参考資料２

量子アプリケーションの研究開発・産業動向

JST CRDS
量子チーム（赤木、嶋田、眞子）

2021.11.25

量子技術イノベーション戦略見直し検討WG

© 2021 CRDS

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy Japan Science and Technology Agency

1. 量子アプリケーションの研究開発・技術の現状

研究開発の国際比較（量子コンピューター（ソフトウェア））

		量子コンピューター（ソフトウェア）		
		ソフト		各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
	フェーズ	現状	トレンド	
日本	基礎研究	○	→	• JST 戦略事業（CREST・さきがけ）や共創の場形成支援プログラム、大型プロジェクト（Q-LEAP、SIP、ムーンショット）が開始された。 • 量子技術イノベーション戦略が策定され、国の研究開発投資は増加傾向であるが、研究成果や技術水準としての大きな変化はまだ顕在化していない。
	応用研究・開発	○	→	• Q-LEAPでは量子コンピューターや量子シミュレーションの応用研究が進む。NEC、富士通など企業からの国家プロジェクトへの参画が見られ、産学連携による遂行体制が確立しつつある。 • ソフトウェア関連のスタートアップが登場したが、量・質ともに今後の発展が欲しい。
米国	基礎研究	◎	↗	• DOE傘下の国立研究所や大学で古くから量子技術・量子情報科学の基礎研究が継続。 • 国家プロジェクトNational Quantum Initiativeでも基礎研究重視や研究インフラの整備が唱えられ、2020年に新たな量子拠点づくりに巨額の投資がなされた。 • IEEE Rebooting Computing Initiative などコンピューターサイエンス側も活発な活動が進む。
	応用研究・開発	◎	↗	• Google、IBM、Intel、Microsoft 、Amazonが研究開発を進める。 • 応用研究や開発だけでなく、理論計算機科学や量子誤り訂正符号などの基礎研究も一部の企業で行われている。 • 多様なスタートアップが登場し、大手IT企業との間で協業エコシステムが形成されつつある。
欧州	基礎研究	◎	↗	• 国立研究所や大学で古くから量子技術・量子情報科学の基礎研究が継続。 • EU Quantum Technology Flagshipプロジェクト（1300億円超）がスタートし、第一次採択が決定。英国ではQuantum Technology Hubsのもと400億円規模の国家プロジェクトが2014年から進む。 • オランダ、デルフト工科大学を中心とするQuTechでは、IntelやIBMと共同して、量子コンピューターアーキテクチャーや量子インターネットなどの研究開発が精力的に進められている。
	応用研究・開発	○	↗	• 企業による量子コンピューター研究開発で目立つものは少ない。
中国	基礎研究	○	↗	• 巨額投資をもとに、中国科学院（CAS）を中心に量子情報科学の拠点形成が進む。
	応用研究・開発	○	↗	• CAS-Alibaba 量子計算実験室が設立され、量子コンピューターのクラウド提供を行っている。

〈現状〉
◎ 特に顕著な活動・成果が見えている
○ 顕著な活動・成果が見えている
△ 顕著な活動・成果が見えていない

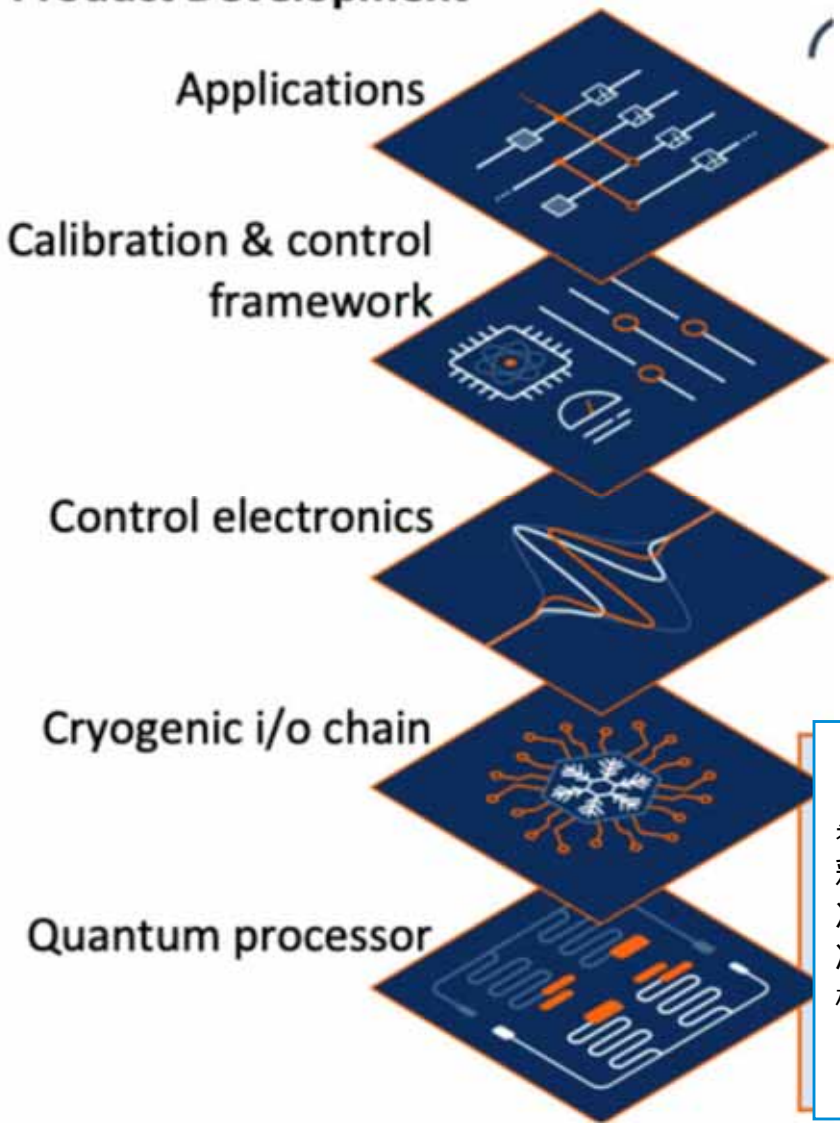
〈トレンド〉
↗：上昇傾向
→：現状維持
↘：下降傾向

JST-CRDS「研究開発の俯瞰報告書　ナノテクノロジー・材料分野（2021年）」
「研究開発の俯瞰報告書　システム・情報科学技術分野（2021年）」

© 2021 CRDS

量子コンピューター実現技術群（超伝導の場合）

ソフトウェアのカバーする範囲



運用時

- 量子アルゴリズム
- プログラミング言語・コンパイラ
- 制御ソフトウェア
- デジタルエレクトロニクス
- アナログエレクトロニクス
- コネクター
- 配線、フィルター
- マウント
- QPU
- アンプ
- 希釈冷凍機

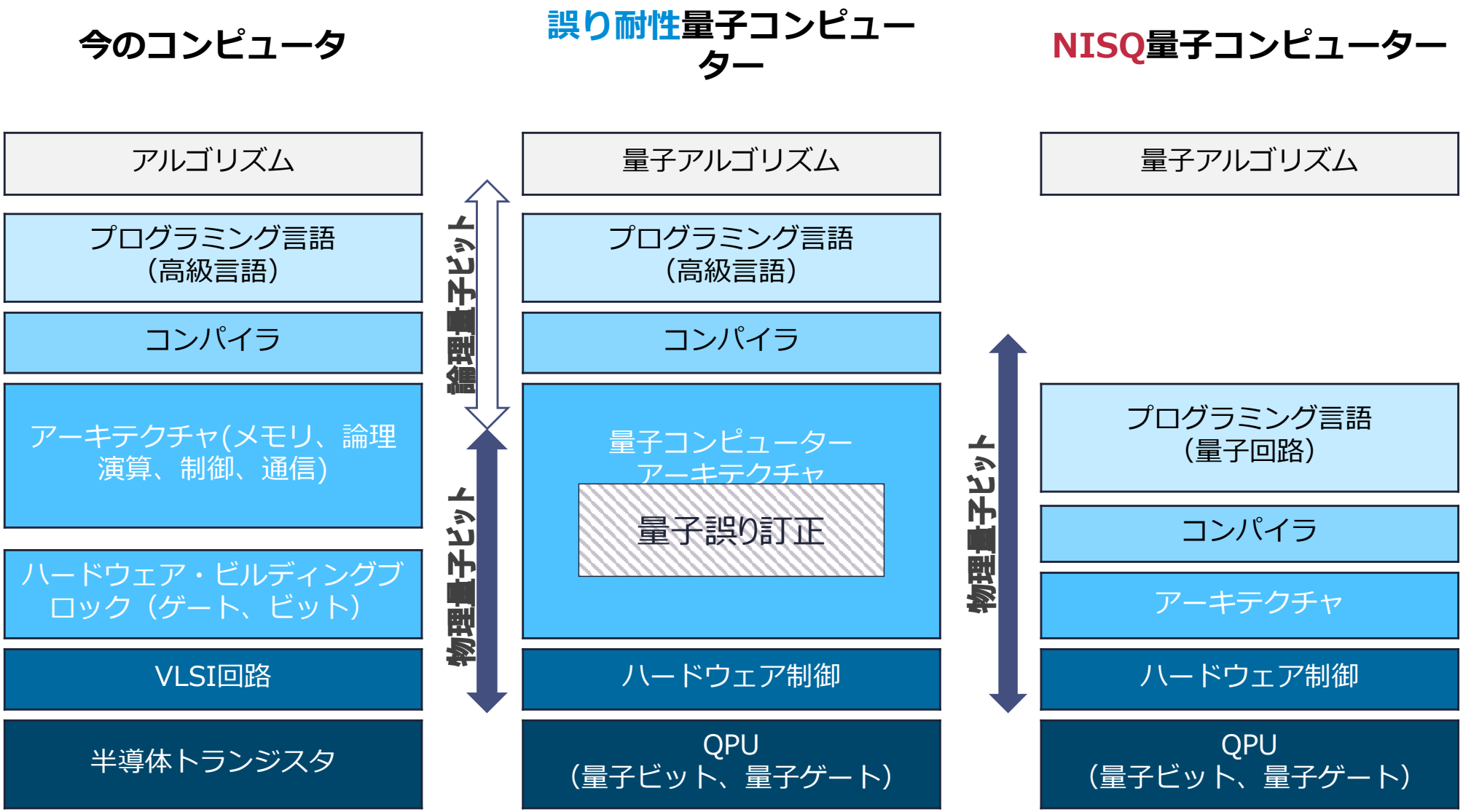
設計・構築時

- チップデザイン（目標パラメータ）
- 回路シミュレーター
- 特性評価
- パルスシミュレーター
- QCVV
- キャリブレーション
- ハードウェアエミュレーター
- チップデザイン（レイアウト）
- ハミルトニアンシミュレーション
- 電磁気シミュレーション

Alberts, G.J.N., Rol, M.A., Last, T. *et al.* Accelerating quantum computer developments. *EPJ Quantum Technol.* 8, 18 (2021). を参考にCRDSで作成

© 2021 CRDS

量子コンピューターアーキテクチャー



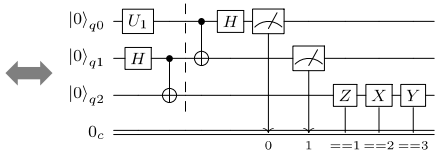
（参考）F. T. Chong et. al, ""Programming language and compiler design for realistic quantum hardware, Nature 549, 180 (2017).

NISQ量子コンピュータのCS的ポイント

1. プログラミングは低レイヤが中心

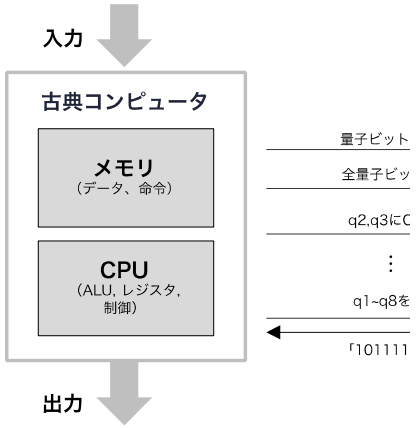
- 様々なSDK、言語が提供されているが、いずれも量子回路を書くのと等価

```
1  //Quantum Teleportation
2  OPENQASM 2.0;
3  include "qelib1.inc";
4  qreg q[3];
5  creg c[3];
6  u1(0.1,0.2,0.3) q[0];
7  h q[1];
8  cx q[1],q[2];
9  barrier q;
10 cx q[0],q[1];
11 h q[0];
12 measure q[0] -> c[0];
13 measure q[1] -> c[1];
14 if(c==1) z q[2];
15 if(c==2) x q[2];
16 if(c==3) y q[2];
```



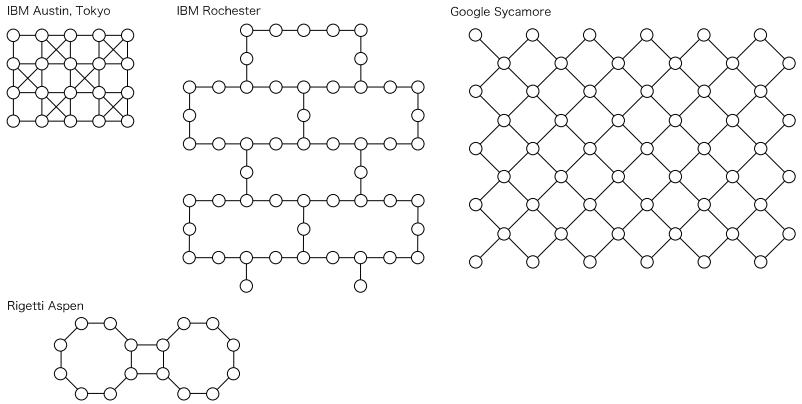
2. 量子プロセッサはアクセラレータ、量子ゲートはソフトウェア

- 量子ビットは受動的デバイス。命令をフェッチせず、CPUが制御
- 制御構造は古典（量子状態の古典制御）、量子データの入出力なし



3. ハードウェア・アウェアなプログラミングが必要

- NISQ量子コンピュータでは、論理量子ビット ≒ 物理量子ビット



様々な量子アルゴリズム

多数知られているが、NISQ*では充分な性能が出ないケースも

*Noisy Intermediate-Scale Quantum

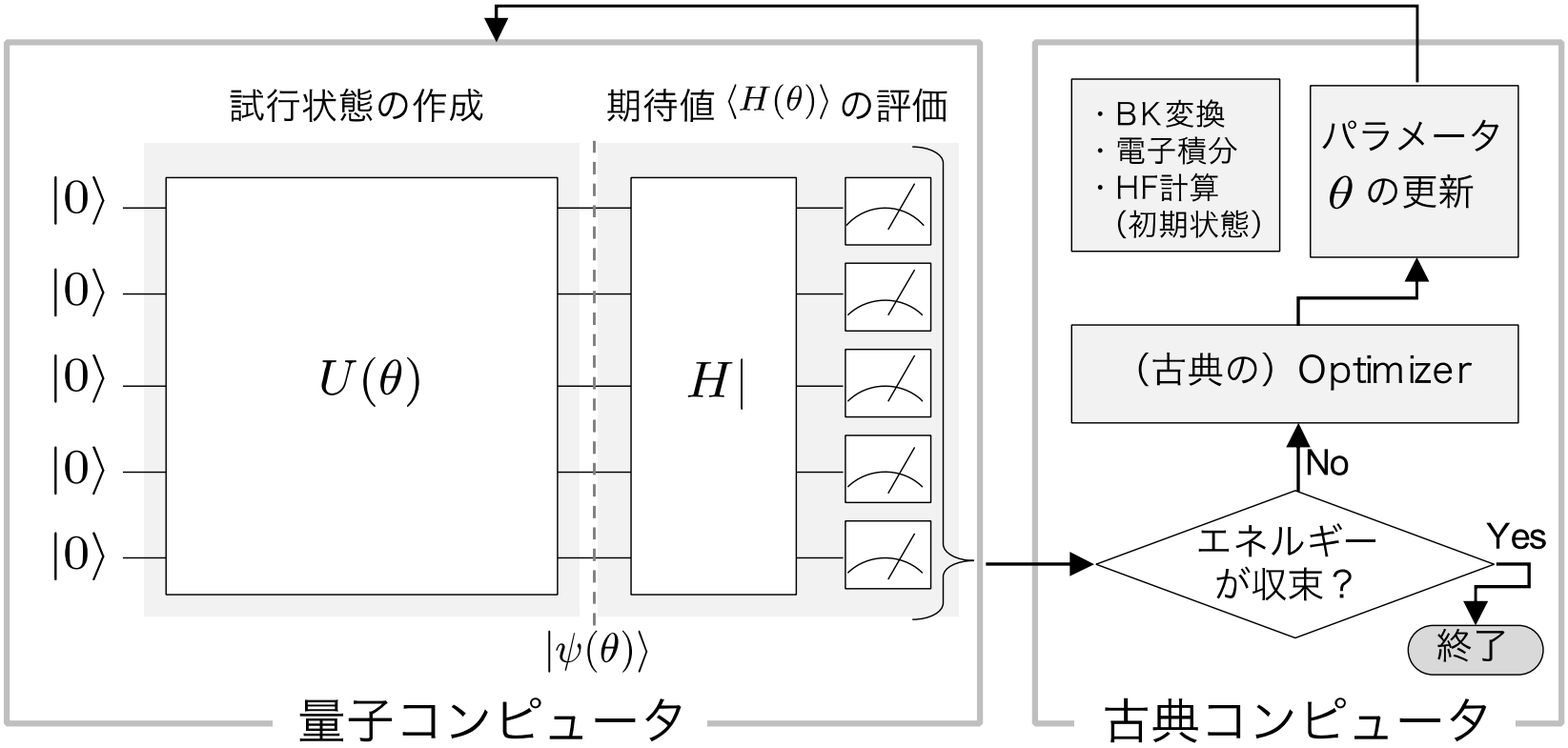
	アルゴリズム	サブルーチン	量子加速	データ
基本アルゴリズム	ショアの素因数分解 [Shor, 1994]	PEA	指数	古典
	量子化学計算（Full-CI） [Lanyon+, 2009]	PEA	指数	古典
	グローバー検索 [Grover, 1996]	AA	二次	量子
	線形連立方程式 [Harrow+, 2009]	PEA	指数	量子
教師なし機械学習	K-medians [Aimeur+, 2013]	AA	二次	古典
	階層的クラスタリング [Aimeur+, 2013]	AA	二次	古典
	K-means [Lloyd+, 2013]	(AA)	指数	量子
	主成分分析 [Lloyd+, 2013]	HHL	指数	量子
	主成分分析 [Kerenidis+, 2016]	HHL+QW	指数	量子
教師あり機械学習	NN [Narayanan+, 2000]	AA		古典
	SVM [Anguita+, 2003]	AA	二次	古典
	SVM [Rebentrost+, 2013]	HHL	指数	量子
	近傍法 [Wiebe, 2014]	AA	二次	古典
	回帰 [Bisio+, 2010]	-		量子

PEA: 位相推定、AA: 振幅増幅
QW: 量子ウォーク、HHL: Harrow-Hassidim-Lloyd

© 2021 CRDS

変分量子アルゴリズム

パラメータつき量子回路を古典で非線形最適化



VQE　試行状態のエネルギー期待値の最適化　＝基底状態探索
QAOA　イジングハミルトニアンの最適化　＝組合せ最適化
QCL　損失関数（訓練データとの差）の最適化＝教師あり機械学習

レビュー論文：M. Cerezo et al., *“Variational Quantum Algorithms”*, arXiv:2012.09265

NISQ量子コンピューターのキラーアプリ探索

量子化学・量子多体系

問題設定が量子力学で定式化されてい
（例）高精度の物性予測、分子・材料設計、
反応・ダイナミクスのシミュレーション

機械学習・最適化

問題設定は非量子だが、線形代数構造。
（例）巨大な行列の固有値・特異値、
PCA、クラスタリング、分類、SVM

優位性のあるタスクや高効率の計算方法などは今まさに研究萌芽期

量子多体系を機械学習で分析

- G. Carleo, M. Troyer, “Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks”, Science 355, 602 (2017).
- M. Broughton et al., “TensorFlow Quantum: A Software Framework for Quantum Machine Learning”, arXiv:2003.02989.
- K. Osaki, K. Mitarai, K. Fujii, "Classically Optimized Variational Quantum Eigensolver for Topological Ordered Systems”, AQIS 2020.

変分アルゴリズム／量子機械学習の優位性

- M. Cerezo et al., “Variational Quantum Algorithms”, arXiv:2012.09265.
- Y. Liu et. al. "A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning”, arXiv:2010.02174.
- H.-Y. Huang, et al. "Power of data in quantum machine learning”, Nature communications 12, 1-9 (2021).

© 2021 CRDS

様々なNISQ量子機械学習アルゴリズム

パラメータつき量子回路を古典で非線形最適化

アルゴリズム	タスク	データ	量子ビット数	ハードウェア
変分量子回路、量子カーネル推定	分類	古典	2	超伝導
量子パーセプトロン	分類	古典	3	超伝導
量子GAN	生成	古典	3	超伝導
量子回路ボルンマシン（QCBM）	生成	古典	4	超伝導
データ駆動型量子回路学習（DDQCL）	生成	古典	4	イオントラップ
QAOA	クラスタリング	古典	19	超伝導
量子オートエンコーダ（QAE）	圧縮	古典	3	超伝導

© 2021 CRDS

PDEむけ量子アルゴリズム

基本的には有限要素法で連立一次方程式化→HHLで解く

	Algorithm	Equation	Boundary conditions	Complexity
Classical	FDM/FEM/FVM	general	general	$\mathrm{poly}((1/\epsilon)^d)$
	Adaptive FDM/FEM [2]	general	general	$\mathrm{poly}((\log(1/\epsilon))^d)$
	Spectral method [14, 27]	general	general	$\mathrm{poly}((\log(1/\epsilon))^d)$
	Sparse grid FDM/FEM [5, 37]	general	general	$\mathrm{poly}((1/\epsilon)(\log(1/\epsilon))^d)$
	Sparse grid spectral method [28, 29]	elliptic	general	$\mathrm{poly}(\log(1/\epsilon)(\log\log(1/\epsilon))^d)$
Quantum	FEM [21]	Poisson	homogeneous	$\mathrm{poly}(d, 1/\epsilon)$
	FDM [6]	Poisson	homogeneous Dirichlet	$d\,\mathrm{poly}(\log d, 1/\epsilon)$
	FDM [11]	wave	homogeneous	$d^{5/2}\,\mathrm{poly}(1/\epsilon)$
	FVM [13]	hyperbolic	periodic	$d\,\mathrm{poly}(1/\epsilon)$
	Adaptive FDM [this paper]	Poisson	periodic, homogeneous	$d^2\,\mathrm{poly}(\log d, \log(1/\epsilon))$
	Spectral method [this paper]	Poisson	homogeneous Dirichlet	$d\,\mathrm{poly}(\log d, \log(1/\epsilon))$
	Spectral method [this paper]	elliptic	inhomogeneous Dirichlet	$d^2\,\mathrm{poly}(\log(1/\epsilon))$

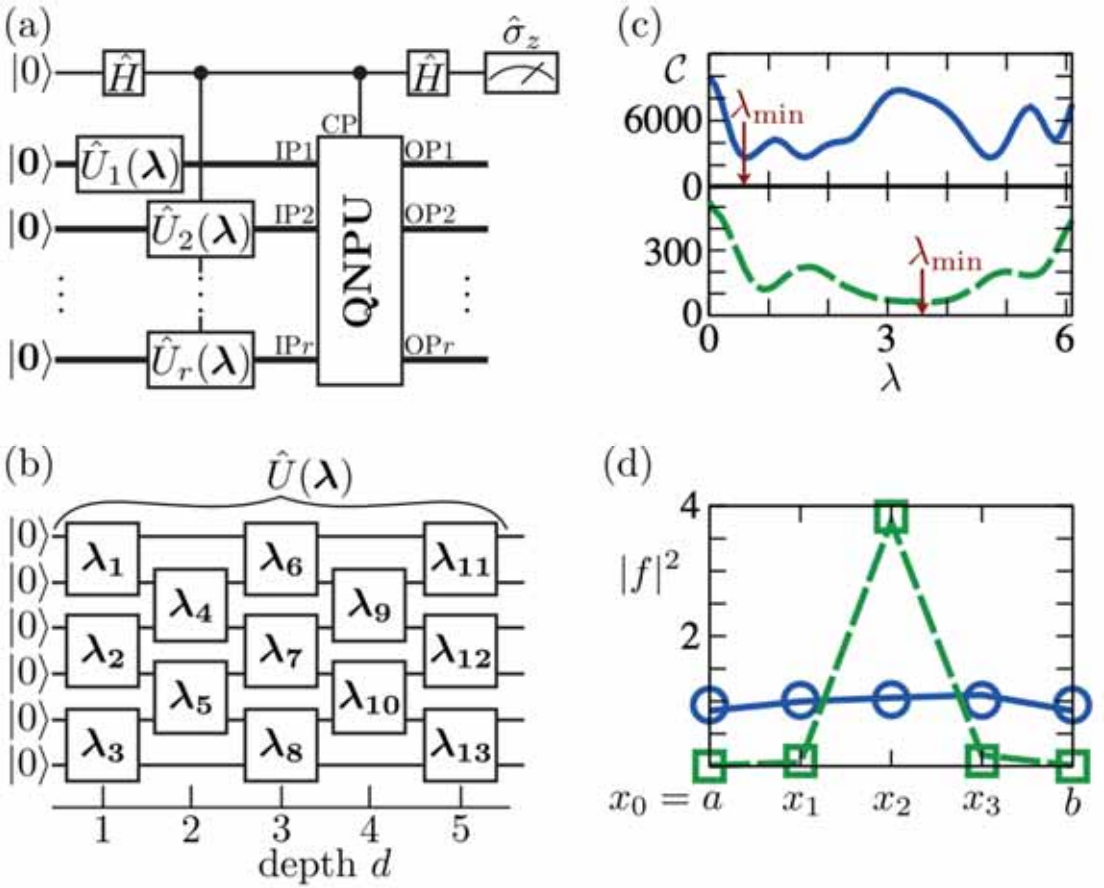
A. M. Childs, J.-P. Liu, A. Ostrander, “High-precision quantum algorithms for partial differential equations”, arXiv:2002.07868

非線形PDEを変分量子アルゴリズムで解く

変分量子状態の複数コピーを用意。非線形関数を試行関数にして最適化

- 時間非依存・非線形Schrödinger方程式
- コスト関数：総エネルギー
  （ポテンシャル、運動、相互作用）
- 空間は有限グリッドに離散化

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)+g|f(x)|^2\right]f(x)=Ef(x)$$



M. Lubasch et al., "Variational quantum algorithms for nonlinear problems", Phys. Rev. A 101, 010301 (2020)

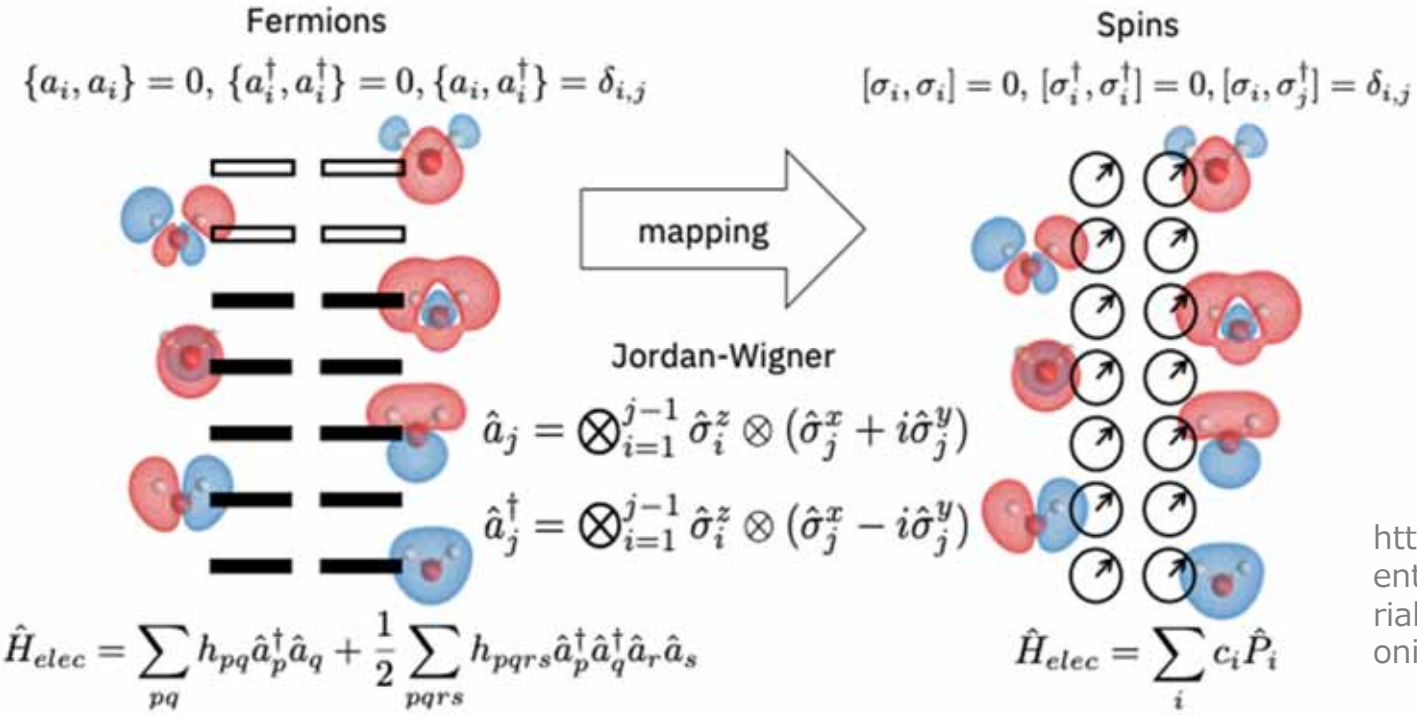
量子コンピュータ上の量子化学計算

前処理 (古典コンピュータ)

(1) Born-Oppenhimer近似、第２量子化
(2) マッピング (フェルミオンのハミルトニアンを量子ビット系に変換)
(3) HF計算により初期状態を準備

量子コンピュータ

(FTQC) 量子位相推定アルゴリズムで固有値・固有ベクトルを求める
(NISQ) VQEアルゴリズムで基底状態を求める



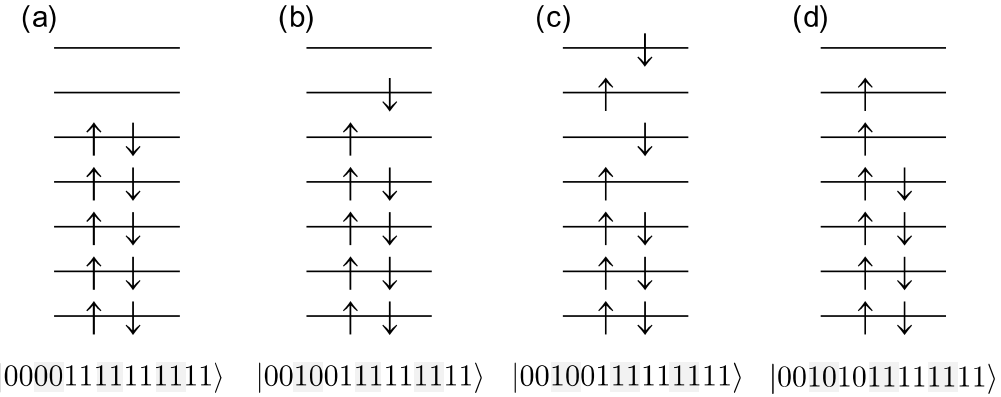
https://qiskit.org/documentation/stable/0.24/tutorials/chemistry/01_electronic_structure.html

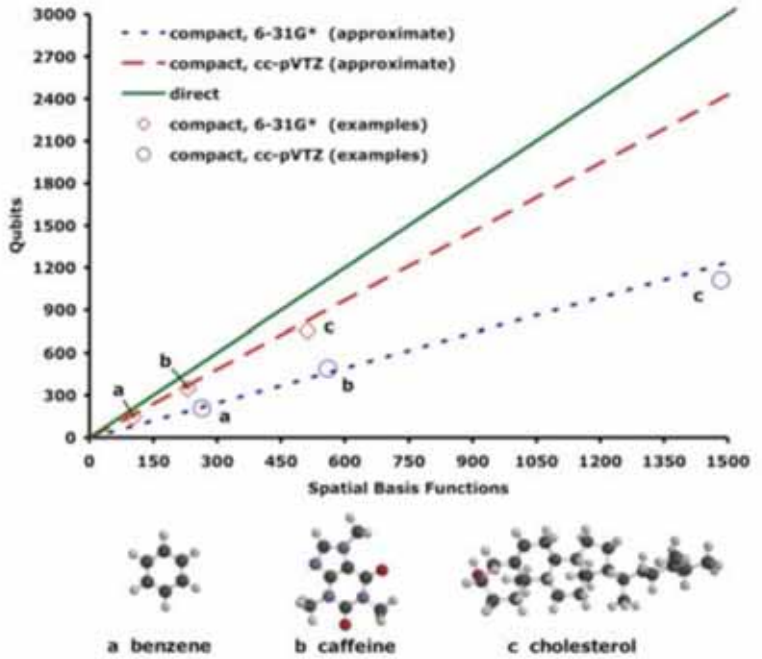
量子化学計算：マッピングに工夫が必要

H_2O

[Qubits]

		基底関数セット (# of functions)		
		STO-3G (7)	6-31G* (19)	Cc-pVTZ (58)
mapping	Jordan-Wigner (direct)	14	38	116
	Compact	10	29	47
	Compact (siglet)	8	25	42





A. Aspuru-Guzik et al., "Simulated Quantum Computation of Molecular Energies", Science 309, 5741, 1704 (2005).

量子×機械学習

タスク（データ）	モデル	計算	例
量子	古典	古典	2Dイジングモデルの NN基底状態
古典	古典	量子	量子カーネルトリック（QPUで内積計算）
古典	量子	量子	QCLで二値分類 QNNでMNIST
量子	量子	量子	VQE計算した基底状態の相分類、クラスター状態内のエラー検知、量子データの分類

量子多体系の分析には有効そう

- G. Carleo, M. Troyer, “Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks”, Science 355, 602 (2017)
- M. Broughton et al., “TensorFlow Quantum: A Software Framework for Quantum Machine Learning”, arXiv:2003.02989.
- K. Osaki, K. Mitarai, K. Fujii, "Classically Optimized Variational Quantum Eigensolver for Topological Ordered Systems”, AQIS 2020.

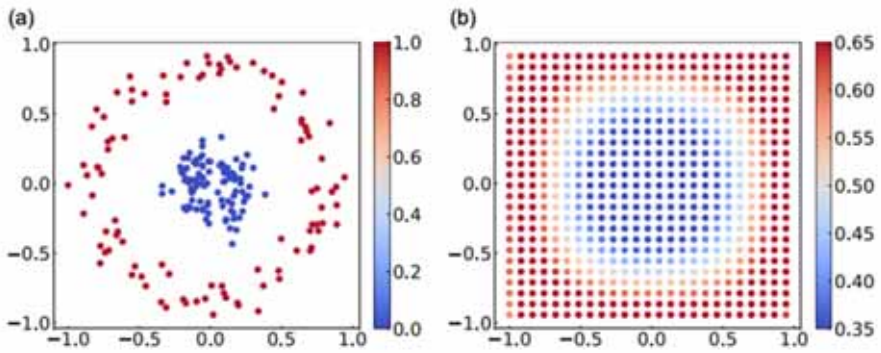
優位性のあるタスク、効率のいい回路はまさに研究中

- Y. Liu et. al. "A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning”, arXiv:2010.02174.
- H.-Y. Huang, et al. "Power of data in quantum machine learning”, Nature communications 12, 1-9 (2021).

© 2021 CRDS

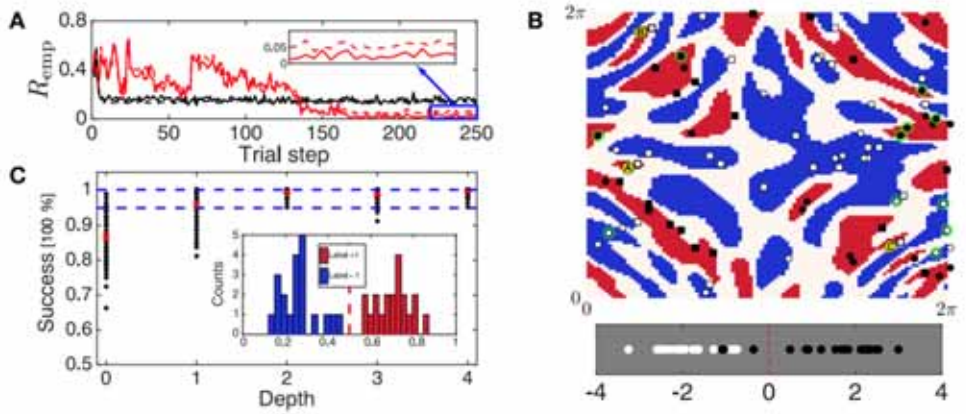
古典タスクに量子で挑む

Proposal (simulation)



K. Mitarai et al., “Quantum Circuit Learning”, Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)

Demonstration (experiment)



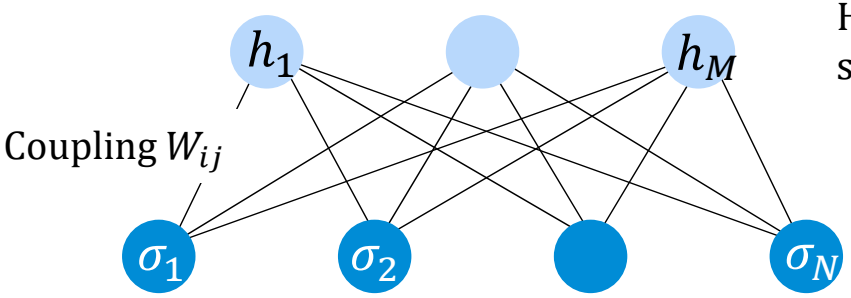
V. Havlicek et al., "Supervised learning with quantum enhanced feature spaces", Nature 567, 209-212 (2019).

Python + qulacs

Quantum Native Dojo
https://dojo.qulacs.org/ja/latest/index.html

(cf.) 量子タスクに古典NNで挑む

Restricted Boltzmann Machine as variational ansatz



Hidden spins

Visible spins

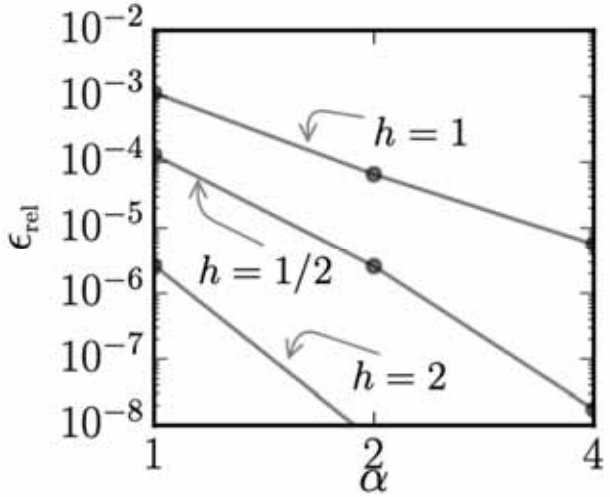
→ Variational ansatz

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma} \psi(\sigma)|\sigma\rangle$$

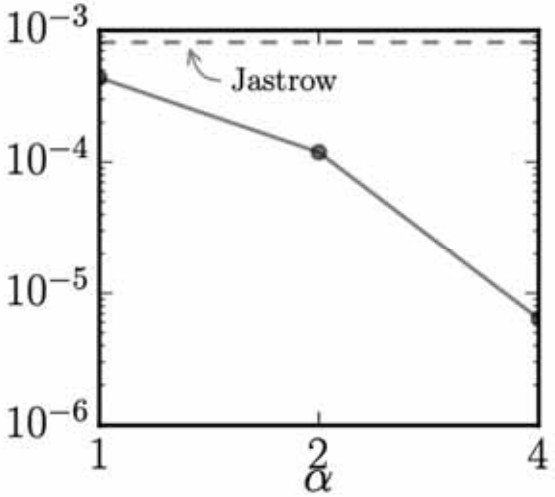
$$\psi(\sigma) \propto \sum_{h} e^{W_{ij}\sigma_i h_i + a_i\sigma_i + b_i h_i}$$

interaction　Magnetic fields

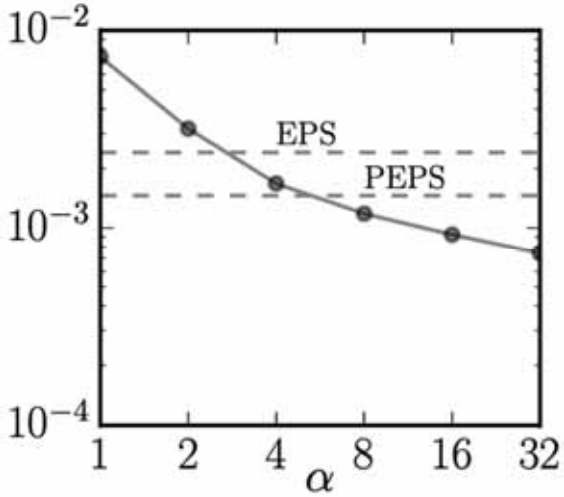
1D Transverse-field Ising (80 spins)



1D AF Heisenberg (80 spins)



2D AF Heisenberg (10x10 spins)

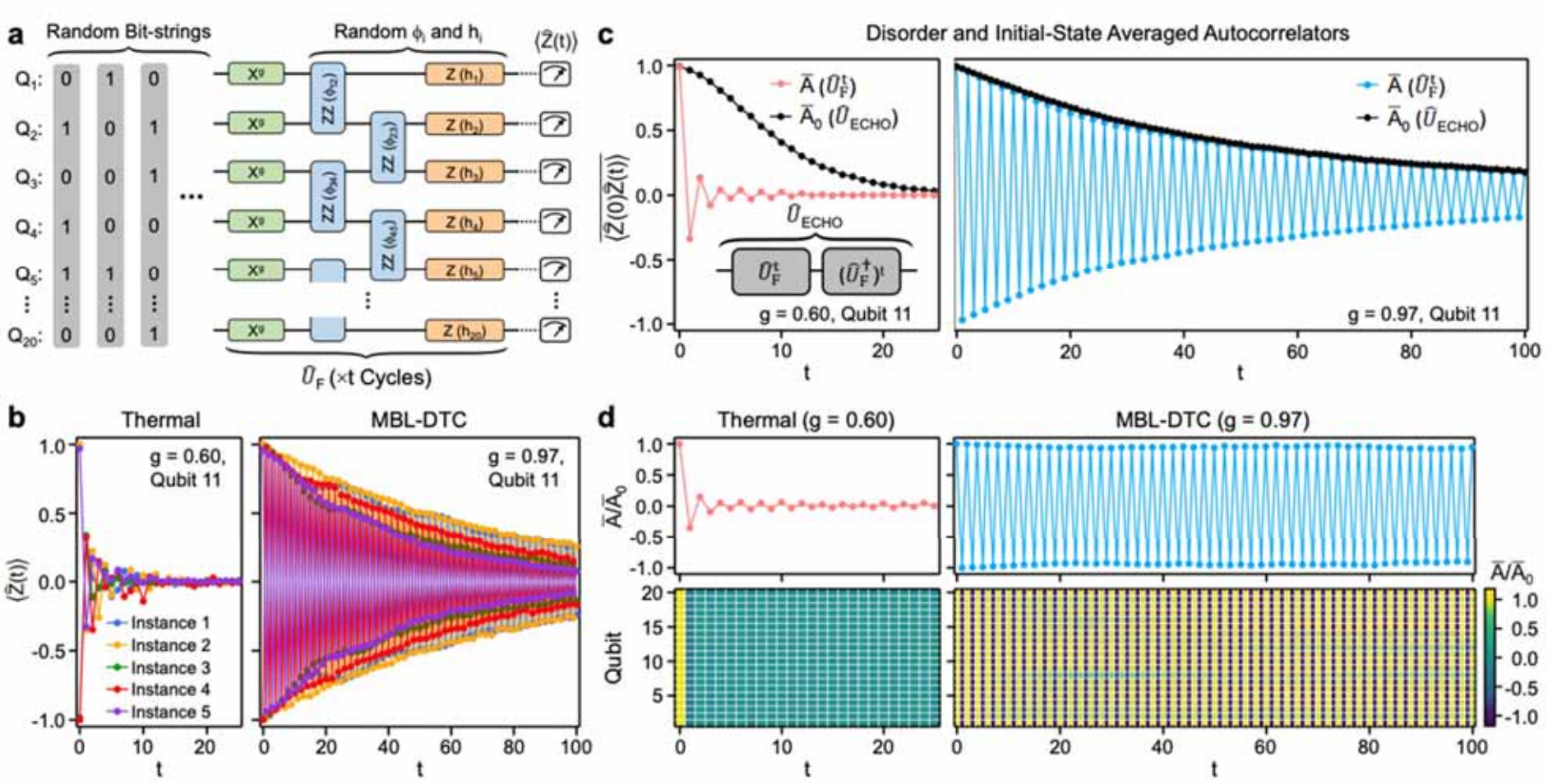


α: # of hidden neurons

G. Carleo and M. Troyer, "Solving the Quantum Many-Body Problem with Artificial Neural Networks", Science 355, 602 (2017).

量子マテリアルの量子シミュレーション

Discrete time crystalのシミュレーション



Google Quantum AI and collaborators, "Observation of Time-Crystalline Eigenstate Order on a Quantum Processor", arXiv:2107.13571

2. 国際競争・各国の量子アプリケーション支援政策

米国 EPiQC プロジェクト

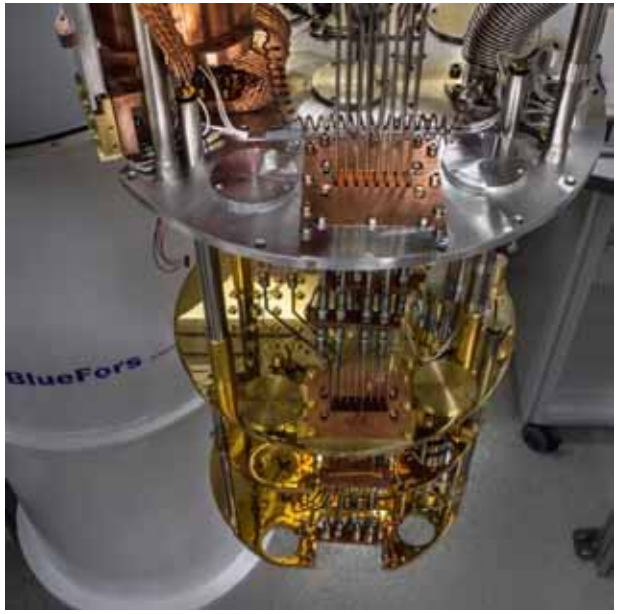
Enabling Practical-scale Quantum Computation（EPiQC）[1)]

NSF傘下のPJ（U. Chicago (代表), MIT, Princeton, Duke, UCSB）

（2018～2023年、計$10M）

Lead PI:
Fred Chong
(UChicago)

- 理論アルゴリズムと量子コンピューティングアーキテクチャの間にあるギャップを縮め、量子コンピュータを現実のものにすることがターゲット。
- 5年間で100-1000量子ビットの特性に合わせたアルゴリズム、ソフトウェア、マシンデザイン開発を行う。
- 11名のPI、教員7名、ポスドク3名、大学院生36名などが所属 (2021年11月16日調べ) [2)]



1) https://www.epiqc.cs.uchicago.edu/
2) https://www.epiqc.cs.uchicago.edu/people

© 2021 CRDS

米国 STAQ プロジェクト

Software-Tailored Architecture for Quantum co-design

NSF傘下のPJ（代表：Duke U.）（2018～2023年、$15M）

以下の3つを開発し、世界初の実用的な量子コンピュータを実現するプロジェクト。

- 信頼できるスケーラブルハードウェア
（U. Maryland, UC Berkeley, Duke U.）

Hardware Lead:
Chris Monroe (UMD)

- パフォーマンスを最適化するソフトウェアスタック
（U. Chicago）

Software Stack Lead:
Fred Chong (U. Chicago)

- スモールデバイスで量子優位性を約束するアプリケーション
（Tufts U., MIT, U. New Mexico）

Applications Lead:
Peter J. Love (Tufts U.)

https://www.nsf.gov/news/news_summ.jsp?cntn_id=296227
http://staq.pratt.duke.edu/

© 2021 CRDS

オランダの量子アプリケーション研究拠点

QuTech

https://qutech.nl/

- デルフト工科大、TNO、産業界パートナーによって設立。
- 299名が勤務（2020年12月）。
- 「誤り訂正量子コンピューティング（FTQC）」「量子インターネット・ネットワークコンピューティング」「トポロジカル量子コンピューティング」の主３テーマ。
- FTQCのテーマに関わる10グループのうち4グループが、アルゴリズム、アーキテクチャ、ソフトウェア開発。
- Intel、Microsoftと共同研究を実施。

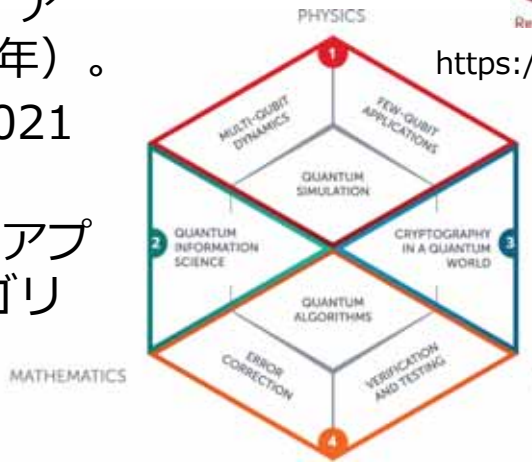
予算（2015年から10年間）

TU Delft in-kind	29	M€
TU Delft in-cash	20	M€
TNO in cash*	50.75	M€
NWO/ENW*	36.18	M€
NWO/TTW in cash	9.6	M€
Total	**145.53**	**M€**

QuSoft

https://www.qusoft.org/

- 量子ソフトウェア研究組織として国立数学情報科学研究所、アムステルダム大学、アムステルダム自由大学で設立（2015年）。
- シニア研究者21名、ポスドク10名、大学院生17名在籍（2021年11月現在）。
- 4つの研究テーマは「量子シミュレーションと少量子ビットアプリケーション」「量子情報科学」「量子暗号」「量子アルゴリズムと複雑性」。



情報処理学会「量子ソフトウェア研究会」

- 量子計算アーキテクチャ
- 量子プログラミング言語
- 量子計算アプリケーション
- 量子ソフトウェア開発環境(シミュレータ、コンパイラ等)
- 量子アルゴリズム
- 分散量子計算
- 量子ネットワークのソフトウェア
- 量子センサーのソフトウェア
- 量子セキュリティ

SIG-QS「量子ソフトウェア研究会」
https://sigqs.ipsj.or.jp/

© 2021 CRDS

3. 国内外ベンダー／ユーザーの動向

クラウド利用が進むNISQ量子コンピューター

			IBM	GCP	Azure	AWS
ソフトウェア開発プラットフォーム（SDK）	Qiskit (by IBM)		●	●		
	Cirq+TFQ (by Google)			●		
	Braket (by Amazon)					●
	Pennylane (by Xanadu)			●		
	Tket (by CQC)			●		
	Q# (by Microsoft)				●	
ハードウェア（QPU）	超伝導	IBM	●			
		Google		●		
		Rigetti				●
		qci			●	
	イオントラップ	IonQ	●	●	●	●
		Honeywell			●	
	QAマシン	D-wave				●

（※ 2021年8月末時点で利用可能なもの及び、今後利用可能と発表されているもの）

© 2021 CRDS

NISQ量子プログラミング・プラットフォーム

プラットフォーム	提供元	月間DL数
qiskit	IBM	88881
pyquil	Rigetti	33010
cirq	Google	25220
dwave-system	D-Wave	10519
amazon-braket-sdk	Amazon	6279
pennylane	Xanadu	5372
pytket	CQC	4306
projectq	ETH Zurich	1372

Source: Pypistat.org (期間 2021.5.18～6.18)

https://quantumcomputingreport.com/relative-popularity-of-different-quantum-programming-platforms/

© 2021 CRDS

ソフトベンダー・プラットフォーム対応表

		ゲート型量子コンピューター	イジングマシン
国内	blueqat	●	（撤退？）
	Jij	●	●
	NTTデータ		●
	QunaSys	●	
	グルーヴノーツ		●
	フィックスターズ	●	●
	シグマアイ		●
海外	Amazon Web Service	●	●
	Cambridge Quantum Computing	●	
	Microsoft Azure	●	●
	QC Ware	●	●
	QuantiFi		
	Zapata Computing	●	●

© 2021

量子コンピューター&イジングマシン利用例

◇イジングマシン
○量子ゲート方式での取り組み
＊ 両方での取り組み

	取り組み状況		
	取り組み発表	理論検証	実証実験
金融	◇ コールセンター要員シフト作成(SMFG) ○ 資産運用、暗号、リスク計算(MUFG) ＊ AI活用、暗号、リスク計算(みずほ) ＊ ポートフォリオ最適化(RBS、J.P.Morgan)	◇ AIで株価予想(野村アセットマネジメント) ◇ ポートフォリオ最適化(1Qbit) ◇ リバーステストレステスト(HSBC) ＊ AIでオプション計算(IBM)	
製造	◇ 倉庫オペレーション改善(日立、さくらインターネット) ◇ 生産計画最適化(富士通)	◇ 自動車のキャリブレーションテスト(AISIN AW) ◇ ロボットアーム操作(BMW) ◇ グラフ彩色(ロッキードマーティン) ◇ フォルトツリー解析(エアバス)	◇ 無人搬送車経路最適化(DENSO) ◇ 工場内ピックアップルート最適化(富士通) ◇ 生産計画最適化(NEC)
情報		◇ 広告入札最適化(リクルートコミュニケーションズ) ◇ 航空写真からの樹木判定(NASA) ◇ 行列因子分解(Los Alamos)	◇ ホテルリコメンド最適化(リクルートコミュニケーションズ)
化学	◇ 分子類似性による創薬(富士通) ＊ リチウム電池開発(三菱ケミカル、JSR)	◇ フラグメント分子軌道法(京セラ) ◇ ヒトαシヌクレインの凝集(Peptone) ◇ 量子分子動力法シミュレーション(Los Alamos) ○ 材料開発：分子構造予測(OTI Lumionics Inc)	
交通など		◇ マルチモーダルシェア(DENSO) ◇ 北京の交通量最適化(Volkswagen)	◇ バンコクの交通量最適化(DENSO、豊田通商) ◇ スタジアム座席販売最適化(富士通)

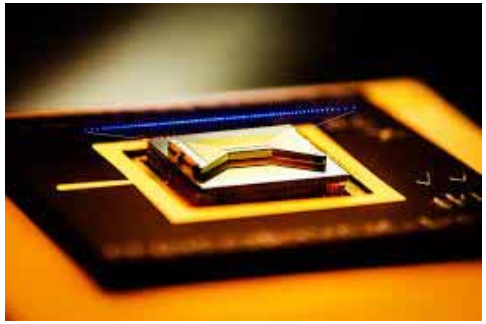
日本総合研究所 先端技術ラボ レポート「量子コンピューターの概説と動向 ～量子コンピューティング時代を見据えて～」（2020年7月14日）などを基に、JST-CRDSで作成

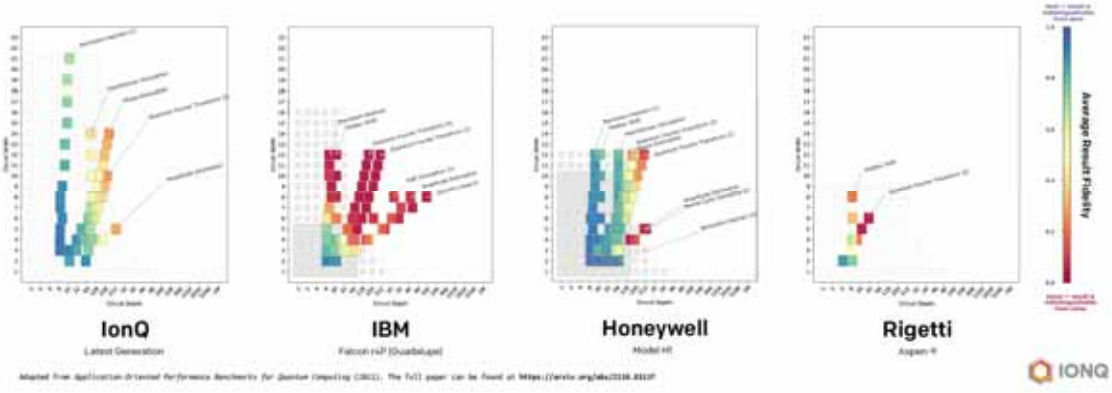
© 2021 CRDS

イオントラップ・冷却原子HWの躍進

米国 IonQ

メリーランド大・デューク大発のスタートアップ。2021年10月に上場（SPAC, NY証券取引所）



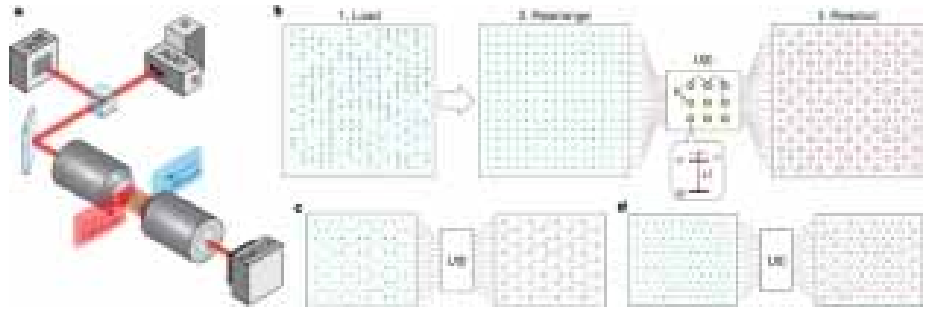


T. Lubinski, et al., "Application-Oriented Performance Benchmarks for Quantum Computing", arXiv:2110.03137 (2021).

米国 QuEra

ハーバード大・MIT発のスタートアップ。2021年11月に1700万ドルの資金調達

QuEra COMPUTING INC.

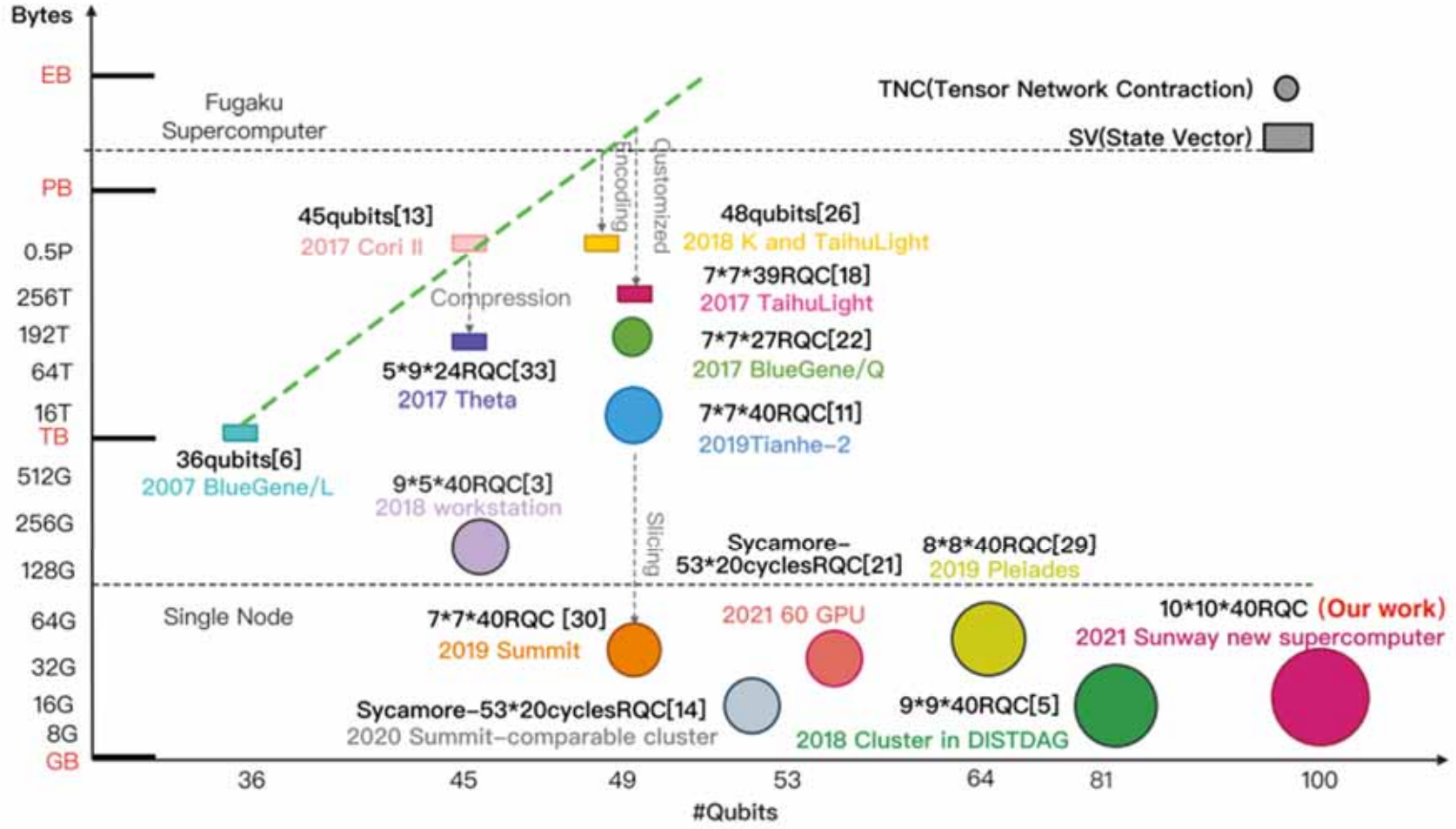


S. Ebadi et. al., "Quantum phases of matter on a 256-atom programmable quantum simulator", Nature volume 595, pages227–232 (2021)

SC21 ゴードンベル賞

Sunwayを利用した、ランダム量子回路のリアルタイムシミュレーション

10×10量子ビット・深さ(1+40+1)のランダム量子回路のシミュレーションに成功。
サンプリング時間を304秒まで短縮。



Y. Liu et al., "Closing the “Quantum Supremacy” Gap: Achieving Real-Time Simulation of a Random Quantum Circuit Using a New Sunway Supercomputer", SC ’21, November 14–19, 2021, St. Louis, MO, USA
https://dl.acm.org/doi/pdf/10.1145/3458817.3487399