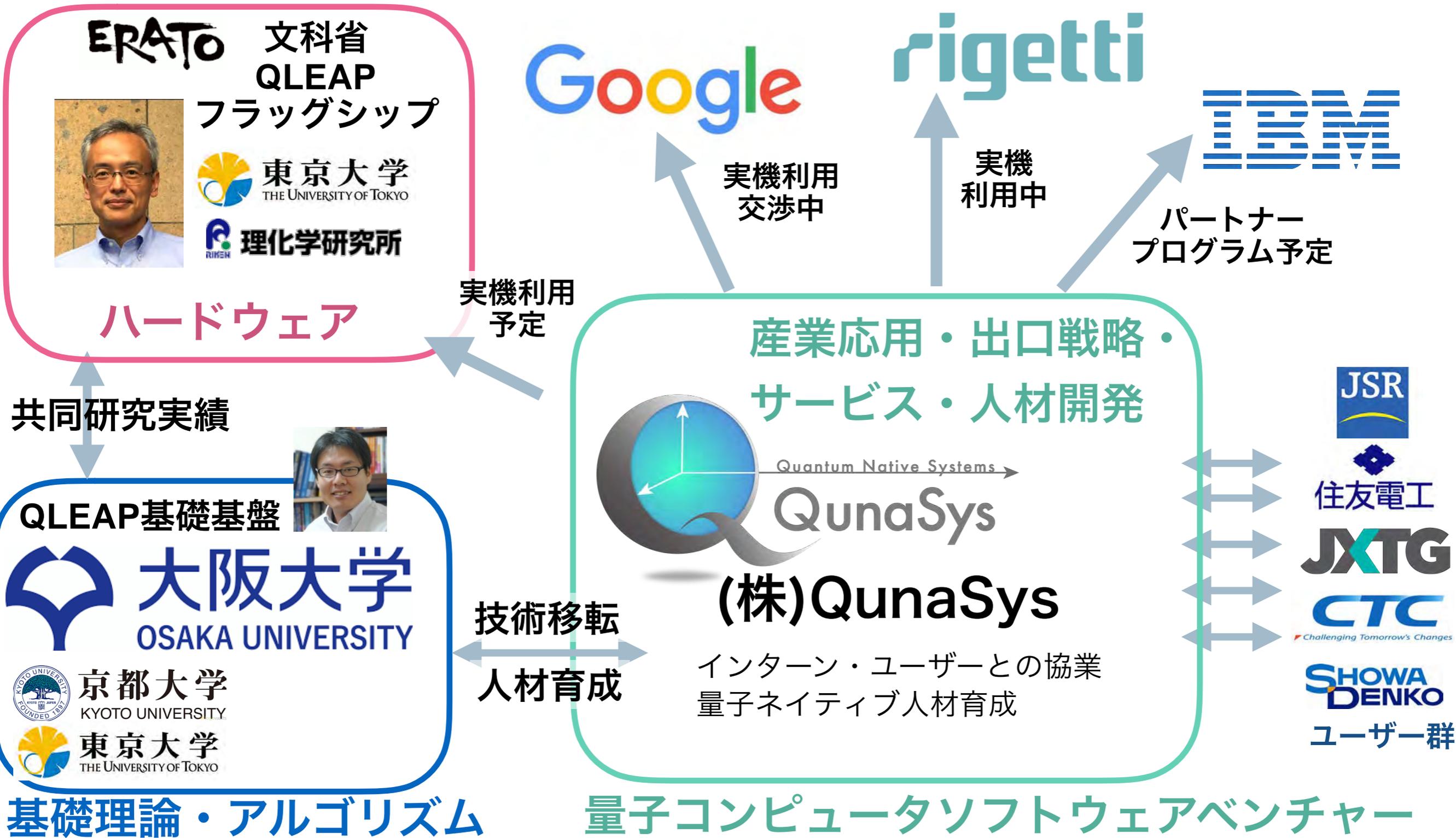


Relative growth of APS divisions, 2015–2019



- 2016年頃から起業を模索  
→ 2018年2月に起業, ANRIから調達.
- 基礎研究(面白い)が直接産業応用(役に立つ)へのカギを握る稀有な分  
→ 簡単にコモディティー化できない
- 量子コンピュータは**優秀な学生が集まるキーワード**
- 現在の大学システムが必ずしもこの分野の急激な変化に対応しきれていない  
→ **最先端の研究教育の場**

# 日本版量子コンピュータ開発エコシステム 9



各プレイヤーが自身の得意領域を互いを俯瞰しながら開発することで量子コンピュータ産業が立ち上がる土俵→世界のエコシステムの一員へ

# 若手研究者として

文科省QLEAP基礎基盤研究

「量子コンピュータのための高速シミュレーション環境構築と量子ソフトウェア研究の展開」

量子計算  
基礎理論



森前智行  
(京大 講師)



フランソワ・ルガル  
(京大特定准教授),



竹内勇貴  
(NTTリサーチアソシエイト)

メンバー業績(トップ会議・雑誌):  
Nature Comm. x1, PRX x3, PRL x11,  
PRApplied x4, ICALP x3, STOC,  
FOCSx2, SODAx2, PODCx2 QIPx6

量子計算全般  
量子ソフトウェア  
実験との連携



藤井啓祐  
(阪大 教授)



根来誠  
(阪大 特任准教授)



御手洗光祐  
(阪大D2)

先導的学際研究機構  
量子情報・量子生命部門

量子化学計算:

+特任准教授(量子化学計算7月から)&ポスドク(量子情報)



量子機械学習

・人工知能



中嶋浩平  
(東大 特任准教授)

先端人工知能教育寄付講座

+ ポスドク



若手がすでに世界的に活躍。  
さらなる支援・若手による若  
手の継続的な育成が必要

# 若手研究者として

文科省QLEAP基礎基盤研究

「量子コンピュータのための高速シミュレーション環境構築と量子ソフトウェア研究の展開」

量子計算  
基礎理論



森前智行  
(京大 講師)

- 国際会議TQC'17,'18 AQIS'17 プログラム委員
- AQIS2018招待, AQC2019招待
- 2019 5月 Google AI Quantum Spring Symposium 招待のみ150人(産業・政府・研究者)
- 2020国際ワークショップ



DiVincenzo, Whaley, Hastings, Preskill, Zoller, Jozsa, Knill, Troyer, Harrow, Cirac を筆頭に世界の名だたる研究者が集結

→日本人の招待講演は阪大藤井のみ=危機的状況



藤井啓祐  
(阪大 教授)

量子化学  
+特任准教授

量子計算全般  
量子ソフトウェア  
実験との連携



量子機械学習

• 人工知能



中嶋浩平  
(東大 特任准教授)

先端人工知能教育寄付講座

+ ポスドク



若手がすでに世界的に活躍。  
さらなる支援・若手による若  
手の継続的な育成が必要

# まとめ

- ・世界で**最も注目**されているアルゴリズム、**世界最速シミュレータ**が日本のグループにある。**量子ソフトウェアでは世界を先行**。
- ・すでに**実績のある若手が活躍**。海外からの**ビジビリティも高い**。
- ・最先端技術を有する量子ベンチャーとも連携し、人材育成にも取り組んでいる。
- ・複数組織にまたがった**量子コンピュータ開発エコシステム（基礎・応用・実験・社会実装の連携）**が形成されつつある。
- ・世界的な競争(米・中国)は熾烈。現在のレベル(理論は世界をリード)を維持するためにも、**研究・教育実績のある若手研究者を急速に支援**しないと、世界から取り残されてしまう。