

研究領域「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」 事後評価（課題評価）結果

1. 研究領域の概要

量子ビットの集積と制御技術によって量子コンピュータハードウェアを「作る」研究に対し、本研究領域では量子を「賢く使う」研究を行います。「賢く使う」とは、量子力学の与える制約や制限されたりソースを巧みに利用した情報処理技術、現実的な物理環境下での大規模量子計算など、何らかの制約の中でも実行可能である、あるいは逆に制約を活用する技術を創造することを意味します。

研究内容としては、フォールトトレラント量子コンピュータを実現するための量子アーキテクチャや量子ソフトウェアから、古典的手法よりも効率よく問題を解く量子アルゴリズム、量子センサと量子コンピュータを統合した高度な量子情報通信技術、量子技術と古典IT技術とを融合した情報処理システム、量子アルゴリズムを利用して社会的問題を解決するアプリケーションまで、ハードウェア開発以外の広範なテーマを対象とします。

さまざまな学術領域の融合・協働により、こうした革新的な情報処理手法の研究開発を進め、社会実装可能な量子コンピューティングを実現するための技術基盤を作り上げることを目指します。

2. 事後評価の概要

2-1. 評価の目的、方法、評価項目及び基準

「戦略的創造研究推進事業(先端的低炭素化開発を除く。)の実施に関する規則」における「第4章 事業の評価」の規定内容に沿って実施した。

2-2. 評価対象個人研究者及び研究課題

2019年度採択研究課題

- (1) 上田 宏 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授)
テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化
- (2) 大久保 毅 (東京大学大学院理学系研究科 特任准教授)
テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発
- (3) 倉重 佑輝 (京都大学大学院理学研究科 准教授)
量子-古典空間分離法を用いた量子多体系ソルバーの開発
- (4) 杉崎 研司 (大阪公立大学大学院理学研究科 特任講師)
量子化学計算の高効率量子アルゴリズムの開発
- (5) 杉山 太香典 (富士通(株) 富士通研究所 研究員)
量子演算の高精度化基盤技術開発
- (6) 鈴木 泰成 (日本電信電話(株) コンピュータ&データサイエンス研究所 研究員)
ヘテロジニアスな設計と制御に基づく誤り耐性量子計算
- (7) Darmawan Andrew Sudiro (京都大学基礎物理学研究所 特定助教)
実世界における量子計算に向けた数値的解析
- (8) 平石 秀史 (日本大学理工学部数学科 准教授)
量子ハイブリッド組合せ最適化アルゴリズム開発
- (9) 松崎 雄一郎 (産業技術総合研究所新原理コンピューティング研究センター 主任研究員)
完全秘匿性を実現する量子IoTアーキテクチャの構築
- (10) 水上 渉 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授)
計算化学のフロンティアを拓く革新的複素数波動関数量子シミュレータの開発

2-3. 事後評価の実施時期

2022年12月12日（月曜日）事後評価会開催

2-4. 評価者

研究総括

富田 章久 北海道大学大学院情報科学研究院 教授

領域アドバイザー

井上 弘士 九州大学大学院システム情報科学研究院 教授

門脇 正史 (株)デンソーAI研究部基盤技術研究室 担当次長

金本 理奈 明治大学理工学部 教授

小松崎 民樹 北海道大学電子科学研究所 教授

高柳 匡 京都大学基礎物理学研究所 教授

徳永 裕己 日本電信電話（株）コンピュータ&データサイエンス研究所 特別
研究員

中島 研吾 東京大学情報基盤センター 教授／理化学研究所計算科学研究セン
ター 副センター長

根来 誠 大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授

藤井 啓祐 大阪大学大学院基礎工学研究科 教授

増原 英彦 東京工業大学情報理工学院 教授

山下 茂 立命館大学情報理工学部 教授

外部評価者

該当なし

3. 総括総評

当さがけ領域の第1期生として採択された研究者が3.5年の研究期間を終了した。第1期生は量子コンピュータの社会実装に貢献する可能性を重視して選考した。その結果、量子情報処理プロパーの研究者は4名が採択され、量子化学3名、物性理論2名、コンピュータサイエンス1名が採択された。量子化学分野の研究者は採択以前から量子コンピュータの応用を研究していたが、量子コンピュータあるいは量子情報理論については専門的に研究していたわけではなく、異分野からの参入者が過半を占めたといってもよいだろう。

研究の開始後まもなくパンデミックが発生し、対面での会合は第1回の領域会議と事後評価会のみになってしまい、採択者同士の対面での実質的な交流ができなかったのは誠に残念なことである。そのような中で、オンラインによる領域会議でブレイクアウトルームを設置したり、量子コンピュータ利用についての講習会や研究者がまとまった時間自身の研究を紹介する領域セミナーを開催するなど、研究者同士の自由な交流を試みた。このような状況にも関わらず、領域内の研究者間の共同研究が盛んに行われたのは幸いであった。これまで全く交流のなかった量子化学研究者と量子情報技術研究者の共同研究による成果も見られたが、これは対面で行われた第1回領域会議での出会いがきっかけであったということなので、対面での研究交流が継続していればさらに異分野交流の成果が上がったものと考えられる。

期間中、当初の目論見通り順調に研究を進めた例もあったが、多くは研究途上で障壁にあたり、方針を再考・修正して研究を遂行した。前述したように異分野から参入した研究者は、研究を進めるに従って量子コンピュータの能力の限界が以前考えていたより深刻であることを認識させられたようである。量子情報処理の研究者にしても、当初考えていたより問題が難しいということが分かったことも多かった。このようなことは新しい研究分野を開拓するときには当然起こることである。当領域の研究者は研究の障害を分析することで、本質をよりよく理解して研究を再構築して優れた成果を得ている。多くの研究がそれぞれの分野で古典的な計算に対する優位性を実証することを目指したが、問題の再考によってそのための対象の選び方や技術的な課題について理解を深めることができ、新たな手法の開拓を実現している。顕著な例として、誤り耐性量子コンピュータが物性理論の問題においては、従来期待されていた量子化学の問題よりも小さなサイズから量子優位性が現れることの発見がある。これは、量子情報処理プロパーの研究者と量子化学、物性理論の研究者の共同研究によるものであり、本さがけ領域が広いバックグラウンドを持つ研究者から構成されていることの利点を示している。

本さがけを通じて、異分野の研究者に自身の研究を説明する必要があると、そうした体験が研究者の成長を促せたのではないかと感じている。本さがけ期間中に5名の第1期生が昇任している。もちろん、キャリアアップしたからよいという訳ではないが、研究者の成長の一つの証であると思われる。また、学術論文81報、学会講演185報、著書・総説等18報という多くの成果発表が行われている。これは、研究者の多くが積極的な共同研究を展開して成果をあげていることを示している。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化

2. 個人研究者名

上田 宏（大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授）

3. 事後評価結果

当初計画にあったクリロフ部分空間法に類似した手法による量子回路生成手続きについては海外研究者との競合もあって中断しているが、より自身の強みを生かす形で計画を変更して成果を上げている。当初より構想されていたテンソルネットワークの知見を活かした量子回路表現の研究開発に関して、自動量子回路符号化アルゴリズム (AQCE) を開発した。この AQCE アルゴリズムは 2-3 量子ビットでは十分な精度で所望の量子状態が得られることを量子コンピュータの実機で確かめている。また、AQCE の知見を活かして、任意の量子多体系の基底状態を最良近似できるツリーテンソルネットワーク構造を状態のエンタングルメントエントロピーを監視しながら動的に探索するアルゴリズムを開発した。さらに、物性物理で多く見られる対称性を仮定して問題を限定することによって 1000 量子ビット級の厳密なシミュレーションを行うソフトウェア QS³ を開発し GitHub で公開している。これらのことから本プロジェクトでの目的は達成したものと評価できる。

プロジェクト期間中に理研から阪大への異動に伴って研究開発環境が変化した。研究費を適切に利用することで問題なく対応できている。

開発された QS³ ソフトウェアは公開され広くコミュニティで利用できるようになっている。ノイズを考慮した 1000 量子ビット程度のランダム量子回路シミュレーションが行えることは、近い将来大規模 NISQ 型量子コンピュータが出現した際のベンチマークや正常動作の検証に用いるデータセットを提供できる。また、既存の古典的データを自動的に量子回路化する AQCE は従来のコンピュータ技術で得られたデータを量子コンピュータ上で走らせるための重要なツールとなりうる。これらのことから、近い将来の量子コンピュータ開発に有用なツールを開発する基盤が作られている。同時に、テンソルネットワークそのものに対する新たな知見も得られており、物性物理の研究に還元することも期待できる。今後、本プロジェクトで開発されたツール群を拡張することにより、量子多体系ダイナミクス の 解 明、離散格子点上の希薄粒子系の物理への貢献が期待できる。また、これらの物理的問題に帰着できる問題群の探求によりさらに適用範囲を拡大することを希望する。

本プロジェクトで導入された近似的な量子回路表現と分割統治による最適化は、今後の量子コンピュータに有用な概念であると評価できる。また、大規模シミュレーションや量子回路の自動生成は実機や応用ソフトウェアの開発に活用されることが期待できる。今後は、開発されたツールの研究開発現場での有効性を実証してゆくことが必要である。そのためには、ツールの高度化・一般化のみならず、ユーザーインターフェースの開発も重要である。また、量子コンピュータの開発者や古典コンピュータサイエンスの研究者、マテリアルその他の応用分野の研究者などとの協働によるさらなる発展を期待する。

なお、本研究者は本プロジェクト期間中に大阪大学量子情報・量子生命研究センター准教授に昇任した。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発

2. 個人研究者名

大久保 毅（東京大学大学院理学系研究科 特任准教授）

3. 事後評価結果

当初の構想はテンソルネットワークの知見を直接生かすことによりスーパーコンピュータを凌駕する NISQ 型量子コンピュータによる量子多体系の解析手法を開発することであった。研究を実施する中で NISQ の計算能力の制約が大きいことを見出した。この問題に対処するために古典コンピュータ上のテンソルネットワークと NISQ を組み合わせる新しい量子-古典ハイブリッドアルゴリズムを提案した。本提案は物性物理では一般的な並進対称性を仮定している。提案したアルゴリズムが機能するための条件として、古典的なテンソルネットワークが長距離相関を適切に表現できること、これに NISQ で取り扱える程度の小規模な量子回路を付加することで短距離相関を適切に表現できること、テンソルネットワークに量子回路を付加した無限量子多体系の物理量が計算可能であることを明確にした。さらに、2次元ハニカム格子上のキタエフ模型という具体的な例で上記の条件が実現できることを示唆する結果を得ている。また、多くの場合物理量の計算に必要な最適化の精度が量子力学的表現の精度やエネルギーの精度よりも低くても有用であるという知見に基づいて、物理量の計算アルゴリズムに平均場近似の考えを取り入れた Bond-weighted Tensor Renormalization Group 法を提案した。本量子-古典ハイブリッドアルゴリズムは古典コンピュータを精度・規模で凌駕する可能性が示されている。以上のことから、本研究の目的は達成されたものと評価できる。

本研究は基本的に個人研究であった。配分された研究費はシミュレーションなどの計算資源に効率的に活用されている。また、本領域で行った講習会や領域セミナーにも積極的に参加し、他のさきがけ研究者らとの議論や共同研究を行っており、その結果が本プロジェクトでの成果にも表れている。

本研究は量子-古典ハイブリッド計算で NISQ を活用しながら従来のスーパーコンピュータを凌駕する可能性を示しており、高く評価できる。本手法は長距離相関を古典的に計算可能な量子状態に担わせ、短距離相関による補正を NISQ で行うもので一般的な量子-古典ハイブリッド計算アルゴリズムの設計指針として有効であると思われる。さらに、本研究では研究者のこれまでの物性物理の研究における経験や知識が、一般的な概念を具体的な計算アルゴリズムに実体化する際に本質的な役割を果たしており、異分野の研究者が量子情報研究に取り組むことによってブレークスルーが起きる可能性を示している。一方で、提案されたアルゴリズムの実証においては NISQ 部分の検討をさらに進める必要があり、今後の発展に期待する。

本研究を遂行する過程で2次元量子系の基底状態の計算や物理量の計算を行う古典的なテンソルネットワークのソフトウェアを整備し、オープンソフトウェア TeNeS として公開し、広く活用されることを目指してハンズオン講習会も実施している。このことはテンソルネットワーク計算の物性物理への応用に貢献するものであり評価できる。

本研究からの派生として、物性物理において基本的な格子模型で量子優位性が現れる問題のサイズを検討した。従来議論されていた量子化学の問題よりも小さい 100 スピン程度で量子優位性が現れることを示した。この研究は異なるバックグラウンドを持つ、当さきがけ領域の研究者の共同研究によって得られた。異分野協働の有効性を示している本研究者も物性理論の専門性を生かして貢献した。

なお、本研究者はプロジェクト期間中に東京大学大学院理学系研究科特任准教授に昇任した。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子-古典空間分離法を用いた量子多体系ソルバーの開発

2. 個人研究者名

倉重 佑輝（京都大学大学院理学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

本研究は近い将来実現されると考えられる 100 論理量子ビットクラスの NISQ を利用した分子、分子集合体の量子化学的計算を可能にする手法の開発を目標として構想された。そのために量子と古典の計算空間を分離し、量子部分の効率的なソルバーを開発した。さらに、分離された量子と古典空間の間の相互作用を取り込む手法にも取り組んだ。

前者については量子変分固有値解法 (VQE) について、量子系を表現する量子回路 (Ansatz) を、準粒子変換を導入することで新たに考案し、実装と検証を行った結果、短い量子回路を用いても十分な近似精度が得られることを示した。さらに、初期状態に古典計算機で準備可能なエンタングルメント状態を用意することによって VQE に必要な量子計算の反復数を削減できることを示した。後者の量子-古典空間分離については、平均場近似を改良するために古典計算機によるポストプロセッシングを用いて量子-古典間の相関を取り入れる方法とプリプロセッシングによって量子計算に対する有効ハミルトニアンを構築して量子計算に必要な観測回数を削減する方法を開発した。さらに、実問題に適用するために必要な量子空間の表現をコンパクトにする方法やテンソル分解による観測回数の削減などを提案している。地道ではあるが着実な成果があがっており、当初の目標は達成されていると評価できる。

研究費は主にシミュレーションのための大容量メモリを用いた並列計算機に充てられ、効率的に研究が推進された。また、研究補助者を雇用して計算データの解析を行うことにより、研究者が本来の手法開発に注力することができた。本研究者は既に研究室を主催しているが、研究補助者と指導する学生を含めた研究プロジェクトの運営は効果的に行われている。

量子化学への量子コンピュータの応用は有望視されているが、実際に適用する場合に近未来に実現が見込まれる規模の NISQ では洗練された古典コンピュータによる計算に対して優位性を持つことは難しいことがわかりつつある。このような状況において、実際に量子コンピュータで効率的に計算を行う手法を開発していくことが重要である。本研究の成果である新しい Ansatz はさきがけ内の研究者だけでなく、海外の研究者もフォローしており、量子コンピュータによる量子化学計算に対する貢献は大きい。また、本プロジェクトで開発された有効ハミルトニアンの方法など、量子計算を効率化するための手法は今後 100 論理量子ビットを実装した量子コンピュータが出現した際、それらを有効に活用する手段となることが期待できる。

今後は、さらなる効率的な計算手法の開発を続けるとともに、量子コンピュータの優位性を実証・活用するための社会的なインパクトのある計算ターゲットの探索を行うことも期待したい。

なお、本研究者は当プロジェクト期間中に京都大学大学院理学研究科特定准教授から京都大学大学院理学研究科化学専攻准教授に昇任した。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子化学計算の高効率量子アルゴリズムの開発

2. 個人研究者名

杉崎 研司（大阪公立大学大学院理学研究科 特任講師）

3. 事後評価結果

本研究は量子コンピュータを用いて、従来の計算手法では高精度量子化学計算が不可能な複雑な分子系あるいは巨大分子系を効率的に取り扱うことができる手法を開発することを目的としている。具体的には擬縮退系に対する誤り耐性量子コンピュータの活用を念頭に、近似波動関数の生成とエネルギー固有値を読み出す量子位相推定アルゴリズムの改良を行った。

擬縮退系では電子スピン量子数 S が異なる電子状態が基底状態近傍に多数存在するが、これらの状態が波動関数に混入すると正しい化学反応性や分子物性が得られないという問題があった。このスピン汚染を除去する方法として確率的スピン射影法を開発した。また、量子化学において重要となる、基底状態と励起状態間のエネルギーの差を直接求める量子アルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは基底状態と励起状態の重ね合わせを用いて量子位相差を推定するものであり、本研究期間中に有限差分法によるエネルギー数値微分および分子構造最適化問題や相対論的量子計算への適用も行われた。量子位相推定アルゴリズムでは計算に用いる近似波動関数が真の波動関数との重なりが大きいことが要求される。本研究ではそのために断熱量子計算の原理を用いる断熱状態生成法について良い近似波動関数を得るための計算条件を検討し、有益な知見を得ている。これらの成果から、本研究の目的は達成されたといえる。海外の研究動向に対しては、検討する量子化学計算手法を変えるなど柔軟に対処している。

本研究者は期間中に量子化学計算の教科書を出版した。また、プレスリリースによる研究成果の発信を積極的に行った。このような活動は量子化学分野において量子コンピュータ活用に関する問題意識や存在感を高めることに寄与していることは特筆できる。また、世界的に高く評価されている学術誌にも成果が複数掲載されている。

研究の本筋とは異なるが、本さきがけ領域の研究者と共同して量子アニーリングを用いて励起エネルギーを直接計算する方法を提案した。この共同研究は量子化学者と量子情報技術の研究者との協働によるもので、本さきがけ研究の効果といえる。

本研究は誤り耐性量子コンピュータを利用する量子化学計算手法を開発しているため、直ちに NISQ 量子コンピュータで活用されるものではないが、誤り耐性量子コンピュータが実現された際の計算の効率化手法として有用であることが期待される。今後、本研究で開発された量子アルゴリズムを発展させて適用範囲、利便性、効率などを向上していくことが望まれる。同時に、小規模な分子系を対象としたシミュレーションや NISQ による計算によって開発された手法の有効性が実証されていくことを期待する。さらに、シミュレーション結果などをスケールアップすることでターゲットとする複雑な電子状態を持つ分子系について、他の手法とのベンチマークを行い、効率などの比較により本手法の利点を明確にしていくことが本手法の普及に重要であると思われる。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子演算の高精度化基盤技術開発

2. 個人研究者名

杉山 太香典（富士通（株）富士通研究所 研究員）

3. 事後評価結果

産業的に価値のある問題を解くためには量子コンピュータの基本演算を現在より2桁高精度で実行することが必要であるとされている。本研究は、2桁の高精度化の前提となる、量子演算の誤りの詳細な情報を得るために、演算の精度評価手法、制御系の較正手法、ノイズ源の特定手法の3つの基盤技術を開発することを目的とした。適用とする系のサイズとして①1-2個の量子ビット系、②1-2個の3準位系（漏れエラーを評価）③2-5個の量子ビット系（混線エラーを評価）の3つの領域を想定し、それぞれの領域での手法を開発することとした。高精度化を目的とするため、エラー増幅機構を伴う新しい量子トモグラフィ手法の開発、及び開発した評価手法を利用した制御系の較正手法とノイズ源の特定手法開発に取り組んだ。

その中で取り組んだ、従来の量子トモグラフィによる評価手法のデータ処理の安定性向上、計算コストの削減、ソフトウェア開発を達成した。ソフトウェアはQuara という名称でGitHub 上に公開されている。量子トモグラフィにおけるエラー増幅については従来よりも1～4桁程度近似精度を改善する近似公式を導いて増幅機構の解明を行い、それを利用したデータ処理手法を提案し、数値的安定性の理論実証、数値実装を行った。この方法は理研で開発されている超伝導量子回路でのエラー情報解析に活用されている。較正手法については、開発した評価手法と組み合わせることの可能性を確認した。ノイズ源の特定手法については純粋なデコヒーレンスの影響を詳細に見積もるデータ処理手法を開発し、一部の機能はQuaraに実装されている。まとめると、本研究期間ではサイズ①、②の領域で評価手法とノイズ源特定手法は実装まで達成、較正手法は検討までは完了している。サイズ③の領域で2量子ビット系までが達成されている。結果として目標の完全な達成には至らなかったが、評価手法の開発中に発生した問題の修正と対応に時間を要したためである。評価手法の開発が本プロジェクトの基本であるため、新規開発課題ではある程度致し方ないことも考える。また、新たな評価手法なども検討し、数理的な解析をしっかりと行って新たな知見を得たことは評価できる。

一方で、単線的な研究プロジェクトの進め方にはリスクもあるため、部分的に完成したソフトウェアを使って他の手法の開発も同時に進めるなど、工夫の余地はあったように思われる。また、研究成果の公表も全プロジェクトの完了を待たずに各部分について行うことも可能であったが、本研究期間中に大学から企業に移動したこともあり、成果発表に慎重にならざるをえなかったことは理解できる。

量子演算の実装精度の2桁改善は量子コンピュータの実装には不可欠である。本研究の目標と取り組みは今後の量子コンピュータの社会実装に向けて適切かつ意義深いものである。本研究期間終了後に各手法の実装と実機への適用を進め、有用性を実証することが望まれる。2桁改善は挑戦的な目標であるが、当初計画した研究が完成すれば強力な手法が様々なサイズスケールに対して汎用的に適用可能となることが大いに期待される。開発された手法が世界的に標準的なものとなるよう、ソフトウェアの公開と広報を知的財産権を確保しながら進めていってもらいたい。また、本研究で行われた数理的な解析と新たに見いだされた課題は学術的にも興味深いものと思われるので、基礎研究を行う研究者との協働も望まれる。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ヘテロジニアスな設計と制御に基づく誤り耐性量子計算

2. 個人研究者名

鈴木 泰成（日本電信電話（株） コンピュータ&データサイエンス研究所 研究員）

3. 事後評価結果

本研究は誤り耐性量子コンピュータの設計を具体化し、最適化することを目的としている。設計の具体化によって誤り耐性量子コンピュータに必要な技術的な要請を明らかにし、それを解決するための研究開発を可能にすることも狙っている。本研究は当初、素子等の特性のばらつきを積極的に活用して性能向上を図ることを目指していたが、より基本的な設計を行うように方針が変更された。量子コンピュータの各レイヤにおいて必須となる要素の設計や制御の自由度を明らかにし、量子コンピュータの性能を解析するソフトウェアを開発した。具体的には超伝導量子ビットの量子操作におけるノイズマップの解析、ノイズマップのシミュレータ、表面符号を用いた際の誤り率計算、基本論理命令セットの定義、アセンブラ、アプリケーションを対象としたエミュレータがある。これにより、下位レイヤのシミュレーション、複雑なプロセスの符号性能の評価、アプリケーションの計算時間の評価が行える。誤り耐性量子コンピュータの設計においては誤り訂正よりも上位のレイヤの最適化を行っている。重要な成果として誤り訂正と誤り抑制の組み合わせによる所要の量子ビット数の削減、時間的な誤り率の変動の効率的な管理、誤り率のばらつきを考慮したエラー推定、ループ並列化による高速化があげられる。また、コンピュータアーキテクチャや周辺回路についてエラー推定機構の効率的な実装を提案した。以上のように本研究により誤り耐性量子コンピュータの構築法について充実した成果をあげている。

本研究においては、誤り耐性量子計算機の基本設計が完成した後に学生を研究補助員として雇用することで、研究が並列化され多くの成果につながっただけでなく、後続の教育にも益することができた。また、研究が多くのレイヤにまたがっているため、本さきがけ領域の複数の研究者との共同研究が有効に働いて成果が出ている。特に、コンピュータアーキテクチャの研究者とともに研究を進めていることは評価できる。

今回得られた誤り耐性量子計算機の設計および考え方の枠組みは、誤り耐性量子計算機の設計と拡大を目指す「Q-LEAP 超伝導量子コンピュータ」や「内閣府ムーンショット 目標6」における参考設計として活用されており、本研究者の飛躍につながっている。

今回開発されたソフトウェア群は量子コンピュータの各レイヤでの機能評価に活用することができ、具体的な実装方法の開発が加速されるものと考えられる。今後は各レイヤを有機的に結合できる設計ツールの実現が望まれ、それによって量子コンピュータの個別技術の設計と全体設計の定量的な評価基盤が確立する。これは量子コンピュータの性能を改善する様々な提案を全体性能への影響も含めて評価できることになり、量子コンピュータの実現を早めることが期待され、その科学的経済的なインパクトは大きい。

最後に、得られた成果や知見を体系的にまとめ、誰もが利用できるようになることが期待される。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 実世界における量子計算に向けた数値的解析

2. 個人研究者名

Darmawan Andrew Sudiro (京都大学基礎物理学研究所 特定助教)

3. 事後評価結果

本研究は量子誤り訂正符号におけるノイズのシミュレーションと誤り訂正符号を解析する数値手法の開発を目標としている。特に、実際の量子ビットでは特定のエラーが起りやすいこと (Biased noise) を考慮した解析を行っている。評価手法としてテンソルネットワークを応用することで計算の効率化を目指した。符号の復号の検討も行っている。本研究によって、Biased noise に対しては従来知られている表面符号を変形することで復号が容易で誤り耐性の高い符号が実現できることが示された。表面符号の最適復号法はテンソルネットワークで定式化できることが知られていたが、今回、Biased noise ではテンソルネットワークのエンタングルメント構造が簡単になり、同時に許容される誤り率の上限も向上することが示されている。具体的にカーキヤット量子ビットを用いた XZZX 表面符号を取り上げ、カーキヤット量子ビットのダイナミクスをマスター方程式によって解析し、位相エラーが高いノイズモデルを構築して表面符号のシミュレーションに用いた。これまで考えられていた等方的なノイズモデルよりもノイズ耐性が高いことが示された。この成果は例えば Amazon の量子コンピュータ研究グループにも取り入れられている。これに関連して、Biased noise モデルでは誤り耐性量子コンピュータの実現に必要な魔法状態の生成も従来法より 2 桁低い誤り率で行えることが示された。当初、ニューラルネットワークの導入も構想されていたが本研究期間では検討されていない。一方、新しい展開として、ランダム符号の復号の効率化が検討された。従来から、表面符号は、誤り耐性は高いが符号化の効率が低いことが知られていた。そのため、浅い量子回路で実装できるランダム符号を検討した。ランダム符号の正確な復号アルゴリズムは知られていなかった。今回、1 次元の符号に対してテンソルネットワークを用いた復号アルゴリズムを提案し、少ない計算量で復号が行えることを示した。

本研究者は採択以前から国際的な共同研究を行っており、海外での共同研究も計画されていた。しかし、パンデミックの影響でこれらはキャンセルされた。このような状況下でも国際的な共同研究を進め、また、本さきがけ領域の研究者との共同研究などによって適切に研究が進められている。また、2023 年 3 月に量子誤り訂正に関する滞在型国際会議を主催者として開くなど、研究成果のアピールや今後の発展として評価できる。

量子誤り訂正は実証実験が報告されるなど、今後ますます重要な分野である。実現性が高い手法や、実際に物理系におけるノイズバイアスに対処するようにデザインされた量子誤り訂正、そしてテンソルネットワークを用いた量子誤り訂正研究を開拓している。種々の現実的状況下での量子誤り訂正符号やエラー解析の手法としてテンソルネットワークが有効であることを示したことは大きな波及効果があるものと考えられる。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子ハイブリッド組合せ最適化アルゴリズム開発

2. 個人研究者名

平石 秀史（日本大学理工学部数学科 准教授）

3. 事後評価結果

本研究では組合せ最適化問題に対する量子・古典ハイブリッドアルゴリズムの構築を目的としている。このため、中・小規模量子ゲート計算機において量子アルゴリズムを設計する上で効果的な分解が可能となる条件の解明と NISQ への実装を目指した。本研究では、組合せ最適化問題を解く上で基礎的なサブルーチンとして期待される、グラフ上の量子探索アルゴリズムである量子ウォークの省サイズ回路構成方法とイジング分配関数計算の近似率向上が可能なグラフクラスの検討を行った。前者については量子算術演算を QFT を用いて位相上で行うことにより、従来よりもサイズが小さい実装方法を見出し、IBM の NISQ 上で既存の手法よりも高い精度を実現した。後者については量子グラフ状態を用いた内積表現を用いて多項式長の回路サイズでイジング分配関数を計算するアルゴリズムの改良に取り組んだ。特に密な二部グラフの場合に近似率が改善できる制約条件を見出した。また、このアルゴリズムを拡張することによりイジング分配関数計算以外へのグラフ上の数え上げ問題を量子状態の内積表現を通じて近似計算する回路を構成できた。

当初の基本的アイデアは、グラフ構造を古典で解ける部分と解けない部分に分割して後者を量子コンピュータで行うことによって小規模な量子コンピュータでも効率的な計算を行うことであったが、これについての検討はなされていない。これは調査の結果、問題の難しさが判明したことにより、効率的に計算できる構造の研究にシフトしたことによる。研究を進めるうえで致し方ないところもあるが、採択の理由が、この組み合わせ最適化問題に対する量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの創出への期待であっただけに残念な思いが残る。実機での実行が困難であるとしても分割法に関する量子アルゴリズムは提案・検討できるはずなので研究計画の修正方針には検討の余地があったように思われる。また、実機での実証にこだわりすぎた部分もあるように思われる。先行して理論研究をすすめるとより大きなインパクトが得られることが期待できる。

本研究期間中に研究者が異動したことに伴う研究環境の変化により、量子アルゴリズムの実機での実装・実験のための研究補助者の確保といった研究実施体制の構築や、人件費などの研究費の執行に困難があったようである。

グラフ最適化は極めて重要かつ有望な応用であり、量子コンピュータへの適用を探索する上で挑戦的な課題である。今後は量子ウォークやイジング分配関数の研究と組み合わせ、これらの研究と最適化との関係を明確にし、有用なアルゴリズム提案へとつなげていくことが期待される。当初のアイデアは野心的であったが、方法論を再考して目標が達成されれば社会に対して大きなインパクトが見込める。

なお、研究者はさきがけ期間中に東京大学大学院情報理工学研究科助教から日本大学理工学部数学科准教授に昇任した。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 完全秘匿性を実現する量子 IoT アーキテクチャの構築

2. 個人研究者名

松崎 雄一郎（産業技術総合研究所新原理コンピューティング研究センター 主任研究員）

3. 事後評価結果

本研究は量子性を用いて完全な秘匿性の保証されたモノのインターネット IoT の理論的枠組みを提案することを目的としている。量子センサ、量子コンピュータ、量子通信を統合化させることで高効率・高速・安全な情報処理システムを構築し、超スマート社会の実現への貢献や量子センサ、量子コンピュータ、量子通信を複合化した多機能デバイスの理論的な提案を行おうとしている。具体的には、多地点での磁場情報を同時に読み出す量子センサネットワーク、サーバーに入力・出力を隠したままユーザーが計算を実行できるクラウド型の NISQ 量子計算、秘匿性を有する遠隔操作量子センサなどの研究を行うことを構想した。

量子センサに関しては、ノイズの影響下でベクトル磁場を高感度に求める方法の提案、スピンを高速に検出する方法の提案、電子スピン共鳴の高感度化プロトコルの提案、高感度量子センサのリソースとなるエンタングルメントの生成方法の提案を行った。量子通信に関しては、その実現のための有望な素子であるダイヤモンド中の窒素・空孔 (NV) 中心の特性評価を行い、制御法の提案を行い、共同研究により実証実験も行っている。量子コンピュータに関しては、エラー抑制の手法の提案、機械学習の量子アルゴリズムの提案、量子化学アルゴリズムの提案、超伝導量子ビットの性質の評価、分配関数を計算する量子アルゴリズムの提案、量子ビットのノイズ源となる環境の評価などを行った。量子センサと量子通信の複合化として、位相緩和が及ぼす遠隔量子秘匿センサへの影響の評価、磁場の発生源を秘匿する量子センサの提案、遠隔地における量子化軸の補正法の提案を行った。また、量子コンピュータと量子通信の複合化として、サーバーに入力・出力を秘匿したままユーザーが計算を実行できるクラウド型 NISQ 量子コンピュータの提案を行った。以上のように多岐にわたる研究を行い、多くの成果を得ている。これは本研究者が積極的に共同研究を行っていることの表れである。

研究補助者の雇用や共同研究などによって効率的に研究が進められた。共同研究での成果が多いため、その中で役割分担や寄与の程度が明確になるとさらに良かった。

量子 IoT という新しい概念を提唱したことは新しい研究分野を開拓するものとして評価できる。量子情報技術の応用として社会的なインパクトの大きい分野に発展していくことが期待される。今のところそれぞれの成果が独立して得られているので、今後量子 IoT として体系化していくことが望まれる。量子通信と量子計算と量子センサが融合することでどういった質的な価値が生まれるのか、本研究で実現される性質が社会実装した場合の意義をニーズの側から探求することは重要である。その際、効率・安全性などの理論的な解析・証明を技術的な進展に先立って進めていくことが望ましい。本研究テーマは情報科学・情報工学分野との連携により飛躍的に発展できるポテンシャルがあると考えられ、今後に期待したい。

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 計算化学のフロンティアを拓く革新的複素数波動関数量子シミュレータの開発

2. 個人研究者名

水上 渉 (大阪大学量子情報・量子生命研究センター 准教授)

3. 事後評価結果

本研究は量子化学計算において古典計算に対する量子優位性を得るために、古典コンピュータが不得手とする問題を選ぶことを提唱している。即ち、空間対称性、スピン対称性、実数対称性がない系を対象としたとした複素数波動関数を用いるアルゴリズム開発を目的とした。また、実用的な量子化学シミュレーションを行うためにエネルギー微分などの物性値を計算する手法の開発も行った。

本研究では 1) 電子の散逸を有限基底で記述するための開放条件として複素数ポテンシャルを導入した系、2) 周期境界条件のかかった系、3) Schrödinger方程式ではなくDirac方程式によって相対論効果を考慮した系(スピン対称性の崩れた系)、4) 強磁場下でかつ相対論効果を考慮した系の4つについてVQEを開発・実装した。さらに、それぞれの特徴を吟味した結果、Dirac方程式によって相対論効果を考慮した系が量子コンピュータの優位性を実証するうえで最も有望であると結論した。定量的な考察を行うために誤り耐性量子コンピュータを仮定した位相推定アルゴリズムに必要な計算リソースを見積もった。その結果、Dirac方程式を解く問題ではより小さな系で量子と古典の逆転が起きることが明らかになった。一方、計算の実行時間の観点からするとDirac方程式の問題は特に有利にならないことも示された。このことから量子コンピュータに有利な系は「量子状態が複雑」かつ「ハミルトニアンが単純」な場合であるという洞察を得ている。これを発展させて、物性物理の問題の方が量子化学よりも早く量子優位性が示されることが明らかになった。これはさきがけ領域研究者との共同研究の成果であるが、本研究者の洞察が一つの駆動力となったことが想像される。以上の結果は今後の量子コンピュータ応用の指針を与えるものとして重要な結果である。本研究によって量子化学の問題に対する方法論開発や量子コンピュータの化学応用についての課題が明確化されたといえる。

また、実用的な量子化学シミュレーションに向けた物性値計算手法については、軌道最適化VQE法を開発して微分の計算を効率化した。これによって多原子分子の構造最適化を実現した。さらに、微分法の拡張により励起状態を扱うことができるようになり、光化学反応や2階微分が必要な分極率の計算に適用された。これは量子化学計算における有用なツールとなるものと思われる。

量子コンピュータならではの化学応用について常に意識し、検討結果に応じて計画を柔軟に修正していったことも評価したい。研究費執行については、必要な計算化学ソフトウェアの購入と専用の計算機に有効に使われた。また、実機を使用する予算を確保することで量子コンピュータの実機ノイズの影響やノイズ耐性に関する研究も実施した。また、最終年度には2名の補助者を雇用し研究のサポートを得ている。

当初より対象系としてきたウラン二量体の計算と解析は未達成となっている。今後アルゴリズムの開発を続けることでこのような難しい系について量子コンピュータが貢献できることを示していただきたい。一方、解析的微分法の開発と実装により量子コンピュータを用いた化学シミュレーションを可能にしたことは評価できる。実際、これに関連した3件の論文はTop10%に入っている。QunaSys社が開発しているクラウドサービスQamuyに固体系の計算や解析微分の機能は実装されており、今後化学系の企業を中心に活用が進むことが期待できる。

なお、本研究者は研究期間中に大阪大学量子情報・量子生命研究センター准教授に昇任している。