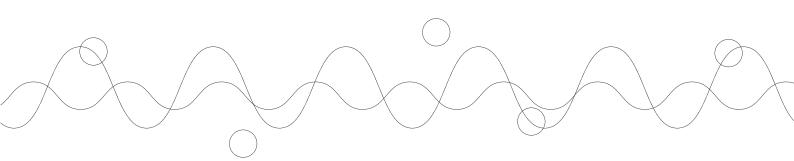
科学技術未来戦略ワークショップ報告書 **みんなの量子コンピューター**

~情報・数理・物理で拓く新しい量子アプリ~

2018年8月17日(金) 開催



エグゼクティブサマリー

本ワークショップでは世界的に研究開発競争が進む量子コンピューターについて、そのコンピューター科学・電子工学としての側面に着目し、量子コンピューター開発の現状と課題・期待を議論した。また、コンピューター科学や電子工学分野の研究者・技術者が量子コンピューター研究開発に参入する際の障壁、今後 $10\sim20$ 年で実現可能そうな小中規模の量子コンピューターに期待される用途、などの点についても幅広い観点から議論し、科学技術・推進方策の両面から課題を探った。

CRDS からは、(1) 古典・量子ハイブリッドアルゴリズムの開発・実装・実証、(2) 量子ソフトウェア開発環境の整備、(3) 量子コンピューターアーキテクチャ設計、が重要な研究開発課題として挙げられる点を仮説として提示した。また、分野融合・企業参画・国際連携の促進が必須であり、そのための研究開発ネットワークとハブ拠点の設置が求められること、量子コンピューターコミュニティの醸成の視点が重要であること、量子コンピューターの裾野を広げる教育・訓練活動が研究開発と平行して必要であること、を推進方策として提示した。

ワークショップを通じ、コンピューター科学・電子工学と量子情報科学分野が協力して量子コンピューター開発に取り組むことの有効性・現実性が確認された。とりわけ、量子コンピューターをアクセラレーターとして認識する点や、エラー耐性量子コンピューターと NISQ 量子コンピューターの構造上の大きな違いなどは、議論を通じて参加者の共通認識となった。コンピューターアーキテクトには、量子コンピューターのプログラミングモデルやアーキテクチャを俯瞰・整理する役割が強く期待された。

また、コンピューター科学・電子工学と、現状の量子情報科学の間には分野の壁は存在しているが、十分に乗り越え可能であるとの認識も深まった。ハードウェア開発側から見ると、逆に分野のオーバーラップが大きすぎる境界領域を区分けできないという指摘もあり、学際的な研究開発拠点の必要性は参加者で共有できたものの、具体的にどのような形で実現すると望ましいかは、さらなる議論が必要であった。

加えて、古典・量子アルゴリズムの開発は重要であるが、量子化学や機械学習など、これまで 当該分野で蓄積されてきたドメイン知識と量子情報科学の考え方を上手に組み合わせることの重 要性も明らかとなった。

これらの議論を踏まえ、CRDSでは今後国として重点的に推進すべき研究領域と具体的研究開発課題を検討し、研究開発の推進方法も含めて戦略プロポーザルを策定し、関係府省や関連する産業界・学界等に提案する予定である。

目 次

第1章	ワークショッフ開催趣旨	2
1.1	開会挨拶	2
1.2	ワークショップ開催趣旨説明	2
第2章	量子コンピューティング×コンピューター科学	9
2.1	量子コンピューター共創に向けた課題の共有	9
2.2	量子ソフトウェア領域ー現状と展望ー	20
2.3	量子コンピューター研究へのアーキテクチャ屋の期待	31
2.4	量子コンピューティング~コンピューター・アーキテクチャの観点から~	38
2.5	量子コンピューティングにおけるオープンソースの動向	44
第3章	量子コンピューティング×機械学習・量子化学	53
3.1	量子コンピューター俯瞰・応用・人材育成	53
3.2	量子コンピューターへの期待~量子化学の立場から~	62
3.3	量子アニーリングや類似技術の研究開発における現状と課題	68
第4章	総合討論	73
4.1	計算・キラーアプリケーション	73
4.2	ボトルネック・重要課題	76
4.3	推進方策	78
付録 A	開催趣旨・プログラム	79
付録 B	ワークショップ参加者一覧	82

1. ワークショップ開催趣旨

1.1 開会挨拶

木村 康則 (JST-CRDS)

本日は、科学技術未来戦略ワークショップ「みんなの量子コンピューター」の開催するにあたり、たくさんの方にお集まりいただいたことを感謝したい。

私なりの理解では、量子コンピューターはこの1、2年ですごく話題になってきたが、どこか話題先行で中身を伴わず、皆さんが皆さんの解釈で自由にという面も否めない。海外の激しい動向や、国内でも計画されていることなどを、もう少しきちんと押さえ、どういうアプローチで何を行う必要があるかを見極める必要がある。現状がどうなっていて、これを引っ張るキーとなる技術は何かというところを、きちんと明らかにしてゆければと思う。

量子を第2のAIにはしたくないと思っている。そのためには、大きな流れのアップダウンに 右往左往せず、どこから攻めていくのかということをしっかり考えたい。今日は、そのような機 会にしたいというのが私の想いである。現状を理解して、何をどうして、どこから攻めていく と、どの辺まで行きそうか、今日で全てその解が見つかるとは思わないが、きっかけになればと 思う。もうひとつ欲を言うならば、量子に限らないが、新しい技術を正しく世の中に伝える方法 についても少し考えてみたい。

今日は、予定調和的に結論を導こうという意図は全然なく、いろいろなことを自由に発言して もらい、議論を高めたいと思っている。是非とも有益な議論をお願いしたい。

1.2 ワークショップ開催趣旨説明

嶋田 義皓 (JST-CRDS)

CRDS は戦略プロポーザルや俯瞰報告書という形で、研究開発の内容や推進方策についての提案・情報提供を各省庁に対して行っている。今回のワークショップは、この戦略プロポーザル提案に向けた検討ワークショップであり、CRDS としてこう考えていますという仮説を提示し、それを議論したいというのが趣旨である。特に、量子コンピューティングの研究を強化するにあたって、我が国の戦略・方向性についての共通認識を得たい。議論が収束しなくてもいいが、どういう論点を踏まえておかなければいけないか、という認識を得たい。

ポイントとなるのは、量子コンピューターの研究開発を、どの角度から眺めるかということである。今回は、コンピューターサイエンスや電子工学の視点で現状や今後の課題を把握・議論したい。加えて、こういった視点から見て、研究開発テーマに加えて、推進方策も考え、その両面でどこが課題になっているかを探索したい。

図 1.2.1 にあるようなことを問いとして立て、参加者の方にはそれへの回答をお願いした。まず、先述の通り、電子工学やコンピューター科学の視点で、現在の量子コンピューターの研究開発がどういう状況に見えているか、何を量子コンピューターに期待し、その実現を妨げる課題は何かというのを探りたい。そして、現在の研究開発状況から見ると、コンピューター科学や電子工学の研究者・技術者の量子コンピューター分野への参入が非常に大きなポイントだと思うが、かなり障壁があるようなので、どう下げたらいいかを議論したい。

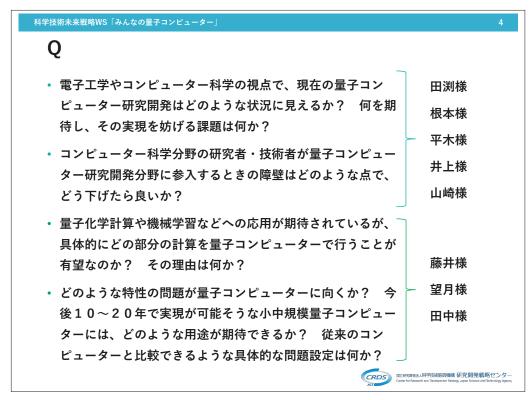


図 1.2.1:ワークショップの「問い」

そして、今、 $10\sim50$ 量子ビットのサイズで、「NISQ」と呼ばれているノイジーでスケールも小さい量子コンピューターというのが少しずつ使えるようになってきている中で、応用の期待感はどうなっているかを議論したい。現状では、量子化学計算や機械学習への適用が期待されているが、具体的にはどうなっているのか、どの程度有望なのか、その理由は何か、について理解を深めたい。さらに、もう少し先の話で、今後 $10\sim20$ 年で実現が可能そうなスケールで、どのような用途であれば期待してよいかを見極めたい。この 4 点が今回のワークショップの議論の項目である。

戦略プロポーザルでは、やはりコンピューターサイエンスの目で見たときに今の量子コンピューターの研究開発から抜け落ちているところが結構ある、というのが大きなポイントだ。一言でいうと、アーキテクチャーを含むソフトウェアのところが充実してこないと、プラクティカルな量子コンピューターにはならないのではないかという懸念である。それには、技術開発も大事だが、やはり人というのがかなり重要になってくるだろうと考えている。

戦略プロポーザルでは「量子コンピューター」と呼ばれるものを便宜上3種類に整理する。エラー耐性量子コンピューター、それよりも計算パワーは劣るかもしれないが何かの形でうまく使えればよいと考えられている NISQ 量子コンピューター。そして、しくみはやや違うが量子アニーラー。範囲としてはここまでを全部ひっくるめて議論したい。主にゲート式の量子計算を念頭にするが、「量子コンピューターサイエンス」として分断していても仕方がないという意図もあり並べてある。

量子コンピューターに関して、CRDSでは昨年度に周辺分野を調査しており、「革新的コンピューティング」という戦略プロポーザルにまとめた。Society5.0やSDGsなどの大きなトレンドのもとで、ビッグデータ解析、機械学習、画像・メディア処理、組み合わせ最適化、暗号・符号化などといった計算ニーズが大きくなってきていること、一方で、それを実現する半導体で

はムーア則に陰りが見えているという時代感の中で、トランジスタ数だけでない新しい性能向上の方向性が求められているとして、革新的なコンピューティング技術が必要となることを書いた。ニューラルネットワークのハードウェア実装、ニューロモルフィック、イジングモデルなどと並んで、量子コンピューティングもここに含まれる。このような大きな背景の中で、いま量子コンピューターがフィーバーしているというように現状をとらえている。

ここでのポイントは3つあり、1つは工学的なチャレンジになってきており、量子コンピューターをどう作って何に使うかといったところが大きくなってきているという点。そして、これに合わせ、スタートアップや、ユーザー企業など非従来型のプレーヤーが参加してきているというのが次のポイント。裾野が広がっていくというのが今後の大きな流れだろう。最後は、この流れの中で、アーキテクチャーやソフトウェアの重要性というのが認識されつつある点。ツールも結構出てきており、欧州のQuSoftや米国のEPiQCなど量子ソフトウェアに注目してフルスタックを作るようなプロジェクトが立ち上がりつつある。学会としても、米国物理学会だけではなく、IEEEやACM系の学会で、チュートリアルや基調講演が始まっていて、少しずつ工学の側の話題にシフトしていくと見ている。やはり、計算機としてプラクティカルなものを作るという観点では、コンピューター科学と電子工学の力がないと、どうしても難しいという状況に見える。

図 1.2.2 に超伝導量子ビットとイオン・トラップでの量子ビット数の推移をまとめた。勝手に予想の線を延ばすと、10~20 年で 100~1000 量子ビットの辺に来てもいいというような状況に見える。グローバー検索や Shor の因数分解などの明らかに有用とわかっている計算をするのに必要な量子ビット数には、現状は到底足りない。エラー率のこともあるが単純にビット数で見ても、問題がレジスタに乗らないのでどうしようもない。ただし、中間のところで何かおもしろいことができるとすると、誤り耐性量子計算に向かうマイルストーンとして非常に重要になってく

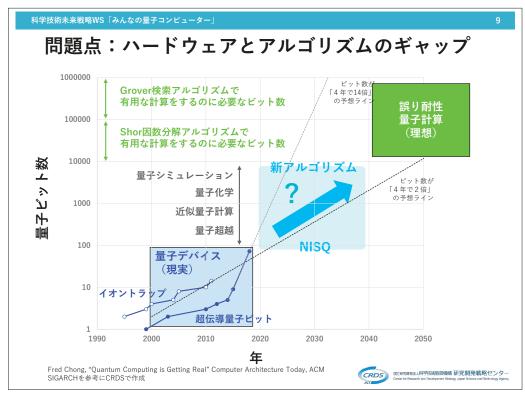


図 1.2.2: ハードウェアとアルゴリズムのギャップ

るのではないかと思われる。トピックスとしては量子シミュレーション、量子化学計算、近似量子計算、量子超越などがあるだろう。ここの小中規模の近似的量子コンピューターのキーワードは「NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum)」と呼ばれ、このあたりのところをきちんとやりましょうというのが戦略プロポーザルのポイント。ここだけをやるというのではなく、エラー耐性量子コンピューターに向かう中で NISQ をやるということだと思う。

現在のコンピューターの構造から、量子コンピューターもそれに類するような構造になっていると仮定して現状を見ると、アルゴリズムより下からアセンブリ言語のところぐらいまでの層が、抜け落ちているように見える。従って、そこをしっかり構築しておかないと、横で走る従来のコンピューターと一緒に量子コンピューターを使うのは非常に難しいということになるわけである。ポイントは誤り訂正を入れる層だが、基本はソフトウェアで動くので、複数のサブコンパイラの間の適切な抽象度のところに入れることになると思われる。もちろん、ここで示した構造が正解とは言えず、議論が必要。この抽象度のレベルを決めることは研究開発としてやらなければいけないテーマである一方、ここをやる人はあまり多くないというような状況と思う。

戦略プロポーザルではこの状況を見て、3つの研究開発テーマを挙げた(図 1.2.3)。まず、NISQ 量子コンピューター上で動くような有効なアルゴリズムの研究開発というのは非常に重要。これには量子多体系の計算、最適化、機械学習、検索、グラフ、ゲームなどある。それから量子超越を実証するようなアルゴリズムというのも含まれる。2つめは、この NISQ 量子コンピューター上で動くソフトウェアの開発を支援するような、ノイズがきちんと計算できるシミュレーターや、ライブラリ、コンパイラ、検証ツールなど開発環境の整備が必要だろう。こういったところは、これまでの HPC 技術や、物理で研究されているノイズモデルをうまくここに反映するような研究開発が必要だ。3つめは、さらにこの下のレイヤとして、誤り訂正符号の話をコンピューターとしてきちんと扱わなければいけない。これはミドルウェアというか、ハードウェ

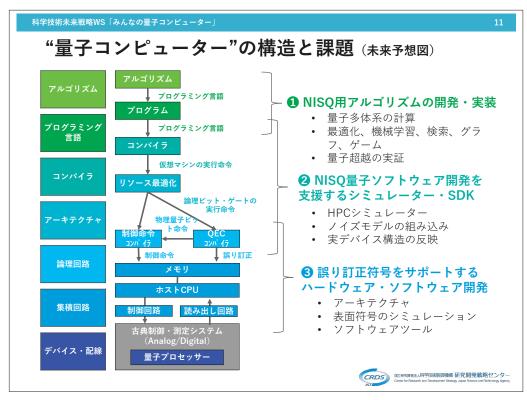


図 1.2.3:量子コンピューターの構造と課題

アとソフトウェアの両方を見た開発が必要で、マイクロアーキテクチャーのあたりが重要になってくる。これより下には、量子ビットが巨大な古典の計測・制御システムに埋め込まれている仕組みになっていると考えられ、古典の制御をいかにやるかというソフトウェア・ハードウェアの研究開発が必要と思われる。

現状をレイヤごとに上から見てゆく。量子アルゴリズムでは、NISQ量子コンピューター用は不足気味。VQEやQAOAなどといった量子・古典ハイブリッドアルゴリズムというのがどんどん登場している。ソフトウェア開発環境(SDK)はいろいろ出てきていて、それぞれ特色がある。高性能シミュレーターが使えたり、クラウド越しに実機で計算できたり、古典とハイブリッドのプログラミング言語が提供されていたりなど。現状は多様な状況で、まだスタンダードはない。

マイクロアーキテクチャーのところは、少しずつ考え方がまとまりつつある印象。やはり量子コンピューターが単体で動くというのではなく、コプロセッサーというか、アクセラレーターというか、古典の大きなシステムの中に量子チップがポツッと埋め込まれている様相を呈している。これは上のアルゴリズムの部分もそうなっていて、例えば量子化学計算のところの大部分は従来の計算をやって、ある一部分だけ量子プロセッサーに投げましょうという話になっている。専用機まではいかないが、ドメインスペシフィックアーキテクチャのように、ある程度は実行する計算に対して上から下までを最適化するようなアプローチも必要になってくるように見える。

最後に残るのが、誤り訂正のところ。今、超伝導量子ビットで非常に注目されているのは、2次元表面符号という方式の誤り訂正符号。IBM や Google など各社この実装を狙っているところだが、2次元表面符号自体は「決め手」というわけでもなく、実装性を考えた新しい符号も可能だろう。さらに、きちんと動作するソフトウェアとして開発していかなければいけない。

最後に、これらの研究開発をどう進めたらいいかを考えたい(図 1.2.4)。ハードウェアとソフ

科学技術未来戦略WS「みんなの量子コンピューター」

18

推進方策の要点(検討中)

- 1. ハードウェア・ソフトウェア連携研究
 - ハブとなる研究拠点の設置+ネットワーク連携
- 2. キラーアプリ探索・人材育成
 - インフラ・プラットフォーム用意・共用(環境・シミュレータ、 OSS積極利用)
 - 量子コンピューター科学の教育プログラムの再構成(量子力学(重 ね合わせ、エンタングル、、、)からスタートしない)
- 3. コミュニティー形成
 - コンソーシアム
 - グランドチャレンジ型のファンディングプログラム



図 1.2.4:推進方策の要点

トウェアを連携させ、上から下まで揃えてきちんとやらないといけない。そのためには何らかのハブとなるような研究拠点が必要ではないか、というのが我々の提案の1つ。もう1つは、キラーアプリ探索や人材育成のためには、インフラやプラットフォームが絶対に必要。そのためのシミュレーターを含むようなソフトウェア開発環境は用意しなければいけない。もちろん全部を自前で用意する必要はなく、オープンソースや他のプロジェクトとの連携など、いろいろなものを積極的に取り入れてゆく。

加えて、気がかりなのは、量子コンピューター科学や量子プログラミング教育である。このあたり、研究しながらどう教育・トレーニングしていくかというのが重要になってくる。量子力学からスタートすると量子コンピューティングまでは結構長いので、もう少しショートに、重ね合わせとかエンタングルとかを深くまで理解しなくてもある程度の量子計算ができるというようなところまで持ってこられないか、と思う。

これらを全部支えるためには、やはり量子コンピューターコミュニティーがもう少し太っていかないといけない。拠点も必要だしコンソーシアムみたいなものも必要だろう。このあたりに「みんなの」に込めた想いがある。今ともう少しやり方を変えてコミュニティーを大きくしていって、人材育成も含めて研究・教育をやっていくというようなことが今後必要となると考えている。

今日、議論したい点は多岐にわたるが、2つのセッションを設けた。1つは量子コンピューティングとコンピューター科学・電子工学がクロスするところを議論したい。もう1つはアプリケーションのところで、今見えているものとしては機械学習と量子化学計算があるので、そこを中心にもう少し外側まで有望そうな計算が何かを議論したい。そして、総合討論ではそれらを総括して、どう進めていくか、どこが課題かというのを議論したい。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:量子ビット数が対数的にふえていくという図1.2.2。これは半導体では有名なカーブだが、本当に1万に行くのかという大問題がある。全てのトレンドカーブはまっすぐ行くわけではなく、どこかでへたれることが多々ある。計算機屋として興味があるのは、10万ビットがコヒーレントに動くという姿は永遠に来ないのではないかと思うので、そうではなく、例えば100、500、1000量子ビットぐらいを幾つか集めて合計1万でも役に立つのかということである。そのあたり、話の中で触れていただきたい。

A: 承知した。これに関して、ほかにもコメントが欲しい。

C: そういう話を10年前にも聞いた。「10個は絶対できない」と、シニアの方からそういう話がよくあった。しかし、絶対できないと言っているうちに海外でできたということになって、日本も大変という歴史をずっと歩んできている。もちろん、今はないものなので、絶対にできるかどうかというのは言えないが、いろいろな証拠が挙がってきている。例えば、Google は 2028年に100万量子ビットの量子コンピューターを発表するアナウンスしている。こういった今は10個だ、50個だ、70個だと言っているものと、10年後に100万個だと言っているものは技術的に違うものである。量子コンピューターの種類を3つに分けて、誤り耐性万能デジタル量子コンピューター、近似型コンピューター、イジングコンピューター、をばらばらに議論するのはふさわしくないんじゃないかと言うが、技術的にこれを一緒に議論するのは無理だろう。そこをもう少し技術に照らして議論を展開しないと、整理しているのか、ぐちゃぐちゃにしているのか、どっちかわからないということになりかねないと思う。

- A: 今日は、それらの違いのところもぜひ議論したい。私の理解では、少なくとも NISQ 量子 コンピューターとエラー耐性量子コンピューターには何らかの技術的なつながりがある。 NISQ 量子コンピューターをホップして、エラー耐性量子コンピューターに向かう、ということと思うがそうでもないということか?
- C:目標にしている技術が違う。物理の視点からは基礎は同じと言えばそうかもしれないが、 コンピューターサイエンス的に言えば両者は違うものだろう。したがって、どこにフォー カスするかによって、コンピューターサイエンスの基礎は違うと思う。
- C: そのとおりであろう。こういうことができたら素晴らしいと思う。
- A: 承知した。今日の議論では、NISQ 量子コンピューターとエラー耐性量子コンピューター のどちらの話をしているのかを明確にしながらやっていきたい。

2. 量子コンピューティング×コンピューター科学

2.1 量子コンピューター共創に向けた課題の共有

田渕 豊(東京大学)

今、東大先端研に所属しているが、もともとは高専の情報におり、その後、量子コンピューター実装をやろうと思って阪大で電気をやった。今物理をやっているが、情報、電気、物理というふうに約5年ごと分野をホップしてきた。今日は物理の話をほとんどせずに、電気、電子の人向けにどういう課題があるのかを簡単に紹介したい。

量子コンピューターの説明として、比較のために普通の論理回路を考える。論理回路は良いしきい値素子になっている。つまり、入力の電圧が揺らいでも出力電圧は必ず一定の値が出てくる。このノイズは出力側に伝播しないというのがすばらしい。

一方、量子の論理ゲートは残念ながら、しきい値素子ではなく、入力の状態はアナログ、出力もアナログである。入力にノイズが乗ると、それはどんどん伝播していき、回路の中のノイズがどんどん増えていくというように、エラーが伝播していく(図 2.1.1)。

伝搬をストップさせる唯一の希望は「観測」である。観測を行う、波動関数を収縮させるということをすると、非線形な操作が入って、必ず 0 または 1 という出力が得られる。ゲートをかけるごとに測定してしまうと量子性がなくなるので、量子コンピューターの計算中はずっと量子力学的な状態、アナログ値を保っておく必要がある。

この回路の素子には、現状の私たちの技術では 1% から 10% ぐらいのパラメータの設計値からのズレが入ってしまうが、気合いと根性で吸収している。例えば 1% ずれたら、常温にある制御エレクトロニクス回路中の DA コンバーターの周波数を 1% 変えたり、制御波形の振幅を 1% 変えたり、そういう泥臭い調整をやっている。今の CMOS 素子では、ドライバの出力電圧をビットー個一個に調整するようなことはしないが、我々のところでは出力の電圧のドライバの電圧値を一個一個調整するようなことをしないと、こういう回路がまともに動かないので、拡張性の観点からはそれが大きな違いかなと思う。動作可能領域にマージンがないというところが非常につらい。

今の量子コンピューターの状況として、海外のチームは軒並み 10 量子ビット以上を集積化してきている (図 2.1.2)。その中で、中国がどんどん多量子ビット化してきているのがすごいと思う。どのグループもそこそこの誤り率、5% から 10%、これぐらいで動作をしていて、コヒーレンス時間もそこそこ長い。長いといっても昔と比べると、という意味だが。

先ほど話した回路のエラーをどうにかしようというので、量子誤り訂正という符号を入れる方法がある。これにより、実装する量子ビットの数の半分ぐらいを測定用に、半分ぐらいを計算用に使い、測定から来る非線形性を計算のほうに押し込める、つまり計算の量子ビットに生じるエラーを測定により取り除くことができる。こうすることで、動作に少し余裕(マージン)が生まれる。

どれぐらいの動作マージンかを光・無線通信技術で説明する。現在の通信技術等に使う 1024QAM の縦横軸が同相成分と直交位相成分のコンステレーション(信号空間ダイアグラム)では、回路の非線形性などにより横のシンボル同士がかぶり始めると通信が失敗する。私たちが必要な動作マージンはどれぐらいかと言うと、現在の通信技術では 1024 なので、 32×32 だが、これをもうあと 16 倍ぐらい高密度にしたようなところで、こういう一個一個のコンスタレー

2018/8/17

図 2.1.1:量子コンピューター (論理回路との対比)

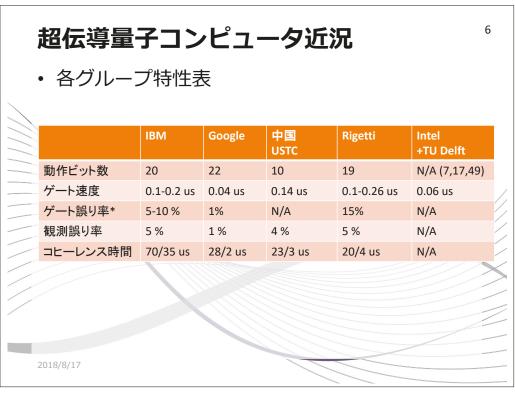


図 2.1.2: 超伝導量子コンピューター近況

ションのパターンが描かれないといけない。ほとんどのアナログ回路によるエラーを取り除き、 密に詰まったアナログ状態を十分にきれいに制御しないとエラー訂正符号が動く可能性はない。 しかし、マージンの範囲内で動けば良く、それで無限精度の要求から解放される。

もう一つの例は、多値の NAND である。1 つのセルで1 ビットではもったいないので多値化することができる。例えば、これを電子があるときを00 として、01、10、11 などグラデーションをつけて、2 ビットの4 値にすることができる。私たちが必要とするレベルはどれぐらいかというと、1024 値以上という細かさとなるので、例えばこの電子の引き抜きや注入を、この1024 倍細かいところまで制御しないといけない(図2.1.3)。

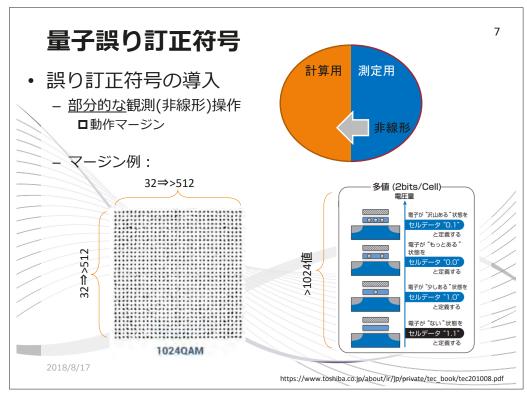


図 2.1.3:量子誤り訂正符号

とりあえずエラー訂正のことを忘れて近似型量子計算をやるという流れもある。この場合、回路のエラーは諦めることになる。図 2.1.4 は量子ビットを縦に、計算ステップを横に並べて書いている。初期状態、白い四角の状態から量子ビットにゲートをかけて、それぞれ状態を更新して計算を進めていくと、後になればなるほど誤りが入ってきて使い物にならなくなる。これが近似型量子計算のつらいところであるが、最初のところだけ使えれば何か量子性によるご利益が少し見えてくるかもしれないので、世界各国のグループが研究開発に注力している。回路パターンだけなら1万量子ビットでも100万量子ビットでも、それが制御できるかどうかは別にして、チップは作れる。しかし、コヒーレンス時間は物質や材料や電磁遮蔽構造による限界があるので、計算ステップ数には必ず限界があって、多分数百ステップも実行できれば御の字である。でも、これぐらいのことはできるかなという気はする。こういう研究も今盛んに行われている。

集積化や制御の課題だが、冷凍機内の配線はかなりつらい問題である。実装は各グループ次第だが私たちは 1 本の線で 1 つの量子ビットに制御信号を送っており、高周波配線のケーブル外径は約 1 ミリ程度である。この高周波同軸線を冷凍機の上から下まで入れており、おそらく 1 つの冷凍機に 1000 本ぐらいは余裕で入るが、1 万本となったらどうなるかはわからない。

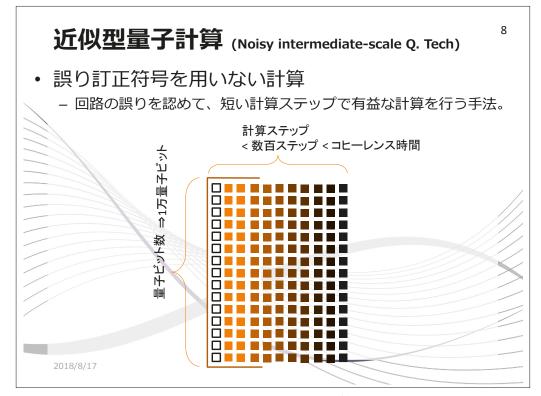


図 2.1.4:近似型量子計算

チップへの配線については、拡張性のあるレイアウトが議論されている。どんなふうにやれば 量子ビットの一個一個にアクセスできるかというようなレイアウトや配線をちょうど議論してい る。もちろん量子ビットの密度がどんどん詰まってくると、今度はクロストークとかアナログの エラーが起こり始め、それはそれで大問題となる。これも拡張性を維持しながら対策できる方法 を私たちは議論している。

従来の技術にあるような、クロスポイント(交差点)のアクセスができる構造がもちろん良いのだが、量子コンピューターの難しさは、コヒーレンス時間に限りがあるため全ての量子ビットを同時にずっと制御しっぱなしなことである。量子ビットは放っておくとどんどんだめになってしまうため、DRAMのフラッシュをほぼ同時にずっとかけ続けているような制御が必要である。スイッチで切りかえるのは良いのだが、時間的に直列にアクセスしているのでは間に合わない。周波数や時間などのリソースを上手に使わないとクロスポイントアクセスは実現されないという気がする。

ほかにも、先ほど述べたアナログの制御の誤りはどうにかしないとまずい。今の無線通信や光通信等で使われているアナログのダイナミックレンジをはるかに超えるような制御をやらなければいけないというのがこれからの課題と思う。

制御装置もかなり大きな課題で、これをどんどん集積化し、低消費電力化していっても、精度の妥協が絶対に許されないというのがつらい。量子制御分野には、もう少し冗長な制御をすると、精度を担保できるというやり方はあるのだが、ゲート時間とのトレードオフになっていて、冗長になればなるほど遅くなっていく。電気のほうからでも量子のほうからでも、制御に関する様々な課題に対するアプローチがあると思う。

量子コンピューターの研究のボトルネックの課題は、分野が少し広がり過ぎていることだと思う。それぞれの分野で人も少なく、オーバーラップも少ない。また、こういう人たちが相互作用

する場所がなかなかない。相互理解を得る場所があればいいなということを常日頃から思う。

海外でも、物理と電子工学やコンピューター科学では分断して発表がなされていたりする。電気電子に近い境界領域になってくると、物理をやっている人からすると、何で物理の学会でそんな発表しているんだ、というような雰囲気になり、なかなかやりづらい。論文の投稿先や業績の評価についても、境界領域をやればやるほど、分野のメジャーな研究テーマからすると、何でそんなことをやっているんだという感じになってくる。どこに投稿すればいいかもわからないし、誰が評価してくれるのかもわからない。

学生を教えている身からすると、こんなことを学生にやらせると、論文を出す先もないし、誰が見てくれるかも分からない。どんどんほかから人を呼び込んでも、なかなか正当に評価してくれるところがないというのは、研究のモチベーション維持という観点でなかなかつらいところだと思う。

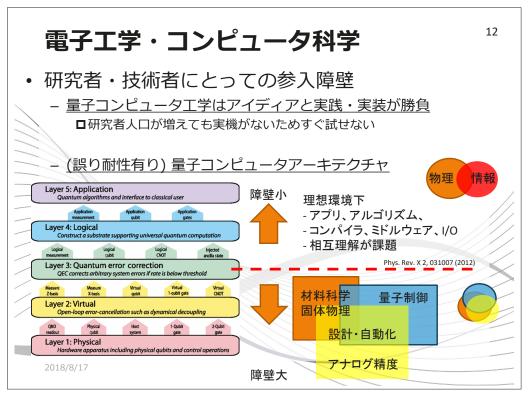


図 2.1.5: 電子工学・コンピューター科学

量子コンピューターへの参入障壁は何かというと、ハードウェア実装に関しては、やはりアイデアの実践・実装の即時実行の難しさだと思う(図 2.1.5)。原理検証実験とは違い、拡張性維持を常に念頭に置かなければシステムとしては意味をなさないため、研究室単位での大規模チップへの実装が独自にできない限り、人口が増えてもすぐアイデアを試して結果が得られない。かなり人的資源やお金が無いとできないので、すぐに実践・実装ができないのはつらいと思う。参入された方ももどかしさを感じると思う。

誤り耐性ありの話をすると、これは物理屋さんが考えたレイヤ構造だが、こうやればいいよという方法が 2012 年に提案されていて、物理、バーチャル、量子エラー訂正、その上はアプリだが、誤り訂正層(Layer3 Quantum Error Correction)ですぱっと層が切れていて、アプリケーション側の参入障壁はそんなに大きくないと思う。物理の人と情報の人が一緒にくっついて、こういうアプリとかアルゴリズムとかミドルウェアとか、その上のほうはいっぱい考えられるとは

思う。ただ、下のほう、どんどん物理に近くなっていけばいくほど、やはり物理の人は材料科学、固体物理をやらなきゃいけないし、応物の人は量子制御、電気の人はこういう設計自動化とかをやるのだろうけれども、オーバーラップが大き過ぎて、お互いがお互いをかなりよく知らないとつらいかなと思う。このオーバーラップを排除するのが、かなり難しいところだと思う。

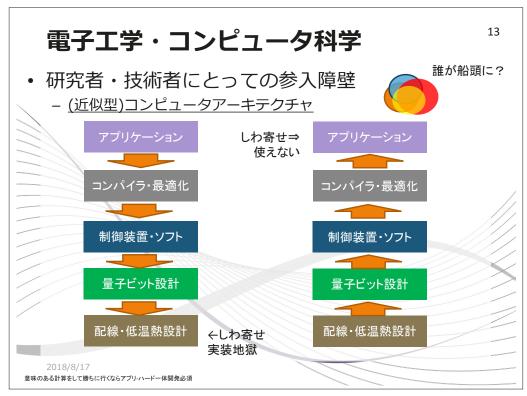


図 2.1.6:電子工学・コンピューター科学

近似型の話をすると、今の状況というのは、もともと物理の人がつくったハードウェア設計の上にソフトウェアを乗せようとしている(図 2.1.6)。そうすると、アプリケーション側に「制約」というしわ寄せが来て、制約の中で動くアプリケーションは、ハードウェア良さを十分に使えているように見えない。近似型の良さは、アプリケーションの人が考えたものに最適化して下位のハードウェア素子を洗練してつくることができることだと思う。しかし、アプリケーションに特化したチップなりデバイスなりをつくることはできるのだが、アプリケーションしか知らない人が、その工程から進めるとハードウェアにしわ寄せが来て、実装がすごく大変になる。かつ、レイヤ構造が入らないので仕事分担が整理されておらず、各人が担う仕事や知識のオーバーラップが大き過ぎて、本当に賢い船頭さんがいない限り、もう誰も面倒を見切れないと思う。誰が船頭になって上下レイヤを突貫でやるのか。やはり意味のある計算なり何なりをしようと思うと、アプリの人がもう量子ビット設計の辺まで手を出して、ぶち抜きで何かをやらないと、本当に意味のあるデバイスはできないと思う。エラー訂正があればハードウェア層とソフトウェア層が切れるので面倒が無いのだが、近似型をやるのであれば、ぶち抜きで設計を考えないと意味がない。

参入障壁を下げるためには、ハードウェアに関してはいろいろな分野がオーバーラップしているので、これを一個一個に細分化していく作業は必ず必要だと思う。ただ、その作業は誰も評価してくれない上に時間がすごくかかる作業なので、多分誰もやりたくない。そして、これは日本だけがこんなことをやってもどうしようもなくて、この業績を評価してもらうためには、やはり

世界に対してインプレッシブなことをやらなければいけない。そのため、EU や米国と協調しながらこういうことをやらないと、またガラパゴスみたいになってしまう。

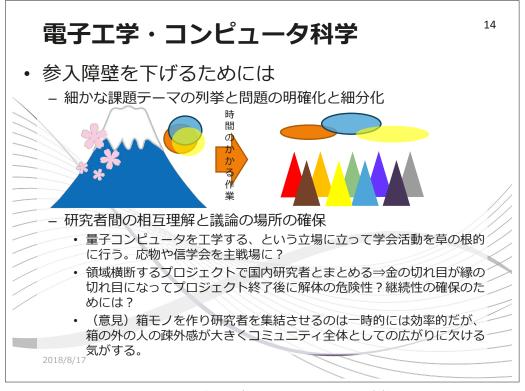


図 2.1.7:電子工学・コンピューター科学

図 2.1.7 に列挙したが、相互理解ができる場が欲しい。物理学会、応用物理学会、電子情報通信学会などにこういう場所があればいいかと思ったりもしたし、何かプロジェクトでまとめてもいいかとも思う。箱ものでまとめてもいいかもしれない。それぞれ一長一短があるだろう。

図の赤、黄色、青、緑は、それぞれ情報、応物、電気、物理というコミュニティをイメージしている。物理・応物・電気の部分はハードウェア担当するので、不可分となる部分が大きいだろう。一方で、レイヤ構造が入ると、情報(赤)だけは、切り離して考えることもできると思われる。量子誤り訂正があればアプリケーションのレイヤは切れてしまっているので、ハードウェアと独立で頑張ってほしい。速くなるアルゴリズムであれば、アプリはアプリとして開発していってもらいたい。多項式加速であってもアルゴリズムをどんどん探して、応用に幅があるほうがおもしろいと思うので、そういう開発をどんどんしていってもらいたい。

近似型のアプリケーションは、実機に乗せるかどうかはまた別にしたほうがいいかなという気はする。もし実機をつくらないのであれば、将来に誤り訂正の上で動くものを開発したほうがいいと思う。ハードウェア側からすると、何かハードウェア屋さんが開発を続けていられる原動力となるようなアプリが見つかるとうれしい。

【**質疑応答**】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:プログラムを書いて、コンパイラと称するものに通すと、何か初期値のマトリックスみたいなものがバンと与えられて、それをデジタル/アナログ変換し、何かクロックを入れてある時間クロックでガチャガチャガチャとやって、最後にアナログ/デジタル変換して出てきたものが、おお、この答えだと、こんな感じで動いているのか?

- Q:実際はある時間しか動いていないと思うが、その間は同期して動いているのか?
- A:同期している。必ず、全部シンクロして動いているので。
- Q: どのぐらいの周波数で動いているのか?
- A:1 つのゲートが 20 ナノ秒なので、20 ナノ秒とか 50 ナノ秒。周波数では 10 メガから 50 メガヘルツぐらい。
- $Q: \exists E VV + x$ 時間は限られていると思うが、 $\exists E VV + x$ 時間が終わったら、その終わったときの状態は保存できないのか?
- A:終わったときの状態はすぐ消えてしまう。
- Q: すぐ消えてしまうのであれば、次のチャンスまでつないでとか、何かそういう仕組みはできるのか? ローカルな量子メモリがあって、次のときまでそこで保存するとか。
- A:エラー訂正を入れていると、ずっと保存されたままにはなるのだが、それがなければ、も う忘れてしまう。
- Q:1回で例えば100マイクロ秒動くとして、次のトライアルは大体どのぐらい後になるか?
- A: 次のトライアルは、100マイクロ秒の計算だったら通常はおおよそ5倍とっているので、 大体500マイクロ秒後である。
- Q:ということは大体 6 分の 1 のデューティー比で動いている?
- A: そうである。5 分の 1 から 6 分の 1 である。観測による初期化方法もあり、その場合には数マイクロ秒で初期化できる。
- Q:ただ、その間は忘れちゃうので、つなぐことは現状では難しいということか?
- A:100マイクロ秒で計算が終わった後にすぐ別の処理を実行したいということか?
- Q: そうである。100 マイクロ秒しか動かなくても、その後動くときはまたゼロの入力からやり直すのか? 今の状態は残ると思ってそのまま続けていけばよいのか?
- A: 初期値としてゼロを入力にするのに 500 マイクロ秒かかっているという意味である。忘れさせると最後はゼロになるという具合にゼロを入力する。忘れさせるには 500 マイクロ秒ぐらいは必要ということである。
- Q:古典計算機とのコンビネーションを考えたときに、古典計算の時間粒度と量子計算の時間 粒度をどううまくマッチングさせるかというのは結構一つのキーだと思う。図 2.1.4 で 「ステップ」という言葉が出ていたのだが、どれぐらいの時間、どれぐらいの量の計算が できるかというのをうまくバランスを考えないといけないと思った。この1ステップとい うのはどういう単位だと思えば良いか?
- A:1ステップというのは、1回のゲート実行という意味で書いた。安定状態に落ちついた後から計算スタートという意味だ。
- Q: その入力をするというところの時間粒度と、ステップというものの時間粒度の差はどれぐらいか?
- A: 入力も1ステップか2ステップぐらいである。
- Q:事前準備、計算、観測という3つの流れは全部同じ時間粒度で進むと思って良いか?
- A: そうである。なるべく早いほうが忘れないという意味では良いが。
- Q:1ステップが 100 マイクロ秒?
- A:1ステップが数十ナノ秒である。したがって、何ステップかの操作の最後まで行って、 100マイクロ秒ぐらいしかもたないというのは、そういうことだ。
- Q:アナログ/デジタル変換器(AD/DA)を常温に置き、冷却状態に置かないのはどうして

- か? 超伝導ゲートを使えば、高精度のAD/DAをつくれると思うが。
- A: AD/DA は作れるが、結構排熱がひどく、例えば 4K のステージに置こうと思うと、冷凍機の冷却能力との戦いになっている。
- C: デルフト工科大学ではそれを 4K でやるということを何年か前から実際にインテルと組んでやっている。難しいが海外でも着手されている。今は違うが、Google もその方向だと思う。
- A: 将来的には多分そうだとは思うが。ただ、超伝導の回路、もちろん消費電力は小さいのだけれども、普通に比べて小さいという意味で、私たちからするとすごく大きい。私たちからすると、すごく発熱しているようなデバイスだ。私たちが許されるのが最大2ワット程までである。
- Q: どのゲートをどう通していくかをいわゆるクロックにあわせて行うのは、外からコンピューター制御をしているのか? もしそうだとすると、ある意味で CPU のデザインをしたときに、組み合わせ回路、論理ゲートは量子で組むけれども、順序回路は古典で組んでいると、そういうふうに思って良いのか?
- A: そうである。
- Q:近似量子計算で質問がある。近似量子計算に特化したハードウェアというのをつくる意味 は全くないと思っているが、そういう方向性でハードウェアを近似量子計算に特化させて いるグループというのはあるのか?
- A:スイスの研究所では使える量子ゲートの形を近似型に特化したものにする検討をしている と聞いている。例えば、CNOTをiSWAPに置きかえる、など。
- **Q**: つまり CNOT の単位で 2 量子ビットゲートをつくるのではなくて、もうちょっとプリミティブな多体ゲートをつくり込むみたいなことか?
- A: そうである。エキサイテーションナンバー(励起量子数)を保存するようなゲートにする と楽になることがあって、ある(励起量子数を保存した)部分空間だけで計算を進めると いう方向性がある。そうすると、CNOTよりもiSWAPのほうが自然に動くというので、 新規ゲート手法の開発等がなされている。
- Q:一方、ハードウェアとしては、例えば量子ビットの配置や相互作用の方式は基本的には共有している技術か?
- A: 共有しているが、かなり違うのは違う。
- Q:基本的に誤り訂正するような量子ビット配列で、通常ならばもうちょっと大規模化してエラーを落として誤り訂正をしたいのだけれども、とりあえず同じハードウェアと同じコントロールスキームを使って何か応用する方法がないか、というのが近似型の現状ではないか。しわ寄せはアプリケーション側に来ていて、そのせいでスペックとして妥協せざるを得ないというところを、理論屋の知恵などでカバーしているという感じだろう。逆に、アプリ側からハードウェア側にという方向性は本当にあり得るのか?
- A: IBM では、次の50量子ビットチップでは結合の手の数が増えている。そういうふうに、 配位数を増やすことでという方向性はある。まだ動いていないと思う。
- Q: あれは例えば表面符号を組んだりするための配線ではなくて。近似量子計算のために特化 している?
- A:特化とまでは言わないが、何であんなことをやっているんだろうなと、私から見ると思う。誤り訂正を載せるのであれば、そんなことしないと思う。
- Q: E

- A: オーバースペックというか、少し方式が違う。誤り訂正を載せることを考える視点から は、なぜそんなことをするのか、という気持ち。
- Q:ハードウェアへの要求としては、どっちが簡単とかいうわけでもないのか?
- A: そうでもない。
- Q: 例えば誤り訂正するときは、時々刻々と測定して、シグナルを吸い取らないといけないが、近似量子計算の場合は、基本的に吸い取ったりとかフィードバックしたりとかいう必要は無いと思うが。
- A: そうである。アナログエラーを抑えろと言わなければ簡単。
- Q:問題はアナログエラーだが、結局、誤り訂正するときも、アナログエラーはある程度、閾値までは落とさないといけない。閾値は1%だが、直上では動かないので、それの10分の1くらいでないといけないと思うのだが、どっちにしろ、かなりアナログエラーを抑えないといけないと思うが?
- A: もちろん。そうである。
- Q: そういう意味で、やはり近似量子計算に特化したハードウェアはやっぱり筋が悪いと思う のだが?
- A:悪いと思う(近似型量子計算自体に乗り気ではない)。
- Q:一方で、誤り訂正を目指したハードウェアをアプリケーション側でしわを吸収して使うという方向性は重要かなと思う。
- A: そうだろう。コネクティビティなどに制約が来るが、もちろん格子で動くのであれば格子で動かしたほうがいいと思う。
- Q: ただ一方で、例えば量子多体系など並進対称性があってローカルな相互作用で動いているような系はもともとスパースでも良いので…
- A: ええ、それは助かる。
- Q: やはり誤差を許したのを最初からつくるのはばかげている。普通につくったって誤差は出る。その中でそれに耐えられるアプリケーションを探すしかないと思う。だから、量子計算機にちょっとほんのちょっとでも色がついていれば役に立つというぐらいの気持ちでアプリケーションを探さなければ、当面はそんなに使えないと思う。
- A: そうかもしれない。当面、この 10 年、20 年はそうだと思う。
- C: 実際、例えば、何とかビット、1 ナノ秒おきにランダムナンバーを出してくれたら、とても喜ぶと思う。
- A: 乱数発生機なら多分使えると思う。
- Q: さらに、ハードウェアから上がってゆくか、アプリから降りてくるかの2つの違いを正しく理解したいのだが、アプリケーションドメインというのをちゃんと決めてあげると、程度問題のように思っている。どっちがいい悪いとかじゃなくて、とあるアプリケーションを見たときに、本当に必要な精度がこれぐらい欲しくて、それを耐え得るようなどれだけの仕組みを量子コンピューターで賄えるかというような話だと思うのだが。
- A: そう思う。
- Q: 多分、分野の人から見るとこういうふうになって、物理で実際に物をつくって大変だと一番下から考えて、しわ寄せ地獄になるし、アプリケーション側で何かこう優位性を発揮しると言われているのに、これしかできない、あれしかできないという声が上がってくると、あ、結局何にもできないと。だから、結局、船頭は真ん中ということではないか?
- A: ええ、船頭は真ん中かもしれない。

C:結構実は、多くの人は知らないで、すごく誤りの多いシステムを日常的に使っている。別 に誤りというのはそんなに怖いことではない。ただ、それにあわせたアプリケーションで 対応している。

2.2 量子ソフトウェア領域一現状と展望一

根本 香絵(国立情報学研究所)

量子ソフトウェア領域の現状と展望について説明する前に、現在開発されている量子コンピューターの技術体系の違いについて述べておく。例えば、日立のアニーリングマシン (CMOS アニーラー) は、既存の CMOS 技術をもとにしていて、私たちが使っている古典コンピューターの方にずっと近い。一方、D-Wave の量子アニーリングマシンは、量子的な計算には至っていないと考えられているが、ハードウェア的な原理は量子コンピューターの方に近く、将来的には量子的な動作が期待されている。CMOS アニーラー、量子アニーリングマシン、近似的量子コンピューター、汎用量子コンピューター(誤り耐性量子コンピューター)の技術体系の違いをきちんと理解しておかなければならない(図 2.2.1)。

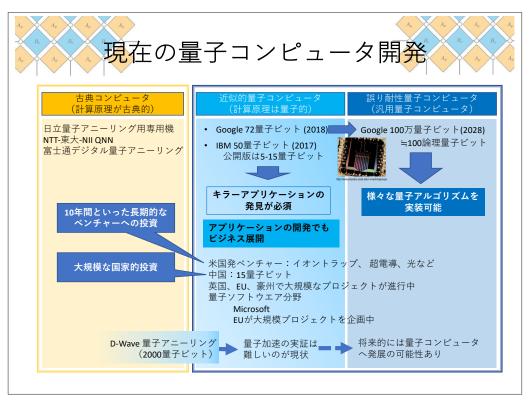


図 2.2.1: 量子コンピューター開発の背景

50 量子ビットプロセッサのプロトタイプを開発している IBM は、現在、20 量子ビットを使った IBM Q システムを公開して、商用利用させるビジネスを展開している。IBM においては、キラーアプリケーションをユーザーに提示するのではなく、IBM Q を使う人がアプリケーションの開発をするというビジネスモデルになっていると考えるのが妥当であろう。近似的量子コンピューター(誤り訂正符号が実装されていない(できない)、又は誤り耐性のない量子コンピューター)で、何ができるのかを示していくということは非常に大きな課題であると思う。

ハードウェアに関して、注目すべきことがある。米国では、超伝導量子ビットの他にイオン・トラップや光のベンチャーがたくさん動き出している。その中には、驚くべきことに、10年間は何も成果が出てこなくてもいいという、(通常のベンチャーとは思えないような)長期的な投資を受けたベンチャーが出てきている。また、英国、中国、EUなどでは大規模な国家的研究投

資が行われており、ここでもハードウエアに関して技術を絞り込むということはまだ行っていない。

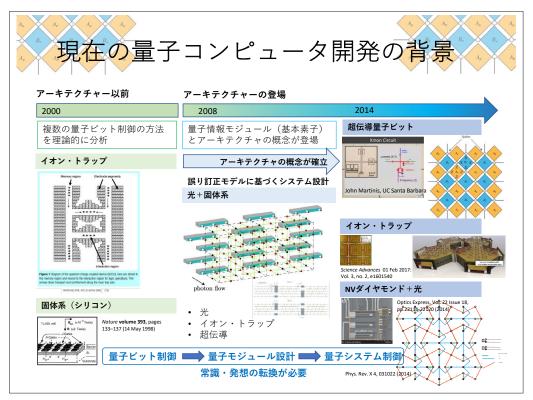


図 2.2.2: 現在の量子コンピューター開発

先ほど、汎用量子コンピューターは絶対にできないという話があったが、できるという科学的な十分な証拠があると私は思っており、その開発を目指している。先ほど言われたように、地球上に日本という国しかなかったら、私も量子コンピューターは永遠にできないと思う。技術イノベーションの実現には「魔の川」、「死の谷」、「ダーウィンの海」と表現される(乗り越えなければならない)障壁が立ちはだかっていると言われているが、日本には「迷いの山」というのがあると私は思っている。科研費などがターゲットとしている研究者が、自身の主体的な興味または発想による研究、いわゆる研究者の発想による基礎研究の重要性というのは日本では比較的広く理解されているのだが、その分野の研究が進み、挑戦が具体的に見えてきだすと、なぜか一斉に手を引く傾向にある。「本当にあの山(量子コンピューター)を登る(作る)つもり?」と、日本に固有な迷いの山に入ってしまう。みんなでやらなければ失敗はない。

私が量子情報に関する基礎研究をやりはじめた頃には、1 量子ビットを守るのに 10^6 (100 万) 個の量子ビットが要るかもしれないと言われており、その論理量子ビットが 100 個ぐらいないと量子計算にならないという(ミッション・インポッシブル的な)難題があった。1 量子ビットもないような、1 量子ビットがやっとできたかというような状況で、誤り耐性量子コンピューター(汎用量子コンピューター)を組み立てるにはと自問すると、理論上のことであっても発狂しそうな課題だと思ったぐらいである。

2008年になって、アーキテクチャに関する先駆的な論文が連続的にいくつか出され、アーキテクチャとして組める時代が到来し、その後アーキテクチャの概念が確立していくことになる。 日本はアーキテクチャでも先導的な役割を果たし、実装へ向けた準備では先進的であったが、残念ながらそういった科学的な進展とは逆に、誤り耐性量子コンピューターは絶対にできないとい う雰囲気になってしまった。世界的には、アーキテクチャの概念に関する境界領域で1本論文 出すにも何年もかかるような、非常に困難な時期もあったが、それを過ぎると、やはり誤り耐性 量子コンピューターはできるという機運が出てきて、超伝導量子ビットに関する(例えばIBM や Google の)研究につながっていると思う。

2014年6月にCLEO (Conference on Lasers and Electro-Optics) で John Martinis が「5 超伝導量子ビットで構成される量子チップにおいて、量子誤り訂正により信頼性目標の 99.9% を達成した」ことを発表したときに、その直後に私の発表があって、そのとき実験家と理論家の両方から、量子コンピューターのつくり方がわかった! という発表が初めてそこで揃った。要するに、量子物理的な障害はもう存在せず、工学的な課題として枠組みを与えることができるということの合意がとれたのである。そこから Google の展開が、John Martinis のチームで始まっているわけだが、つまり、理論、CS 的指針の重要性がここからもわかることと、超伝導量子ビットだけでなくて、イオン・トラップや、NII でやっている NV ダイヤモンド+光を使ったアーキテクチャ等もあることの 2 点が押さえておくべき要点である。

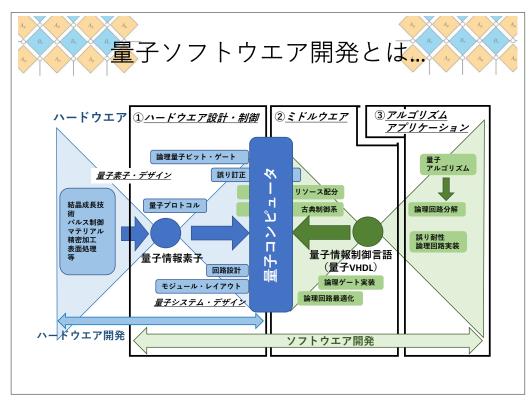


図 2.2.3: 量子ソフトウェア開発とは

ソフトウェアという言葉に対して、コンピューター科学の人と物理の人とでは、受け取るイメージが全く違っている。物理の人にとって、ソフトウェアは一般の人と同じイメージで、物ではないものは全部、設計や理論も含めてソフトウェアであると思っている。一方、コンピューター科学の人にとっては、ソフトウェアはプログラミングに関することであり、量子コンピューターのソフトウェア開発には、どこにもプログラミング的な要素はないと彼らは言うだろう。ただうまい言い方がなく妥協案として、私は、通常のソフトウェア開発という言葉は使わず、枕詞として量子を付けて、量子ソフトウェア開発という言葉を使っている(図 2.2.3)。汎用量子コンピューターでは、ミドルウェアの位置が古典コンピューターと異なっているので、コンピューター科学の人にとって奇異なものに感じてしまい、オペレーティングシステム(OS)はどこに

行ってしまったのか!? などと言われる。OSは、誤り訂正のために、このアーキテクチャに組み込まれた形になっているのが、違和感の要因である。

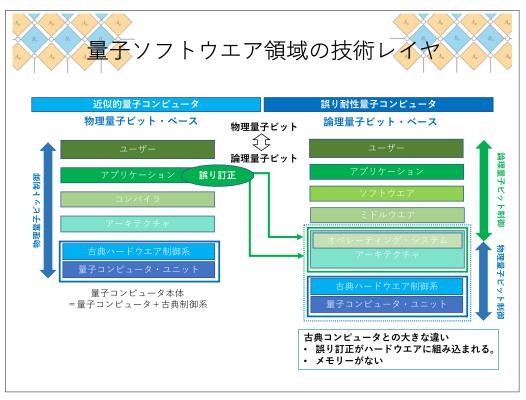


図 2.2.4:量子ソフトウェア領域の技術レイヤ

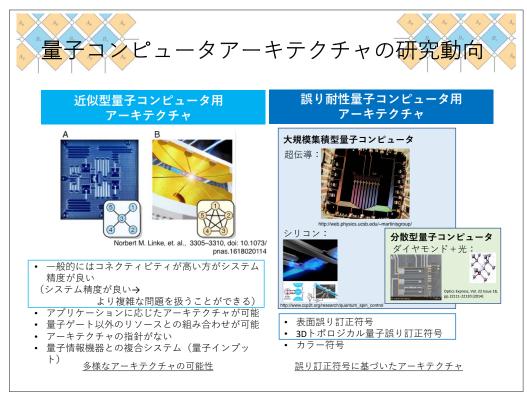


図 2.2.5: 量子コンピューターアーキテクチャの研究動向

近似的量子コンピューターでは誤り訂正はアプリケーションで動くが、汎用量子コンピューターでは(今のところ)誤り訂正はハードウェアで動く(図 2.2.4)。つまり、汎用量子コンピューターでは、ハードウェア設計の中に誤り訂正理論を組み込んでいる。だから、他の動き方をさせてくださいと言われても、汎用量子コンピューターでは他の動き方をさせるのが難しい。例えば、表面符号ではない新しいカラー符号を入れてくださいと言われても、急にそれはできない。それをできるように設計するというのもできるはずだが、それをやろうとすると、非常に大きな実装上の負担がかかってしまう。そうなるとなかなか実現化が難しくなる(例えば、誤りレートが閾値以下に納まらなくなるなど)ので、今のデザインでは、誤り訂正は、物理層に入っている。量子ビット制御には、物理量子ビットの制御と論理量子ビットの制御という2つの大きなくくりがあるが、物理量子ビット制御分野には参入が簡単である。実際、海外では非常に大きく進んでいて、ベンチャーなどもたくさん立ち上がっている(図 2.2.5)。一方、論理量子ビット制御に至るには、まだまだ課題がたくさんある。

先ほど、量子コンピューターは、古典コンピューターと違ってメモリがないという話が出たが、メモリがないというのはどういうことかというと、量子コンピューター自身がメモリだということである。言わば、量子コンピューターは、メモリの上に演算がくっついているようなものであり、計算終了後に誤り訂正だけをかけ続ければ、原理上、解として得られた量子状態が保存される。ただし、今の計算のモデル、アルゴリズムのモデルでは、計算が終わると、その量子状態というのは保存しておく必要がないような計算の仕方をしており、アウトプットはもう既に古典情報と等価になっているので、それを読み出しさえすればいいという考えである。読み出す方がずっと効率的だから、それをとっておくということを考えないのである。

ただし、量子インターネットになったときには、途中までした計算結果を他で使いたい場合、その量子状態をとっておく必要が出てくるが、それを読み出すことはできない。その場合には、誤り訂正を走らせ続けるしかない。なぜなら、そのまま何もせず放っておくと、デコヒーレンスしてしまうので、意味のないものになってしまうからだ。それをどうするかというと、例えば、もっと長いコヒーレンス時間を持っている核スピンに移せば、コヒーレンス時間を長くすることができる。今は、それほどコヒーレンス時間は実は意外と長いものもでてきており、ものによっては秒単位以上のものもある。

実際、誤り訂正のある量子コンピューターの中では、データ空間は比較的小さく、Tゲートと呼ばれるゲート演算に90%程度の物理的リソースを割いている。データの中で、しばらく演算をかけないでも良いというところだけメモリに入れるという考えもあろうが、誤り訂正のサイズを変化させながらメモリへ移すことにどのくらいメリットがあるのかは疑問であり、またアーキテクチャも複雑になるので、メモリの効率的な導入方法はよくわかっていない。そういった技術レイヤの根本的な違いがあるということをご理解いただきたい。

Google の量子ビットの写真を見るとわかると思うが、量子コンピューターの本体は、ほとんどが古典制御系であり、量子状態が載っている部分は小さい。量子コンピューターを制御しているのは古典コンピューターであって、量子コンピューターではないので、量子コンピューターの開発というのは実は古典コンピューター系の開発であると言える。なお、先ほど、コネクティビティが低いのがダメなので高いのにしているのという話があったが、なぜ高くしたいかというと、ゲートがかけられないところにゲートをかけようとすると、2回かけなきゃいけなかったり、もっと多く複数の回数かけねばならなかったりするからである。

そうすることによって、ゲートをかければかけるほど、計算ステップが増えてしまう。特に近似型の量子コンピューターでは、大きさが決まっているだけでなく、時間とともに誤りは蓄積す

るために扱うことのできる計算ステップ数は限られている。この扱うことのできる計算ステップで計算量が決まってしまう。その計算量では、今のところ、計算量的には量子性を生かして、古典コンピューターが解けないようなものを解くことができるかというと、それはまだできない。なぜかと言うと、単純に計算ステップ数が圧倒的に短いからである。30量子ビット、50量子ビットでも、計算ステップ数が長ければ何とかなるかもしれないが、今のところ、計算ステップ数が短すぎる。その計算ステップ数をいかに長くするかという工夫はIBM などさまざまにやられてはいる。ただし、誤り耐性を持たせない以上、限界はある。

ただ、次のような考え方もある。コンピューターというのはスーパーコンピューターだけがあるわけじゃなくて、いろいろな形のコンピューターがある。それは何も私たちが思うような「計算」をしているわけではない。世の中には、非常に分からなくて面白い(例えば、高温超伝導も含めて)ノイズの多いところで起こっている現象がたくさんある。だから、そういうことを考えると、何もハミルトニアンだけをシミュレートするのがシミュレーションではなくて、他にいろいろ、ここに他の物理的リソースをつけてやることで、様々な面白いことができる可能性はたくさんあると思う。それはまだまだ、全然やられていなくて、そういう可能性をこれから開拓すれば、近似型量子コンピューターでもできる楽しいこと(つまり世の中の役に立つこと)ができ、新しい知見が得られると思う。それを、また新しいアプリケーションとして生命科学や医療などに持ち込むこともできるようになってくると考える。



重要トピック



量子コンピュータ (共通)

- アーキテクチャに基づく量子コンピュータ開発
 - (現状)誤り耐性量子コンピュータでは大幅に出遅れ
 - 近似型量子コンピュータでは、これから大きく発展すると期待できる
- 古典制御技術との融合

近似的量子コンピュータ

- アプリケーションの開発 アプリケーションとは… どういう問題・課題に量子情報処理が優位性を発揮するのかを具体的に示すもの
- アプリケーションのアーキテクチャへの 融合
- 量子コンピュータと他の量子情報技術 (量子センサー・量子通信等) との融合
- 量子コンピュータ・リソースの拡張
- 誤り制御方法(誤り訂正・回避・低減)の解明

誤り耐性量子コンピュータ

- ミドルウエアの開発
 - 論理ビット処理上の情報科学的諸問題
 - 量子回路の最適化(モデリング・高速プログラミング等)
 - 量子回路の検証
 - 誤り訂正に伴う大量の古典データ処理(高速 処理技術(解法・古典制御系の設計等))
 - 量子情報制御言語の設定と制御信号設計
 - 量子コンピュータ・リソース配分制御信号へのコンパイラ
- 量子アルゴリズムの開発
- 量子言語とコンパイラの開発
- 量子誤り訂正理論の発展

図 2.2.6: 重要トピック

図 2.2.6 に示すように、重要トピックとして、近似的量子コンピューターと汎用量子コンピューターには、もちろん共通部分はある。アーキテクチャに基づく量子コンピューター開発が重要で、アーキテクチャがなくてはコンピューターはできない。それから古典制御技術との融合も重要で、これがなくても絶対に量子コンピューターはできない。近似的量子コンピューターでは、特に大切なのはアプリケーションの開発であり、コンピューター科学側からすると、AI や

機械学習と組むというのは結構自然な流れであると思うし、多くの可能性のひとつである。アプリケーションのアーキテクチャへの融合、量子コンピューターと他の量子情報技術(量子センサー・量子通信等)との融合、量子コンピューター・リソースの拡張、誤り制御方法(誤り訂正・回避・低減)の解明等の重要なトピックがある。また、汎用量子コンピューターでは、ミドルウェアの開発(論理ビット処理上の情報科学的諸問題や量子情報制御言語の設定と制御信号設計)、量子アルゴリズムの開発、量子言語とコンパイラの開発、および量子誤り訂正理論の発展等の重要なトピックがある。



ボトルネック・課題



- 近似型量子コンピュータと誤り耐性量子コンピュータとは似て非なるもの
 - 6桁以上にわたるサイズの違い

(大規模)目的を明確にした学域を超えた融合的研究推進発展が必須 (小規模)量子情報分野で理論と実験の融合による研究推進が必須 (共通)量子情報システムの制御に企業の参画が必須(高度なエレクトロニクス)

• 誤り訂正の有効な導入方法の欠如

量子情報の理論的発展が必須 量子通信・量子メモリー等の研究により加速化が期待できる

• 近似型量子コンピュータ用アプリケーションの理論的指針の欠如

挑戦的な課題へのチャレンジを許す政策が必要 アプリケーションからみた学域を超えた交流も有効

- 量子情報処理における量子的性質が十分に生かされていない
 - 量子情報処理では、処理と通信とを自然に融合できる
 - → 分散型量子コンピュータの有用性

超伝導量子コンピュータが最終解であると考えるのは未だ早いすぎることに留意 将来的に、光とのインターフェースは必須

• 誤り耐性量子コンピュータに伴う大規模なデータ処理技術

長期的な課題であるが、海外ではすでに研究成果が蓄積していることに留意

図 2.2.7: ボトルネック・課題

図 2.2.7 に示すように、ボトルネックと課題としては、近似的量子コンピューターと汎用量子コンピューターでは 6 桁にわたるサイズの違いがあり、似て非なるものである。共通部分としては、量子情報システムの制御に企業の参画(高度なエレクトロニクス)が必須である。大規模なものでは目的を明確にした学域を超えた融合的研究推進発展が必須であり、小規模なものでは量子情報分野で理論と実験の融合による研究推進が必須である。小規模のものが大規模の発展を邪魔するというわけではなく、逆にそれはもちろん促進する形でやることが大事である。やはり、両者の違いをきちんと心得て、お互いに生かせるところを生かしていくということが必要である。また、誤り訂正の有効な導入方法が欠如しており、難しいが重要な課題である。量子情報の理論的発展も必須であるし、量子通信・量子メモリ等の研究による加速が期待できる。一方で、近似型量子コンピューター用アプリケーションの理論的指針も未だない。それを解決するには挑戦的な課題へのチャレンジを許す政策が必要であり、アプリケーションからみた学術を超えた交流も有効であると私は考えている。

分散型量子コンピューターは、いまひとつ日本ではあまりやられていない。世界でも超伝導ほどの熱気はないが、日本では超伝導にフォーカスしすぎているのが、気がかりである。超伝導量子コンピューターが最終解であると考えるのは未だ早すぎることに留意すべきである。将来的

に、ICT技術を生み出していくのだとすると、光とのインターフェースは必須なので、分散型量子コンピューターに関して、日本にはソフトウェア・ハードウェアとも技術がかなりあるので、狙い目であると思う。また、誤り耐性量子コンピューターに伴う大規模なデータ処理技術は確かに長期的な課題であるが、海外ではすでに研究成果が蓄積されており、誤り耐性量子コンピューターでは日本はかなり大幅に遅れていることを覚悟しておかなければならない。

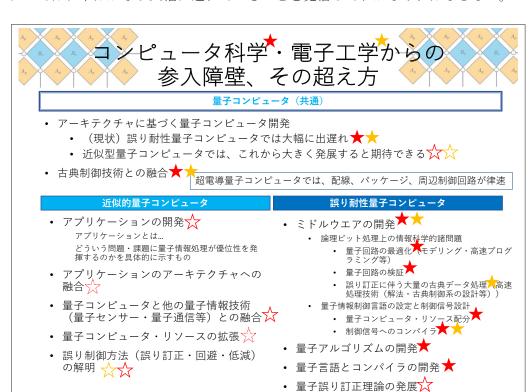


図 2.2.8: コンピューター科学や電子工学からの参入障壁とその超え方

コンピューター科学や電子工学からの参入障壁とその超え方を図 2.2.8 に示す。ここで、中塗りの★印では、そのまま分野の知識を持ってここに入ってくれさえすれば、取り組める課題が見つかるような分野である。だから、そこには、もう障壁はない。しかし、中抜きの☆印には、やはり難しいところがあり、結構数はある。参入する際の問題は、一つには意識の問題である。要するに、1個1個を何とかやっとのところでできるという時に、100万個もできるわけがない。だから1個1個の話をしている時に100万個の話はなかなかできない。つまり、意識の問題だ。それから、制度の問題もある。参入が少ないというけれども、それはやはり制度に問題があるのではないかと思われる節も多くある。

ソフトウェア開発は実際に進んでいる。海外には、巨額な投資が可能な企業(Google、IBM、Intel、Microsoft等)がある。海外主導で発展が進む中、その中で日本がどうやって主導権を発揮できる分野を生み出していくのかということを真面目に考えないといけない。そのためには、日本は、大学とか国研とか産学連携といったリソースを使っていく以外に手はない。日本にはGoogle、IBM、Intel、Microsoft等のような企業はないので、富士通、日立、NEC等の企業や、ベンチャーも取り込みながら、日本のしっかりした体制というものが必要なのではないかと思う。

一つここで言っておきたいのは、我々がやっている研究はまだ基礎研究の範疇であるということ。ところが、どうも日本の政府や企業の基礎研究のイメージは時代遅れで、基礎研究というの

は言いづらくなってきている。同じ理由で、日本ではアカデミアも含めて、10年間といった長期的なベンチャーへの投資が可能な米国の現状を理解できていないのではないか、とも思われる。基礎研究というのは何も貴族的な学術研究だけではなく、我々は将来に向けて生きるための長期的な基礎研究に挑戦しているのだと思ってもらいたい。

最後に、制度上の課題を述べる。科研費では、分野移行期(物理学→工学、物理学→情報科学)の研究支援が構造的に手薄であり、予算申請を行う項目がない。また、量子通信や量子メモリの研究は、量子情報、量子物理に深い造詣が必要であるが、工学的な要素も強い。しかも、既存分野の方が高い評価が得られるため、新しい分野へ挑戦するモチベーションがない。分野融合というのは、ある程度、目標がないと起こらない。研究者の主体的興味による自由な発想に基づく融合は稀である。科学・技術の進歩による必然性のある融合研究を目指して頑張ろうという気持ちになるには、やはり目的を明確にした学域を超えた融合的研究推進を支えるしっかりした制度が重要である。

また、日本の量子コンピューター関連の研究市場には魅力がなく、海外から研究者を呼んでこようとすると厳しく、海外との連携も本当に大変である。この点に関して、全く国からの支援がないというか、むしろ逆風が吹いていると感じている。だから、省庁の人には、何とか支援を考えていただきたいと願っている。そうじゃないと、日本だけで量子人材を確保していくのはもう無理である。優秀な研究、リーダーは誰でも(日本男子でなくても)歓迎すべきある。外国人であろうが女性であろうが、そして、他分野の人であろうが、優秀な人は誰であろうとも歓迎する素地が必要である。そうしなければ、とてもとても、量子人材はいつまでたっても不足することになる。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

- Q:確認だが、メモリと OS という言葉が出てきたが、先ほど述べていた計算過程でのメモリというのは、いわゆるレジスタのことか? OS は普通、メインメモリに格納するけれども、実際に量子 OS をつくっている方々は、そこの OS を格納する部分というのは古典系でできているのか?
- A: 私が考えるには、量子 OS というつくりはないように思う。それはなぜかと言うと、誤り 訂正が OS 言語を決めてしまっているからである。つまり、ある意味古典コンピューター 的なシミュレーターになっている。だから、もう言語が用意されているように見えるとい うことであると思う。
- C: OS というのはサービスを提供するから必要である。したがって、今はまだ計算するだけでサービスは提供していないので、OS はどこか別のところにあるのではないか?
- C:要するに、そこが見えてこなければ、ビジネスにはならないということではないか?
- C: いや、そんなことはない。なぜならば、GPU アクセラレーターがビジネスになっている 世界だからだ。ビジネスになるかどうかと OS の話とは全然違うと思う。
- C:量子コンピューターというものは、まだまだ専用マシンだということか?
- C: 我々の研究所では、アクセラレーターと認識している。
- Q: 誤り訂正がハードウェアに組み込まれているということは、それをソフトウェアで上のレイヤに上げていくということは不可能か?
- A:原理的には可能であるが、それをやろうとすると、先ほど言っていた図 2.2.4 でいうと、ほぼ逆戻りする。つまり、量子メモリに特化したものでは、誤り訂正をアプリ化することは可能と思うが、量子コンピューターで今のところ誤り訂正符号の導入をアプリ化するの

は難しい。それは非常に困難で、解が見えないことである。

- Q: 先ほどのスタック構造の絵では、(右側にあるような) いわゆる古典的コンピューターで イメージしているようなハードウェアとソフトウェアのスタック構造を、量子コンピュー ター分野でコンピューターの概念で階層化を綺麗にするというのは、現状では難しいと 思っていてよろしいか?
- A: いや、そんなことはない。これは量子コンピューターの技術を階層化したものを示している。
- C: 私のイメージだと、上下で出入りしているような気がしてしようがない…。
- C: それは、ある階層までは普通である。なぜならば、古典で動くから。問題はそこから下である。今、我々がコンピューターで普通に扱う階層の分類の中では、全部ハードウェアというところに入る階層で基本的にやっている。それ以上分けるのは、量子系の研究者がどう考えるかということだと思う。我々古典系の研究者から見たら、そこはもうアクセラレーターの先のハードウェアという分野なので…。
- A:アーキテクチャと書かれた中で論理ビットから物理ビットに変換される。物理ビットをどう制御するかというのは、電子工学分野と非常に大きく絡んでおり、設計には、物理学と電子工学とコンピューター科学が絡んでくる。ただ、その先は、どのような誤り訂正符号を使っているかということに関係があり、その下のハードウエアはほとんど関係がない。
- Q:少し議論の整理をしたい。量子コンピューターという文言には「コンピューター」がついているので、議論が少し分からなくなっている。古典コンピューターをそっくりそのまま置きかえたコンピューター(つまり、新しい量子コンピューターという単体のもの)が立ち上がってくるのか? それとも、アクセラレーターのような、今の古典コンピューターの補助的な役割で量子コンピューターというのが立ち上がってくるのか? これに関して、私はどのような方向に進むか分からない…。それはどうなのかというところを教えていただきたい。
- A: それは、技術の話ではなくマーケティングの話だから、技術的には、どちらとも考え得る。
- Q:時間軸が違う話ではないのか?
- A: もし Google が発表の通り 100 万量子ビットのコンピューターをつくってくるとすると、 2028 年にもうこれはできてしまう。2028 年と言えば、あと 10 年しかないが、それで時 間軸が違うということはないと思う。
- C: 今のご回答はうれしい。しかしながら、おそらく今のタイミングでは、どちらの方向に進むか分からない状態にあり、皆さん、多分、頭の中で違うものをイメージされてしまって、議論が難しいと思う。どちらもありえるので、量子コンピューターは今の古典コンピューターと置き替わると言ってしまって議論する人も出てくると思う…。
- A:量子コンピューターは、物理の側から言うと全部同じ技術体系である。しかしながら、マーケティング的には量子コンピューターというのは非常に特殊な装置である。例えば、スーパーコンピューターは一般の人には、(実際には、関係はあるのだが、自分で買ったりしないので)関係ない…。そういう意味で、すごく大きくて特殊なものである。先ほどアクセラレーターという話があったが、今ある既存の体系に入れて使うようにできるのかと言えば、それはできると思う。しかしながら、そういうものはやはり、マーケティング的にそれがいいということがあって初めて、アクセラレーターとしての使い方が話題になるわけである。だから、そこはまだ見えておらず、いろいろな流れがあると思う。ただ、

- 今日の発表では、技術として違うというところを綺麗に整理することが目的なので、こういう書き方になっている。
- C: いずれにせよ、私は古典と量子の違いを気にする。それは、そういう世界で私が生きているからであり、そこから上の理論の人にとって見れば、どっちにしても、それは計算可能性から考えたら同じことなので、全く差がないと考える。だから、問題は、それをどのような技術で実現するかということであり、どういうソフトウェアで、どれくらいの費用で実現するかというところがやり方によって違うというだけの問題だと私は思っている。
- C: それは本質的に違うということではないか? 理論的に同じ、チューリングマシンと言った瞬間にみんな同じになってしまうのではないか?
- C: そうだろう。アルゴリズム理論というのは、マシンのモデル上でどう築くかという話であり、別に量子アルゴリズムと古典アルゴリズムが違っているわけではない。ただ、マシンの仮定モデルが違うだけである。
- C: 一つ関係していることは、プログラミングモデルをどう提示するかだと思う。いわゆる、 汎用的なプログラミングモデルを前提として量子をどう使うかという話と、もうそこから 大きく変えてしまってもいいので、量子用のプログラミングモデルを定義して、プログラ ミング言語をつくり量子だけで使う、という2つの話がある。後者だと、量子だけで完結 する世界になるので、先ほど言われたマーケティングも一緒であり、ソフトウェア資産を どう使うか、どちらがいいかという話になってくると思う。
- A: どちらがいいかというよりは、要するに量子優位性を発揮させたいということ。だからこ そ、量子コンピューターを使いたいわけである。だから、その言語体系をどういう風につ くれば、プログラミングする人が量子優位性を一番発揮しやすいかということを考える必 要がある。

2.3 量子コンピューター研究へのアーキテクチャ屋の期待

平木 敬(東京大学)

まず自己紹介から始めると、私自身は古典コンピューター作りが本職で、アーキテクチャ屋である。現在は、FPGAを使ったリアルタイムのAIシステムを開発している。量子との関係では、指導教員は、後藤磁束量子プロジェクト代表の後藤英一先生であった。量子コンピューターの専門家ではなく、私もその後は古典コンピューターに夢中になっていた。したがって本日の会議の量子計算機のプロの先生方とはだいぶ位置づけが異なるが、思うところを申し上げたい。

理想的な量子コンピューターが実現すると本当に素晴らしいと思う。1000量子ビット以上といった多数のコヒーレントな量子ビットが、1時間、1日と上限の無い動作時間で、エラーレートが 10^{-16} 以下で動く。ペタバイトレベルを超える大容量の主記憶があり、入出力能力も TB/s を超える高バンド幅の転送能力を実装する。こういう量子コンピューターが本当に実現したら、涙が出るほど嬉しく、いずれ実現してほしいと思っている。

ただ、正直なところそれらが実現することは無いとも思っていて、どこまで理想に近づけられるかに興味を持っている。例えば、数字の厳密なところはいい加減なのでお許し頂きたいが、ここ 10年で 10量子ビットが 50量子ビットぐらいにまで向上してきた。コヒーレント時間はまだまだ短く、エラーレートは低くなったというものの、誤り訂正符号なしには使えないのでまだまだ高いという理解である。今はまだ、主記憶や入出力などを考えるべき段階ですらないのが現状だと思っている。

量子ビット数がある程度確保できなければ、そもそも量子超越性を示すのが困難である。物理屋さんの感覚が良くわからないが、2020年までに50から100量子ビットぐらいまでには向上して、さらにミリ秒レベルのコヒーレント時間が実現してほしい。量子ムーア則が成立するならば、2030年に250~300量子ビット程度か。先ほど申し上げた理想値である1000量子ビットが実現するのは最も楽観的な予測に基づいても2040年以降である。したがって、我々のようなアーキテクチャ屋の出番が来るのは2050年頃であろう。そこに至るまでにも、もちろん開発に協力し論文を書いていきたいが、当面は一流のアーキテクトを突っ込むべき状況ではないと考えている。ただ、これまでに超伝導ゲート、光コンピューター、DNAコンピューター等で苦い経験をしてきたものの、それらと比べると量子は苦くない方だとは思う。

量子アルゴリズム研究がきわめて重要であると考えている。現在、Shorのアルゴリズム、Groverのアルゴリズムが有名である。量子ビット数が少ないと実用的価値は無いが、いずれ量子ビット数が向上した将来に備えるという意味で重要である。とにかく計算が複雑であり、面白い研究対象である。

未来永劫使われることの無いような計算モデルに取り組んで、「従来より 100 万倍高速化」と言っても何の意味もない。私の経験上、難易度の高いアルゴリズムを開発すると、普通のアルゴリズムにフィードバックして高速化が可能となる。したがって、従来とは異なる計算機上でのアルゴリズム開発は意義深い。量子のアルゴリズム研究を進めることで、結果的に古典計算機の高速化を実現させたいと考えている。

コンピューターサイエンスとして見た、ゲート型量子コンピューターの研究課題を図 2.3.1 にまとめる。ゲート型量子コンピューターのアーキテクチャについて、数年前は一生懸命さまざまな学会で盛り上げようと活動し、投稿も多かったが、いまでは MICRO 以外はほぼゼロの状況にある。OS について、先ほど申し上げた通り量子コンピューターはアクセラレータなので不要

CS屋から見たゲート型量子コンピュータ

- アーキテクチャ
 - ・ 数年前は投稿も多かった、今はMICRO以外ほぼゼロ
 - MICROはブームに少し遅れる
 - ・量子コンピュータの周辺回路を論じた良い論文(FPGAベース) ⇒ FPGA応用分野
- OS
 - 量子コンピュータはアクセラレータなのでほぼ不要
- 言語
 - 量子コンピュータ用DSLは20年先には必要かも
 - 今初めても良い。
- アルゴリズム
 - 現在、最重要分野。頑張れ!
- グラフィックス、自然言語処理、AI、ロボティックス、HPC
 - ⇒ 今のところ出番はこない

図 2.3.1: CS とゲート型量子コンピューター

である。言語について、量子コンピューター用 DSL(Domain Specific Language)が 20 年後には必要になってくるかもしれない。したがって、DSL で論文を書きたい人が量子を扱っても良いと思うものの、言語で最も重要なことはサービスである。どんな言語でもチューリング完全なプログラムを書けるようになっているので、書きやすいか書きにくいかであり、量子が書きやすいプログラミング言語というのはあると思う。量子計算機屋が求めているものを、例えば従来言語の VHDL ならば 1000 行必要なところが、簡単に 10 行で書けるようになると素晴らしい。こういったことに関心のある研究者が取り組めばよいと思う。アルゴリズムについては、先ほど申し上げた通りである。他にもグラフィックス、自然言語処理、AI、ロボティクス、HPC などがあるが、今のところ出番はこないと思う。

アニーラーについても CS の観点で見てみる(図 2.3.2)。D-Wave が登場し、量子ニューラルネット、富士通や日立のデジタルアニーラーや CMOS アニーラーなどが続々と出てきた。アニーリングは近似アルゴリズムの1つであり、厳密解が解けるようなことをメーカーが言っているが、実際にはヒューリスティックの1つである。残念ながら、まだ量子性を利用して高速化したという報告は無い。最近出てきた論文を読むと、残念ながら量子による高速性は観測されていないとはっきり書いてある。イジングモデルを使ったマシンは基本的に多くの問題が解けるものの、古典コンピューターよりも高速となることは稀である。巡回セールスマン問題(TSP)でも残念ながら遅い。現在の共通認識は、CMOS の普通のコンピューターが最も速く、次がCMOS のアニーラーで、それ以外(量子 NN、D-Wave)は忘れて下さい、という状態である。

課題はたくさんある。まず、速度について、残念ながら最良の古典コンピューターの速度よりかなり遅いのが現状である。専用の LSI を開発すると高速化する可能性はある。スケーラビリティについても、残念ながら厳しい。富士通の TSP は、 \sqrt{n} アルゴリズムを使っているため、1000 ノードで 32 都市しか解けない。現在、我々が普通の古典コンピューターで困っているの

(量子) アニーラー (3) CSとアニーラー

- アーキテクチャ
 - 10億Trでどのようにイジングマシンを作るかは興味深い
 - ・ 当面は試行錯誤 ⇒ FPGA応用分野
 - 観測型量子イジングマシンは当面実用化が無理
 - 超低電力問題解決に役立つ可能性はある
- OS
 - 量子アニーラーはアクセラレータなので不要
- 言語
 - 量子アニーラー用DSLは当面不要
- アルゴリズム
 - 現在、最重要分野。頑張れ!
- グラフィックス、自然言語処理、ロボティックス、HPC
 - ⇒ 今のところ出番はこない

図 2.3.2: CS と (量子) アニーラー

は、およそ 500~1000 都市の問題である。また、扱う問題の種類として、MAX-CUT 問題は実用価値が殆ど無い。TSP は、小さいことを除けば効率的に解けるので良い。離散最適化問題では SAT 問題が一番重要と思うが、なかなか難しい。私自身はそう思っていないが、量子コンピューターは離散最適化問題には向いていないという風説も最近流れている。

アーキテクチャについて、当面は試行錯誤で FPGA を応用し、CMOS で日立のように開発していくのは悪くないと考えている。速度では勝てなくても電力では簡単に勝てるため、そういう活路はある。

これまで多くの経験をしてきたが、結局のところ、アナログコンピューターはデジタルコンピューターに勝てないというのが結論(図 2.3.3)。したがって、量子がアナログ性を私たちに見せている限りは、既存のデジタルコンピューターには勝てない。

様々な実現形態があり、例えば CMOS リニア回路と DA/AD の組合せ、メモリスタや記憶機能のある 2 端子素子などがあるが、精度確保やスケーラビリティが問題で、幾つかの応用ではアナログコンピューターは非常に有益なものの、何故アナログがデジタルになったかという歴史に学ぶべきである。 2 端子素子は情報処理に使うのは適切でない、という歴史も無視してしまっている。量子だけのことを言っているわけではないが。

これまでに期待され、お付き合いしてきたがモノにならなかったデバイス技術、計算原理は多い。例えば、量子素子コンピューター。スピンエレクトロニクス素子についてはまだ先が見えていないがやりたいという人は多い。DNA コンピューターは特殊用途には合っているため、光ホログラフィック・ストレージや物理屋・工学屋が良いデバイスを開発して1%でもモノになってある程度先が見えてきたら、お付き合いしたい。

要素技術レベルでも期待されているものは多く、例えば磁界結合や静電結合、冷却技術や新規アルゴリズムなどが出てきたら素晴らしい。優秀な研究者には、それらを開発してほしいと考え

これまでの計算機アーキテクチャ研究からのレッスン

- アナログ・コンピューティング
 - 様々な実現形態
 - CMOSリニア回路と、DA/ADの組み合わせ(伝統的)
 - メモリスタや記憶機能のある2端子素子
 - 精度確保とスケーラビリティが問題
 - 応用はAI、IOT、画像処理などが中心
- 多くの研究は何故DigitalがAnalogを滅ぼしたかと 言う歴史に学んでない
- 2端子素子を情報処理に使うのは適切でないという 歴史も無視している
- 一部の量子コンピュータはディジタルというより、 むしろアナログ

図 2.3.3:これまでの計算機アーキテクチャ研究からのレッスン

ている。

なぜ CS の研究者、技術者がこの分野に参入しにくいかというと、非常に簡単で、論文生産性が悪い(図 2.3.4)。巨大な開発チームに入って、素晴らしい結果が出て、Nature や Science や Physical Review に論文が出ても、CS 屋にとっては何の業績にもならず嬉しくない。連名の筆頭でないところで素晴らしい雑誌に載っても、業績にはならない。そんなところに優秀な人を出せない。この状況をどうするかが大きな問題。筆頭でトップカンファレンス、或いは 1.5 流のカンファレンスぐらいに書けるかどうかが死活問題である。

また、我々 CS 屋は下働きではない。PI は CS の人をただの下働きとしか見ておらず、その論文生産性などに全く関心が無い場合も多い。これは私自身の経験だけでなく周囲を見渡しても同様である。はっきり申し上げると、例えば加速器などのプロジェクトでは、CS 研究者は下働き状態である。量子では、そのような状況にならないようにしたい。そんな状況にもかかわらず私が CS 外の分野のプロジェクトになぜ取り組んでいるかというと、もの作りは面白いから、の1点に尽きる。この面白さは多くの人に味わって欲しい。話を盛り過ぎるのもやめて欲しい。すぐにでも使えるという話で参加して、実はアーキテクチャ屋は出番がなくて待ちになることが非常に多い。線表が意味を成していない。それは、結果的に貴重な人材の浪費にもつながっているので、最初からバリバリと活動できるテーマに優秀な人材を突っ込みたい。

若手の場合は待遇が大きな問題である。物理系のポスドクの待遇のレベルと CS 系の考えられる普通のレベルは大きな差がある。物理系ポスドクに払う費用を払ったって、CS 系では一流の人は誰も就職しない。これは日本のシステムの問題である。優秀な人はきちんとした給料で雇用しなければならない。Google なんかも、日本では優秀な人材の吸い込み口の1つになってしまっている。

図 2.3.5 に、量子コンピューターが実用化する時期の予想を示す。いい加減な図ではあるが、

CSの研究者・技術者がこの分野に参入するときの障壁

- 論文生産性が一番の問題点
 - Physical ReviewやNatureに連名論文が出ても嬉しくない
 - 筆頭でTOPカンファレンスに書けるかが死活問題
 - CS屋さんは下働きではない(そう思っているPIは多い:実感)
- もの作りをしたい

このような物を作りたい

- **話をあまり盛らない**で欲しい
 - すぐにでも使えるという話で参加して、実は暫く待ちになることも多い
 - 線表が意味をなさないことが多い。貴重な人材浪費はよくない
- 若手の場合は、**待遇**が実は大問題
 - 人手不足で待遇の良い転職先が少なくない

図 2.3.4: CS の研究者・技術者がこの分野に参入するときの障壁

1000 量子ビットが 2040 年頃には実現するのではと思っている。CMOS のアニーラーはおそらく 2030 年頃に実用化するのではないかと思う。ここを目指してプロジェクトビルディングをしていけば良いと考えている。

最後にまとめとして、量子コンピューターの研究の予算を CS にも回してほしい。最近、科研費含め、研究費の応募先がなくなっている。ゲート型に関しては、本当に挑戦する価値があると思っている。まずは 2050 年を目指して、息の長い研究を進められる体制が必要である。量子アニーラーは残念ながら諦めるべきで、CMOS に任せて欲しいと考えている。私が現在活動しているプロジェクトはもうすぐ終わるため、量子を進めるところがあれば行きたい。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

- Q: ASIC エミュレーターについて伺いたい。ASIC エミュレーターが取り扱うのは、完全に 物理現象、ノイズレベルまで含めて完全に再現するのか?
- A:2つある。完全に再現すると速いエミュレーターはできない。ご指摘のレベルも必要だが、 もう少し上の誤り訂正ができたレイヤから見ていくようなものを作るのが現実的と思う。
- Q:メモリアクセス、メモリ帯域、広帯域の確保が問題になってくると思うが、ASICから設計するということか?
- A: そうである。最初は FPGA で作るが、最近では FPGA でも HBM2 などをつないで、広いバンド幅のものがある。そういうプロジェクトが、ヨーロッパとアメリカにはある。日本には無かった。
- C: メーカーと相談して、量子計算機から上がってきた信号を受けた先を作るというプロジェクトを推進したが、行き場がなくなってしまった。理論的にはできるのは当たり前なので、ものを作らないと意味がないが、持っていきようがない。

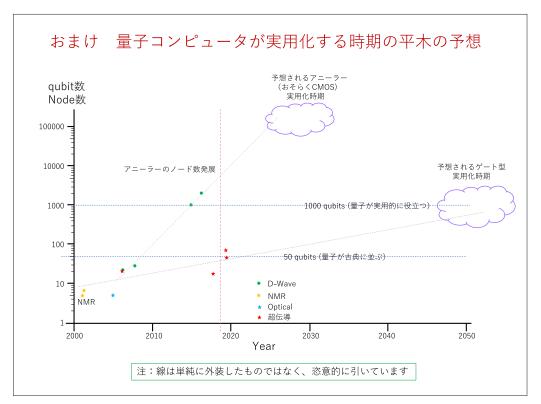


図 2.3.5: 量子コンピューターが実用化する時期の予想

Q:アルゴリズムについて。実際にものを作る、プログラムを書こうとすれば、いろいろなアルゴリズムを組み合わせていく。それが量子アルゴリズムでは見えない点についてどうお考えか? また、計算量屋から見ると、量子計算は確率的な答えが出るため、いわゆる計算量ではなく確率アルゴリズムとか、そういうところと比較するべきじゃないかと思う。

A:自身の周辺のアルゴリズム屋は、実は量子をやっているので、すごくつながっている。アルゴリズムをやっている人にとっては、単にモデルが違うだけである。特に計算量屋にとって非常に面白いようである。全てコヒーレンスでなく、コヒーレンスが一部にあるときのモデルでどうなるかなど、量子の中でもいろいろなモデルを考えて取り組んでおり、そういう活動は将来の役に立つと思う。アルゴリズム屋としては、古典アルゴリズムはやり尽くされた感がある。しかし、それで新天地として、マシンモデルの違う、例えば確率的な量子計算や、コヒーレンスをもう少し長くした計算モデルに取り組むことで、新しいアルゴリズムの境地を切り開く取り組みはもっと積極的にやるべきと思う。

Q:量子アニーラーが上手くいっていないのは、現在 D-Wave しか大きなものが無いからなのか? 或いはほかの会社が新たに開発しても意味が無いのか?

A:量子性を使っていない。コヒーレンスを持って動くような、計算量が変わる意味での量子性を使っていない。

Q: 仮に、例えば量子性を十分に保てるような時間の量子アニーリングマシンが完成すると状況は変わってくるのでは?

A:現在そういうものが無いから何とも論じられない。

Q: そういうマシンを開発するプロジェクトはあるのか?

A: ゲート型のアプリケーションの1つとしてアニーリングを考えるということだと思う。

Q: アニーリング全般に言えることだと思うが、およそどの程度のことができると、モノに

なったと言えるとお考えか?

- A: 従来は、普通の並列計算機のコンピューターで TSP を解いた、現在知られている最良の アルゴリズムに対して 10 倍くらい速いぐらいが大体の目安である。量子に限らず、アク セラレーターを長年研究してきた私の印象としては、従来型のアクセラレーター無しの計 算に対して 10 倍速くないと勝てない。
- Q:同じ精度の解が10倍ぐらいで出るということか?
- A:経験的な法則であり、1000都市で10倍速いものが開発出来たら良いと思う。
- Q:消費電力がどの程度あると良いか?
- A: コンピューター並みで良い。
- Q:消費電力の面で、特にCMOSアニーリングは良いと思うがどうか?
- A:ただ、TSP も SAT も電力が重要となる応用が無いように思う。
- Q:少し別の観点からアニーラーについてお伺いしたい。D-Waveのアニーラーは非常に特殊なもので、断熱計算などとは全然違う意味で使われていたと思う。断熱計算の場合には、もし量子的に動いたとしてもアナログ的な要素はどうしても残ると思う。そうなると、アナログ計算機の歴史に学べというお話が出た通りということか?
- A: だめだということである。最初からデジタルでやるのには、原理的に勝てない。
- Q:量子ではなく少しメタな質問をしたい。いわゆるムーアの法則がとまって微細化が進まないとなってきたときに、従来とは違うデバイスやらコンピューティングモデルやらが必要になるであろうが、どういうコンピューティングがあるべきだと思われるか?
- A:量子コンピューターに関しても、最も重要なところをリソに頼っているため、ムーア則が そのまま効き、壁にぶち当たってしまう。多くのテクノロジーに共通する問題。リソに頼 らないテクノロジーにすることが重要。あとはひたすら電力を下げる。電力を下げると、 普通のコンピューターも間違うようになるため、間違えるコンピューターを何とかしない ければならないという、ある意味で同じところに到達すると思う。電圧を下げざるを得な くなると、答えの 0.1% が間違いという世界になる。
- Q:今、アナログコンピューティングをやっておいても良いと思うが、如何か?
- A: アナログコンピューティングではなく、アプロキシメイト・コンピューティングと、別の 名前がついている。
- Q:図 2.3.5 について、誤り訂正の入る量子コンピューターが 1000 量子ビットで 40 年~50 年、という点については賛同するが、どうやって見積もりをしたのか?
- A: 適当に外挿しているが、私の勘である。少し甘めの予想とは思うが、あまりここで厳しく 言いすぎても良くないと思い、甘めにした。

2.4 量子コンピューティング~コンピューター・アーキテクチャの観点から~

井上 弘士(九州大学)

私自身は量子が専門ではないが、コンピューター・アーキテクトとしては新しいデバイスの活用に興味を持っているタイプであり、量子コンピューターには大いに注目している。本日はコンピューター・アーキテクチャの観点からお話させていただく。

まずアーキテクチャ設計とは何なのかと言うと、システムを構築する際に各要素を適切に定義・抽象化し、これらをつなぎ合わせることである。例えばプログラムを書く人にトランジスタ 回路図を見せる必要はない。このように、システム全体を設計するときに、各構成要素の抽象化をうまく行い、その間のインターフェースを決めることが重要なポイントとなる。そのためには、システム全体を俯瞰できないといけない。そして、システムの構成とインターフェースを決定し、その後に各要素間をどう連携させるか、ハードウェアとソフトウェアをどう連携させるのか、を考えることがアーキテクチャ屋の仕事である。

そのためには、システムを俯瞰する力、設計する力、最適化する力が必要になる。古典コンピューターではある程度システムの全体増が見えてきているが、我々が次にやらないといけないことはポストムーア時代を見据えた新しいコンピューターシステムを作り出すことである。これをやらないと半導体の微細化が終焉したときに行き詰まってしまう。その意味で、量子コンピューターは一つの有望な方向性だと思う。そのシステム像を検討するには、様々なコミュニティーの連携や異分野連携が必要だと感じている。

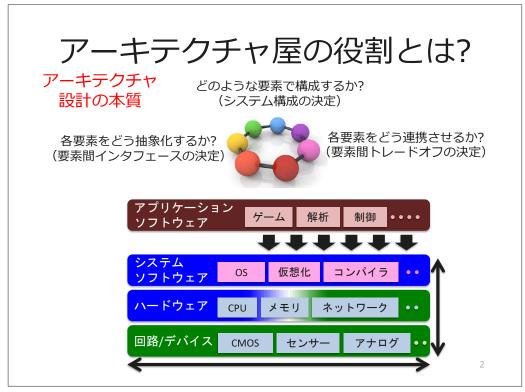


図 2.4.1: アーキテクチャ屋の役割とは?

異分野連携の例として、量子コンピューターの話ではないが、私の過去の経験が役に立つかも しれないのでお話したい。10年ほど前になるが、超伝導の研究者と組んで単一磁束量子(Single-Flux-Quantum: SFQ)回路を用いたコンピューター・システムの研究をスタートした。詳細は省略するが、これはキュービットを使っているわけではなく、SFQと呼ばれるリングに電流が流れると磁束が消失し、この状態を例えば論理値のゼロと見なすことができるデバイスである。特徴としては、高速動作が可能で、かつ、回路上で熱は発生せず電力消費が極めて少ない点である。国内ではいくつかの大学や研究機関が積極的に研究開発を進めており、世界的にたやすくは真似できないデバイス・回路設計技術が蓄積されている。私もこのグループに仲間に入れてもらい、現在も一緒に活動させて頂いている。

我々の取り組みは、CMOS と SFQ の性能を比較しながら、SFQ デバイスの利点を活かしつつ欠点を隠蔽するにはどのような実行モデルや内部構造にすればよいかを考えることであった。SFQ の利点としては $100 \mathrm{GHz}$ でも動作可能という点、さらに、リング構造において磁束の有無に論理値 1 や 0 を対応付ける記憶素子としての機能も兼ね備えている点(つまり、記憶機能付き論理ゲート)である。今の CMOS のデジタル設計の環境の一部を活用できるが、 $100 \mathrm{GHz}$ や $200 \mathrm{GHz}$ で大規模回路を正しく動作させなければならず、そのタイミング設計は極めて難しい。

我々は、特に SFQ 回路レベルとアーキテクチャレベルでの議論を深め、従来ではビットシリアル演算が中心であったものをビットパラレル演算へと変更し、プロセッサアーキテクチャ全体の見直しを行った(図 2.4.2)。その結果、およそ 50 GHz、1.6 mW 程度の演算器の設計に成功している。今はこれを拡大ならびに改良し、新しい SFQ プロセッサを開発中である。ここでの教訓は、固定概念を捨てて、もう一回ゼロから考え直してみると、今までとは異なる新しい可能性が見えてくる、ということである。そのためには技術レイヤを跨いだ議論が重要となる。

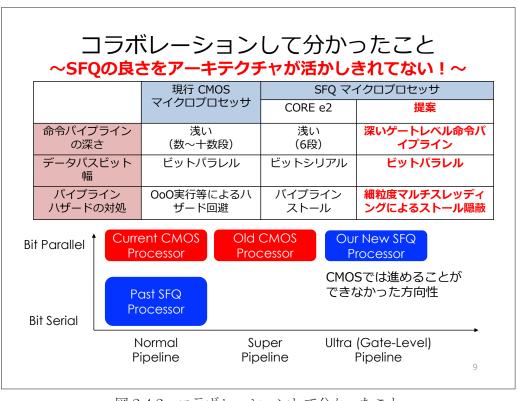


図 2.4.2: コラボレーションして分かったこと

次に光屋さんと組んだときの話をしたい(図 2.4.3)。光コンピューティングは過去にも注目を 集めた経緯があるが、今はナノフォトニクスという技術を使うことができ、これをどうやってコ ンピューティングに使うかということに現在取り組んでいる。ナノフォトニック・デバイスとし て、光の位相を変更できるものがある。これ複数並べることで光を左から右に通すだけでベクトルと行列の積の計算が可能になる。原理自体は昔から知られていたが、ナノフォトニクスを用いて実証した成果を MIT が昨年 Nature に発表した。

光回路は光速で動作でき、場合によっては多重性も使うことができる可能性がある。しかし、 多くの場合がアナログ処理でありノイズに対して弱いという課題も出てくる。それをどうやって 克服するのかというときに、Approximate Computing の考えを導入することが考えられる。 Approximate Computing とは、コンピューター・アーキテクチャ分野で注目されているトピッ クである。

例えばスマホで動画を見ているときに1ピクセルの計算結果を多少間違っても人間にはなかなか認識できない。ということは、必ずしも最高の精度で計算する必要はなく、ユーザーが必要とする精度に合わせたコンピューティングをすればよい。このような方向性がいわゆる Approximate Computing と呼ばれるものである。

先ほどのアナログ処理の話に戻ると、このような Approximate Computing をうまく適用することで、光速アナログ処理の欠点を隠蔽できるかもしれない。このような取り組みを実施するためには、光デバイス特性、回路特性、アーキテクチャ特性、アプリケーション特性を総合して考慮する必要があり、やはり、技術レイヤを跨いだ議論が必要不可欠となる。

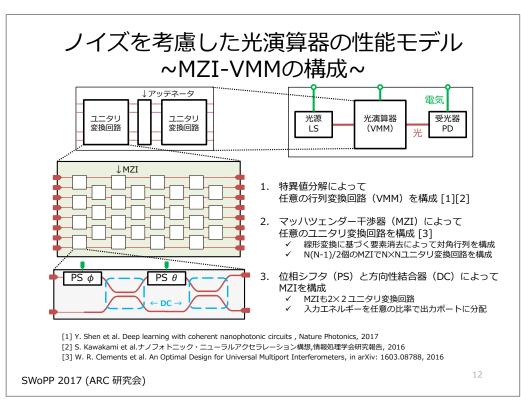


図 2.4.3: ノイズを考慮した光演算機の性能モデル

最後にこれからのことをお話する。私自身、量子分野の研究者の方々と一緒に議論できる場があればと思っている。そもそも古典計算機でのプログラム実行では算術論理演算が重要である。その順番を決めるために制御命令があり、演算対象データを取り扱うためにメモリ参照命令が存在する。

量子の場合ではこの算術論理演算を超並列処理できるポテンシャルがある。現状、制御可能性 や安定性などの観点から扱いづらいデバイスだが、とてつもない性能ポテンシャルを持つデバイ

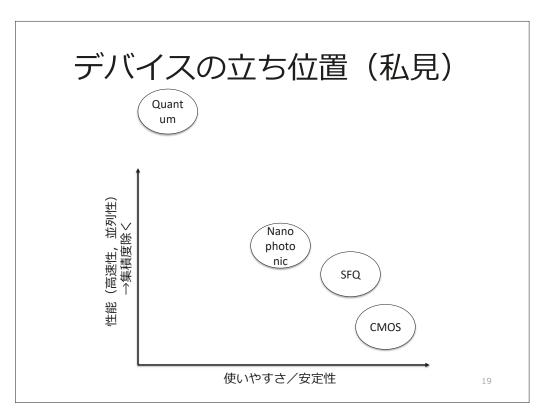


図 2.4.4: デバイスの立ち位置

スだと思う(図 2.4.4)。今後は、これを、如何にシステムとして上手く活用できるようにするかが重要だと考えている。

図 2.4.5 はまだ全て検討中のものであるが、アーキテクト的に考えてみると、量子というものはインターフェースも変わるであろうし、やはりアクセラレーターではないかと思っている。メモリと制御の面倒なところは古典プロセッサーに任せていいのではないか。現在のコンピューティングはアクセラレーターが主役になっている。その意味での量子・古典ハイブリッドは一つの方向性だと思う。このようなハイブリッド構成を考えるには、量子デバイスを如何にうまく抽象化して使っていくかが重要となり、コンピューターアーキテクチャの国際学会 MICRO (2017年)でもこのようなトピックの発表が行われている。

最後に、使いにくいがものすごい性能を持つデバイスをどう使うかという観点からは、量子に限らず他のデバイスが出てきたときにも同じ問題であり、デバイス、回路、アーキテクチャ、アルゴリズム、アプリが連携することは非常に重要である。特に、アーキテクチャは全てを俯瞰して繋ぐという橋渡しの役割が大きい。

これまでの経験を踏まえると、量子ゲートコンピューティングを横断的アプローチによって実際に実現しようとすると、まずは互いの言葉を理解し、議論ができるようになるまでに時間がかかる。議論できるようになって初めて何がボトルネックであるかに気づくことができる。量子コンピューティングは大きな可能性を秘めており、ポストムーア時代を鑑みると一つの方向性であることは間違いない。そのためのコミュニティー形成が非常に重要になってくる。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:量子の場合にはデバイスを操作するというのが古典との違いと説明されていたが、それよりもむしろ、量子の場合には、量子情報が物理系の中にあり取り出すことができないとい

アーキテクチャ屋としての仕事 ~全て検討中~

利用者の要求を満たす最適なシステムを実現するために・・・

どのような要素で構成するか? (システム構成の決定)

→量子アクセラレータ+古典メモリ+古典プロセッサ(?)

量子デバイスを どのように抽象化するか?

• 量子効果に基づく超並列処理

- 入力を状態として設定/相互作用/出力観測
- インタフェース維持不可:古典←→量子
- 耐故障性
- ・ 未だ様々な実装方式の可能性あり

→量子演算器+2段階インタフェース(?)

量子ロジックと古典メ モリをどのように連携 させるか?

 \rightarrow (?)

図 2.4.5: アーキテクチャ屋としての仕事

うのが大きな違いではないか? 量子信号のインプットと、普通の古典データのインプットとは意味合いが違う。古典データでは量子情報というのはインプットできない、ということまで含んでいるのか?

- A: そうである。「設定」と言っているのがまさにそのことを指す。私の理解では、量子デバイスに何か処理をさせようとすると、まず量子デバイスをある状態に設定する必要があり、それを入力と考える。また、その中で計算し、結果を観測として1つだけ取り出すということろまで含めて、全てを「操作」とまとめて言っている。ここが、いままでのコンピューティングモデルと違うと感じており、入力の設定操作、出力の観測を古典の側とシームレスにつなぐインターフェースをうまく作らなければいけないと思う。
- Q:量子入力というのに拡張する方向もあるか? 例えば量子センサーから出てくる量子信号を、古典情報に読み取って、古典情報処理をするというのは得策では無い。測定のエラーや処理するときの古典のエラーも入るため、精度が落ちる。従って、量子信号のまま演算器に取り込んで、最終的に出てくるものは測定して古典信号になって、というようなルートは考えられないか?
- A: 現状は処理という観点でしか書いておらず、古典で入って古典で出るという想定しかしていない。もし、量子情報のインプットもあり得るとすると、処理系は両方のパスがあり、入出力も両方のパスがあり、といったようになり、それらをどうつなげてデータを回せばよいかという話に発展するだろう。
- **Q**:図では、量子 I/O みたいなものが量子演算器側にもある、というようなイメージになるだろうか。
- A: そうだろう。
- C: 現時点ではノーアイディアだが、制御信号とデータ信号があり、データ信号を古典から量

子に移すときには量子入力というのは避けて通れない。データ信号をアーキテクチャに流 してゆくのに、量子入力については考える必要があるだろう。

A:確かに今後考える必要があるだろう。ここでは、制御に限ったのはそのためである。

C: 古典と量子のデータ信号の受け渡しは問題の核になっている。例えば、Grover の探索アルゴリズムでは、線形探索がO(N) のものを $O(\sqrt{N})$ になるが、古典ではわざわざそのようなことをしなくても、二分探索で探索区間のチェックがすぐにできるのであれば $O(\log N)$ で済む。探索区間のチェックがボトルネックとなるが、そこを専用チップを用意すれば定数倍で済むと考える。これを超並列と見たときに、量子をうまく使うことを考えると、古典と量子のデータ信号の受け渡しは必ず必要になる。

A: 大変興味ある問題。もうすこし勉強が必要。

Q:この問題は、この提案のアーキテクチャだけではなく、アクセラレーター的に量子を使う とき一般的な問題になるということか?

A: そうである。量子だけでは無く、入出力の姿と処理の姿が全然違うものを古典の中でうまく使うにはどうすべきか、という抽象度を上げた議論が可能なはずである。その中で、量子特有の事情の考慮もあるだろう。例えば、時間・空間粒度がどれくらいで、どのくらいの時間で物事が進み、どのくらいの粒度の処理を一度に処理できるのかというのが、デバイスごとで変わってくる。そのときに、柔軟にアーキテクチャを最適化できないといけない。

Q: I/O 的なインターフェースがボトルネックになるような気がしている。過去に光コンピューターや光インターコネクトが使い物にならなかったのは、O/E、E/O のコストが大きくて熱も出すことが原因だったと思うが、同じような問題が発生することはないのか?

A: 今は、光の O/E、E/O はかなり改善されているようである。光コンピューティングと量子コンピューティングの差として、I/O のところの差は重要だろう。I/O のところでおさえておくべき点があるのではないかとは感じている。

Q:今の量子コンピューティングの状況を海外と比較した場合、日本がこれだけ差を付けられた原因の一つとして失敗を恐れている面があるのではないか? 失敗したトラウマは分かるが、失敗を重ねないと成功はしないと思う。1回失敗してやめる、というのが一番まずいと思うがどうか?

A: 超伝導はずっとやり続けている人がいたため、比較的スムーズにキャッチアップすることができた。たとえ、とあるタイミングで失敗だったとしても、将来的に境界条件が変われば成功に繋がる成果があるはず。基礎研究は5年でどうこうという話だけでは無いので、継続性が重要だと思う。

2.5 量子コンピューティングにおけるオープンソースの動向

山崎 清仁 (OpenQL Project)

Open Source Software (OSS) を活用した IT ベンチャーを経営している IT エンジニアです。 OSS に関しては、この中ではプロフェッショナルだと思う。

(仕事外で)オープンソースプロジェクト「OpenQL Project」を立ち上げ、量子コンピューターで何ができるかとか、どんな方式がいいかとか、ライブラリを作るとか、そういう活動を、量子コンピューターができた暁に使いたいと思っている皆さんと進めている。プロジェクトを立ち上げたモチベーションは、ちょうど2年前、量子コンピューターというのがでてきて、使えそうだといわれたが、ITエンジニアから見るととても使える状況にはなかった。自分たちのエンジニアリングで何とかしたいと始めた。今は、シミュレーターや、エミュレーターをマルチ言語で作ろうとしている。

古典コンピューターの歴史をもう一度思い起こしてみたい(図 2.5.1)。1970 年代から 2018 年まで歴史をひも解いて、そのマップの中に、量子コンピューターを位置づける。個人的な見解だが、1949 年前後のこの辺り。アニーリングはもうちょっと先と思うが、ゲート型はこの辺ではないか。ただ、量子コンピューターも従来のコンピューターと同じような歴史を辿るかというと、そうではなく、今の高性能なコンピューターもあり、クラウドで利用する環境もあるので、それほどの年月がかからず、もう少し短くなると期待している。

エンジニアから見て、世界で(誰が)どういうふうに取り組んでいるかを紹介する。まず、 リードしているのはこの3社、Microsoft、Google、IBM。量子コンピューターのハードウェア 開発もしているし、ソフトウェアでも各社がツールを整えてきていて、既に囲い込みが始まって いるように思える(図 2.5.2)。

さらに、この3社以外でも世界は動いている。アメリカではベンチャーが多数立ち上がっている、ヨーロッパ系もいろいろある。日本は、アニーリング方式とゲート方式が半々で、どちらも取り組まれている。カナダと日本だけがゲート方式だけでなく、アニーリング方式も一緒にやっている様子である。

では、量子コンピューターがどういうものか、我々なりに整理する。図 2.5.3 のような構造となるだろう。

手元に PC があり、量子コンピューターがクラウドの向こう側にあって、我々は手元の PC で、量子プログラムと言われるアプリを作れる環境になりつつある。ただ、我々は「最適化問題を解く」という抽象化された課題に対して、量子アプリケーションを本当は作りたいけれども、現状ではどうかというと、ハードウェアにより近い枠組みであるアセンブリやファームウェアというところのプログラミングが、研究も含めて盛んに行われている。在野の IT エンジニアはアプリケーション(量子ゲームとか)を作りたいわけだが、量子アセンブリや量子ファームウェアのレイヤを見せられる。アプリケーションを作りたいけれども、アセンブリやりなさいと言われてしまうので、なかなかハードルが高い。アセンブリ言語というところでいうと、IBM がOpenQASM というものを出していて、これが、事実上の標準になりつつある(図 2.5.4)。

さらに上を見ていくと、ソフトウェア・ライブラリもいろいろある。ただ、ハードウェアをつくっている会社が、自分たちハードを使ってほしいがためのツール群として、(ほぼその表現で正しいと思っているが、)このようなライブラリを進化させてきている(図 2.5.5)。応用範囲もいろいろ考えられる。機械学習や化学計算等があるだろう。そこに対してライブラリ、利用環境



図 2.5.1: 古典コンピューターの歴史へのマッピング

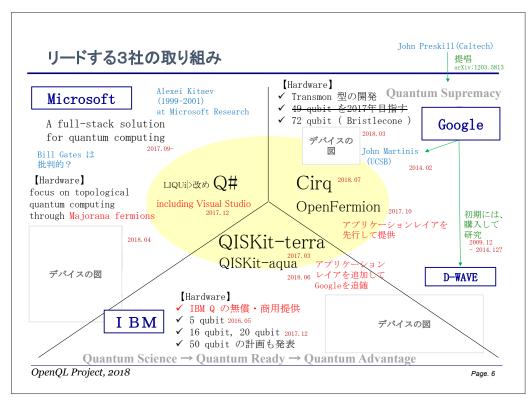


図 2.5.2: リードする 3 社

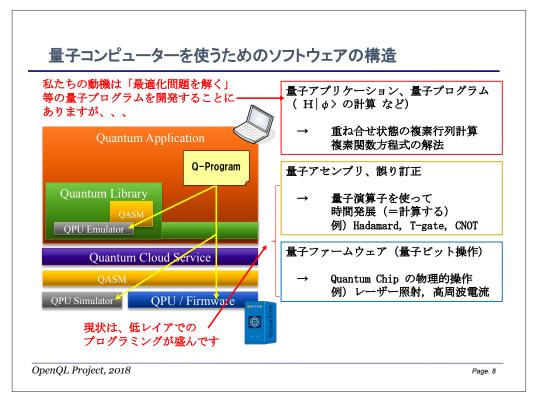


図 2.5.3: 量子コンピューターの構造

というのが充実してこなければならないので、そこも取り組んでいく動きもある。しかし、実際はその数も少なく、まだまだ厳しい状況にある。現在のゲート型量子コンピューターの利用環境を図 2.5.6 に整理した。

次に、量子アルゴリズムをみてみる。量子コンピューターを量子コンピューターらしく使うため手法と私は解釈している。ところが、これは従来のコンピューターを得意としている人たちには、少しわかりづらいものになっている。

ゲート方式では、ゲートの並び(量子回路)を作った場合、まず重ね合わせた量子ビットを作り、波の性質を使って(確率密度を上げて)、ほしい答えに導く。このように効率的に答えに導くような手法、が量子アルゴリズムとして提案されている。役に立つ問題に対して、それぞれに適応するアルゴリズムがでてくるのだろう。

量子アルゴリズムで期待されている分野は、いろいろあり、化学計算、暗号領域、機械学習はよく言われる。ただし、これにも少し落とし穴がある。いま我々が目にする量子アルゴリズム、(要は、Quantum Algorithm Zoo に出ているもの)は、高精度・大規模な量子コンピューターができたら使えるようなものという印象である。では、今、使える量子コンピューターが、どういうところに使えるのかというところがやはり見えづらい。

量子アルゴリズムには、その専門家の講義を聞き、そこで知り得た 2 つの潮流があった。1 つは、アルゴリズムを開発していきたいというモチベーションを持つもので、大規模で高精度な量子コンピューターがもしできたら、さらに違うアルゴリズムがあるだろうと開発、探索されている潮流。もう 1 つが、 \mathbf{Q} uantum Supremacy というアプローチ。今のスーパーコンピューターよりも量子コンピューターが少しでも優位であるということを示す目的で研究されている。ただ、これは、必ずしも実際に役に立つ問題ではない。

この2つは現実の課題に対しては今すぐには使えない。そこで我々、産業界の人間からする

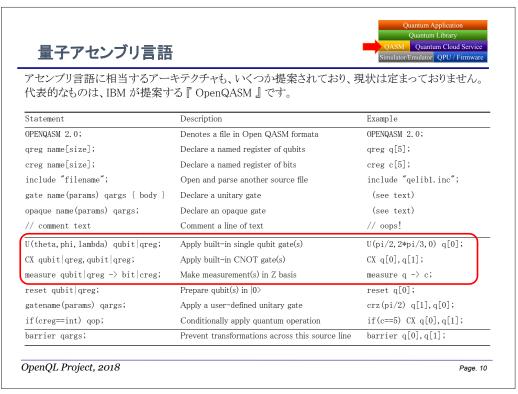


図 2.5.4:量子アセンブリ言語

と、どういうところに興味があるかというと、第3の潮流である。現在、NISQと呼ばれている量子コンピューター。これで動くアルゴリズムが盛んに研究されている。現時点では、こういうものを使いこなせるようになっていきたい。応用分野としても化学分野、最適化問題や、機械学習がある。

私は専門家ではないが、ITエンジニアから見た量子コンピューターの概念図を示す(図 2.5.7)。今、諸先生が議論されているのは、この QPU(Quantum Processing Unit)の中の話が多い。これを例えば古典と連動させて使うという話が結構出てきている。我々のアプリケーションのモチベーションは、量子プログラムを作ることなので、QPUも同じアプリケーションレイヤから使いたい。その間にはコンパイラが必要。

プログラムしたいのは、例えば、 $(x-a)^2$ が最小のところを求めるという問題。それをプログラムして結果を知ることが、量子コンピューターでできないかという問題設定となる。この発想の人たちは、古典コンピューターには精通していて、問題を設定して、こういうアプリケーションを作り、こういうふうにコンピューターを動かしたいと考える。ただし、量子性とかは余りわかっていない。そういう方々を相手にすると、皆さんが考えているのと違った量子コンピューターの使い方が出てくるのではないか、また、そういう人たちが続々と量子コンピューターを使っていくと、量子ネイティブなプログラマがでてくるのではと期待している。

ハードウェアの開発は、やはり国内でも取り組むことを考えなければいけないと思っている。 ハードウェアを持っている人(国)と、持っていない人(国)で、その重要な部分は違うので、 その部分は非常に重要である(図 2.5.8)。

人材育成に関しては、量子というよりは、本当に数学的な話とか、そういうところが必要になるかなというのが進展に必要な要素の1つ。オープンソース・コミュニティを運営している身からすると、量子コンパイラ開発などの大規模な開発を要するものは善意の個人の集団では、限





量子コンピューター・ハードウェアを開発し、クラウド提供している企業が、その利用促進のために オープンソースとして提供しているものがアクティビティが高い。

★Python:いま、最も盛んに開発されています。

QISKit: IBM Q をクラウド経由で利用するためのライブラリ。 (terra が基礎部分) pyQuil: Rigetti 量子コンピューターをクラウド経由で利用するためのライブラリ。

QuTip : Rikenが中心となっている模様。

ProjectQ: ETH Zurich 量子コンピューティングのOSSフレームワーク。Cirq : Google 量子回路を抽象的に扱うのためのライブラリ。

★C / C++ / C-- / F#: OSSでの開発はあまり盛んではない?

Q# : Microsoft LIQUi |> (F#ベース)を一新。2017年12月リリース。Non-OSS。

Quantum++ : modern C++11。Waterloo大学。

ScaffCC: UCSB, IBM が提案している 11vm を拡張したコンパイラ実装。

libquantum : rpm, deb, brew にパッケージ有り。

★関数型言語:論文でのほかの実装提案も見かけるが、開発はあまり盛んではない。

qio-haskell :量子モナドとして利用可能であるが、用途が限定的? Quipper :最近の GHC のアップデートに追いついていない。

OpenQL Project, 2018

Page. 11

図 2.5.5:量子ソフトウェアライブラリ

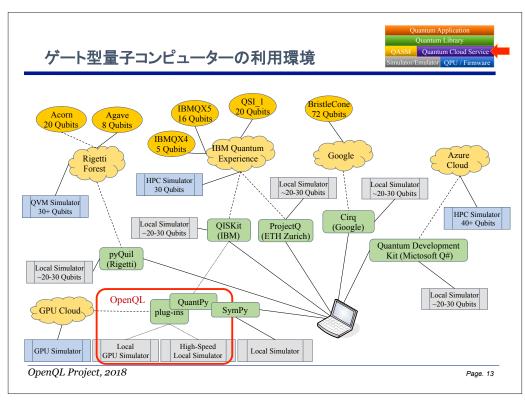


図 2.5.6: 量子ソフトウェア開発環境

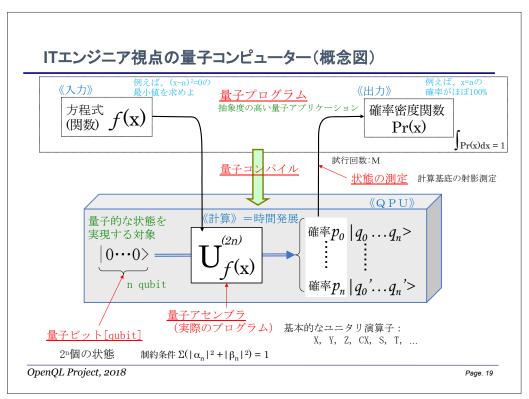


図 2.5.7: IT 視点の量子コンピューター

界がある。他方で、海外の人たちが、すごいオープンソースを出してきている現実もある。あまり経験がなく自信がないが、あのようなものを日本からも発信したい。しかし、私も含めた日本のエンジニアにはそのノウハウも少なく、なかなか難しいというのが現状ではある。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:機械語のデザインというのは完全に海外のもの(IBMのOpenQASM)を使っているということか?

A: OpenQASM ではなく、機械語(バイナリ) への出力部分はブラックボックス、ここは オープンではないのでわからない。

Q: 今の段階だと、それを持っている会社にぶら下がるしかないということか?

A: そうである。この部分は必要がない(量子コンピューターというハードウェアを持たざる ものでもよい)と判断する方向もあると思う。

Q:パソコンのビジネスのように、ハードをもち、OSを持った会社の下にくっついて、アプリケーション開発をしていくというような形が、この世界でも起こるという考えか?

A: その危惧はある。ただ、もう一つ怖いのは「知り得ない」ということ。全部が海外のものになってしまう。パソコンだと IBM は公開したので AT 互換機を作れたが、量子ではその戦略をとらないかもしれない。そうなったとき、ぶら下がる戦略でいいのか危惧している。

Q:古典の計算機開発では日本企業が乗り出してきたが、量子計算機に関しては、残念ながらまだ乗り出していない。日本の企業が、入り込んでないので、まだ日本は持てていないと思っているが、企業の立場からどうか?

A: 立ち位置が違うので回答しづらいが、日本の企業が乗り出せないのは直近の収益が正直な

ITエンジニアから見た量子コンピューター進展に必要な要素

- ■国産のハードウェア開発
 - ・既存のIT産業には縛られない分野への展開 量子コンピューターの物理的な実装は、様々な方式(物性)が研究されています。
 - ・発振器、センサー等、周辺装置の微細制御技術の向上
 - ・価格低減のための生産技術の向上

■人材育成

- 複素数、行列計算など基礎的な数学教育
- ・分野横断的な知識をもつ人材育成
- ■OSSコミュニティの開発能力
 - ・大規模開発のための人材確保(善意による個人の集団では、開発規模に限界がある)
 - ・研究機関主導でのオープンソース開発
 - ・コミュニティの国際化

OpenQL Project, 2018

Page. 26

図 2.5.8: 量子コンピューター進展に必要な要素

ところ全く見えないからではないか。大手にしろ、投資する企業にしろ、その点でバツを つけた (消極的な判断をした)人がいるのではないかと想像する。直近の成果がないの で、役立つものが出たときに取り組むという判断かもしれない。

- Q:高級言語では、量子プログラミングに普通のプログラマーが入ってくるのは難しいと言われたが、そこを量子と意識させないで、例えばプログラミング言語の文法を公開して、あとユーザーにはしっかりしたスペックで与えれば入ってこられると思うが、甘いか?
- C:アルゴリズムがない。
- Q:アルゴリズムはいろいろ辞書的にある。
- A:入ってきても、やはりうまく使えないという懸念がある。
- Q: 関連する質問だが、量子プログラミングはどうあるべきかで、例えば、ネイティブで本当に量子が強い使い方をするというのは、既存の、例えば位相推定、グローバー探索とか、最近だと変分量子回路を積んで最適化とか、そういう決まった計算を、例えば1行で使えるような、そういうものを想定するべきなのか?
- C: 多分、そこがまだ整理されていない。
- Q:今、Google とか QISKit とか、提供されているものの基本的な発想としては、「そんなに量子のディープなところを知らなくても、ぽいぽいって呪文を唱えれば、それなりに問題を解けるのが量子プログラミング言語だ」ということになっているが、そうすると、例えば、位相推定のコマンドがあるとか、HHL みたいにスパースなマトリックスを入れたら逆行列計算をしてくれるとか、ポンと1行で唱えられるようなものがあればいいとなるが
- A: それには段階があって、1段目ではそこが必要。こういうことができるものだとか、HHL をかけようとかは想像がつく。ただ、もう一段進むと、量子性ということでは、if も並列

計算に近いけれども、qifというのを考えてみて、qがついたifを作って皆さんに提供すれば、制御系としても使えるけれども、アルゴリズムにないものもできる可能性がある。

- Q: そうすると、やはりライブラリ群ではなく、何か Quantum なコマンドの量子プログラミング言語体系を使うということか?
- A: 我々の方向性はそれを目指している。そういうものが、実は、先々必要になるのではないかと、今の段階で言っている。
- Q:アルゴリズムを今、開発している人たちは、現場の立場からすると、ユニタリーオペレータで考えている。ユニタリーオペレータをどう使うかによって量子でしかできない高速性を出そうとやっている。ところが、一般の人から見ると「ユニタリーオペレータって何?」ということになる。一般のプログラミングは、話し言葉とは違うとはいえ、もしこうだったらこうします、これはここに入れますと、自分が考えた通りに、プログラムを組めるようになっている。そこにギャップがある。アルゴリズムを考えるときに、ユニタリーオペレータの言語で考えろと言われると、すごく困る。普通に考えながら、量子的に動かせるように、qif とか qwhile という呼び方になっているのではないか?
- A: そうである。ユニタリーを、中で展開する話になるので。
- Q: その対応を付けるには、何でそこに量子性が生きているのかを理解しないと付けられない。そこを頑張ってやらなければいけないということが1つある。それをやるとき、量子アルゴリズムと書いてあるものは全体像なので、ここからエッセンスの抽出と言ったら絶対無理で、もっと小さいところで量子性の何を使うコマンドなのかを考えて、コマンドを作る必要がある。IBMの「アセンブリ言語」の例が出てきたが、これはアセンブリ言語などではなくC言語とかのかなり上の言語になっている。これで書かれても、ユニタリーゲートのかけ方がわからなければ、そのコマンドはわからない。だから、そこには、もうちょっと仕掛けがあって、ユニタリーゲートをかけるということが、どういうことなのかわかるような言語体系を作っていかないといけない。そういうことではないか?
- A:確かにご指摘のとおりで、わからないものを見せられている感はすごくあって、わかりや すい言葉にしていくことも、このオープンソースの活動の中でやっていきたい。
- C:前の質問への答えにも関係するが、ライブラリとして完全にでき上がったものを用意して、呼んで来れれば、それはそれでいい。ただ、ライブラリほどいかなくて小さなサブルーチンみたいなものがあって、あることをやりたいとき、やりたいことプラスアルファで量子スピードアップとか、量子性を入れられるのであれば、そのサブルーチンを呼んでくるという形にするのはありだと思う。多分、それが一番わかりやすい。ライブラリまでいってしまうと、全部のライブラリを用意しなければいけなくなり大変だが、もっと小さい範囲で、サブルーチン的なものでやれば、少しずつ作っていけて、中をあけてみると、ここでこういう量子性が効いているとその範囲でわかる、ということを積み重ねていける。
- A: それは励ましとうけ取った。そういったところからコツコツ積み上げないと、やはりできない。我々のオープンソース・コミュニティとしてはそういう活動になると思う。今日は、あえて挑戦的に、コンパイラという言葉を使ったが、この辺りは、日本のエンジニアがオープンソースで取り組んでいくにはなかなかハードルが高い。難しい。これができるエンジニアは本当に最前線にいて、そういうコンパイルのプロが(オープンソースに)関わってこられるかというと、そういう状況ではないのも事実。
- Q: 今の議論は、量子性を、ユーザーにどこまでどう見せるかわかっていない中、どの辺の粒

度で提供すれば一番受け入れられやすいかという議論だと理解したが、それでよいか?

- C:見せ方だが、一番重要なのは、量子優位性をいかにして出すかのテクニック。
- Q:古典コンピューターでのプログラミング言語はいろんなものが出たが、ほとんどが失敗し、ユーザーを意識したもので今残っているのはJava ぐらいしかない。ユーザーには一番抽象度の高い、やりたいことを直接的に書けるような言語仕様を提供し、それを、ハードに一番適したコードとして生成するというのはコンパイラの仕事である。どこまで見せるか、どこをコンパイラに任せて、どこまで仕様とするかというところが、言語設計屋の力の見せどころだった。しかし、なかなかうまくいかなくて、今、世の中で受け入れられている言語はJava ぐらいしかない。それ以前のFortran やCは、計算機屋が自分たちで使うために作ったため、エンドユーザーを意識していない。そのぐらい言語設計は難しい。そこを今度、Quantum Computing では量子性のようなものを含めてどこまで見せるか、コンパイラがどこまでできるかというところは、もう少し見きわめる必要がある。言語設計屋が一人で考えるのではなく、オープンソース的に、ユーザーの反応を見ながらやっていくのもアプローチとしてありだと思う。ただ、そこに、「こうでなくてはならない」とコミットするのではなく、緩やかにやって行ってもいいのではないかと思うが、そこはどうか?
- C:一般の人に量子性を理解して、要するにユニタリーオペレータを理解して、アルゴリズムを組んでくれというのはなかなか難しいと思う。そういうことは古典コンピューターの世界では残っていない。自由な開発というときの発想は、「どういうことに使うか」という発想である。それを実際に実現するアルゴリズムというのは全く別なもので、分けて考える必要がある。古典の場合には、アルゴリズムがしっかりできていて、そこで悩まなくてもいい。ところが、量子の場合はそのアルゴリズムがない。だから、何かを量子でやりたいと言っても、アルゴリズムがないからできないわけで、そこがまだつながらない。まだつながっていない状況で、一枚かませて、技術者と一般のユーザーを分けて、一般のユーザーから見ると普通の qif だとしても、中を開けてみると、そこには、アルゴリズムがわかっている人が書いたサブルーチンがあるというのが、多分、一番可能なルートではないかという気がする。

A: そのルートが、現実的だという印象がある。まだ、できるという話ではないので、仮説であるが。

3. 量子コンピューティング×機械学習・量子化学

3.1 量子コンピューター俯瞰・応用・人材育成

藤井 啓祐(京都大学)

量子コンピューターの俯瞰、NISQ(Noisy intermediate-scale quantum)領域の量子計算、機械学習への応用、人材育成について紹介する。快適に使える量子コンピューターの実機がまだ出ていない中で、どのようにソフトウェアの研究をするのかについても触れたい。

近年、様々な拡がりを持つようになった量子コンピューターについて、図 3.1.1 に示すように、潜在能力を縦軸に、デバイスへの要求(=実現に必要な時間)つまり実現の難しさを横軸にとり整理すると、いわゆる万能(ユニバーサル)な量子計算機が右中程に位置づけられる。これは、どの量子計算モデル(回路型、測定型、断熱型)でも基本的には万能な量子計算ができ、量子アルゴリズムで動作する計算機である。



図 3.1.1: 量子コンピューターの俯瞰

万能量子計算の次のステップが誤り耐性量子計算である。量子はノイズに対して非常に弱いため、ノイズに対する耐性が必要となる。つまり、誤りを訂正するノイズ耐性のある量子コンピューターをつくらなくてはいけない。例えば、断熱型は複雑なハミルトニアンを使うと万能な量子計算が可能であることが古くから知られているが、ノイズ耐性があることは証明されていない。つまり、万能であることとノイズ耐性があることは必ずしも同じではない。

万能量子計算の他に、量子デバイスでヒューリスティック(短時間で近似解を得る手法)に最適化する量子アニーラーの研究も盛んに進められており、既に実機もある。実機で実際に問題を解くときの消費電力や時間等について、CMOSデバイスや他のヒューリスティック量子デバイ

スとの比較が進められている。

また、量子加速(特定の問題を解く上で、量子コンピューターが従来のコンピューターの計算 速度を上回ること)の有無のラインを超えているが、万能量子計算ほど複雑ではなく、ノイズが 含まれていることから計算結果が近似的であるなどの特徴を持つ、非万能量子計算も研究されて おり、NISQ 領域と呼ばれる。スパコンよりも速いことの実証が目的とされている。

このような状況で様々なプレーヤーがおり、万能量子計算は、IBM や Google、Microsoft、量子アニーラーについては、ハードウェアは D-Wave や、最近は NEC も取り組むという報道もある。ソフトウェアに関しては、1QbBit や QC Ware などのベンチャーも出てきている。さらには、イジング型問題を広くとらえて、量子を使わない手法もあり、CMOS や FPGA、光エレクトロニクスなどを活用した様々なアプローチが出てきている。

ここで NISQ について詳しく紹介する。誤り耐性があり、長時間の計算ができるような、1 万~1 億量子ビットの量子コンピューターを 20 年かけてでも開発することの重要性が謳われているなかで、30 や 50、100 量子ビットのデバイスが、ここ 5 年 10 年で手に入るといわれるくらいに研究開発が進捗した。そこで、量子計算分野のパイオニアの研究者である John Preskillが 2018 年に NISQ という言葉を定義した。近未来に入手可能なデバイスをどう活用するか、ノイズがある小中規模の量子計算をどのようにうまく使うかが、NISQ 領域の課題となる。

NISQ のミッションは大きく分けて3つある(図3.1.2)。1つ目が、量子を使うと計算が速くなるという物理現象をしっかり検証することであり、量子コンピューテーショナルスプレマシー、量子超越、量子優位性などの言葉が使われている。実用的な問題で量子優位性を実証することは難しいが、例えば、スパコンなどで量子コンピューターをシミュレーションし、実機のほうが速いことを証明するなどの研究が進められている。

2つ目は、小中規模の量子コンピューターにおいて量子系を制御するための知見を蓄積すること。将来、大規模で精度保証のある量子計算をすることが非常に重要なマイルストーンになるため、その小規模な系において、例えばノイズの低減、誤り訂正の実証が必要になってくる。

3つ目は、ノイズのある小規模なスケールの計算機(=NISQ マシン)をどう活用するかということである。例えば量子シミュレーションや量子化学計算、機械学習などのアイディアが検討されている。

ここでは3つ目の NISQ マシンをどのように活用するかを中心に紹介したい。量子状態とは、いわゆる重ね合わせ状態であり、0 から1 までの指数的なパターンの重ね合わせを物理現象でつくることができる。この現象が超並列計算を可能にするが、量子状態の確率振幅が指数的に小さいために計算が途中で止まってしまう。従来の量子アルゴリズムでは、位相の推定や、グローバー探索で干渉させるなどにより、確率を集める。しかしこの集めるところでステップ数がかかり、ノイズのある中規模な量子コンピューターでは計算が難しい。

一方、近似量子計算では、量子の重ね合わせ状態で答えが強く出ていない段階で測定して計算を終わらせ、その計算結果を古典コンピューターに入力する(図 3.1.3)。つまり NISQ マシンをサンプリングマシンとして使い、古典コンピューターによる後処理を行う。これは古典量子ハイブリッドアルゴリズムと呼ばれる。物理ダイナミクスのシミュレーションやサンプリングを行う量子シミュレーションとの相性が非常によく、量子化学計算や最適化問題、機械学習への応用が検討されている。

古典量子ハイブリッドアルゴリズムについてさらに詳しく紹介する。VQE (Variational-Quantum-Eigensolver) と呼ばれる古典量子ハイブリッドアルゴリズムを例にあげる。従来の量子化学計算アルゴリズムは、量子状態をつくる変分的な回路(変分量子回路)と、それに対するエネ

NISQ (ノイズのある中規模量子計算)



Quantum Computing in the NISQ era and beyond (John Preskill) https://arxiv.org/abs/1801.00862

NISQ "Noisy Intermediate-scale Quantum technology"

50-100量子ビットが近未来的に実現しそう

→どう賢く使うか?

John Preskill (Caltech) https://www.q2b.us/

- ・量子による計算の加速という現象の実証
 →量子超越(quantum comp. supreamcy)
- ・大規模化への接続(量子誤り訂正の実証)
- ・NISQマシンの利用(変分量子回路:最適化、量子シミュレーショ
- ン、量子化学計算、機械学習)

図 3.1.2: NISQ のミッション

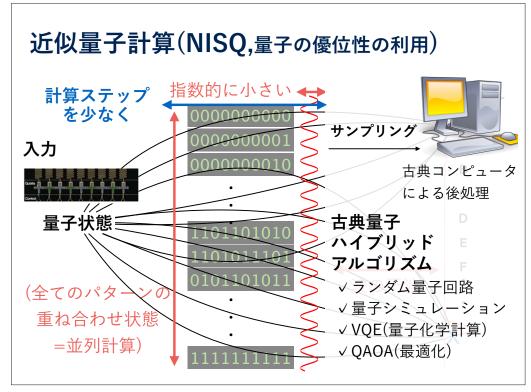


図 3.1.3: 近似量子計算

ルギーを推定して計算する部分の二重構造をとっており、非常に重くなっている。VQEでは、できるだけ浅い(ステップ数が小さい)計算でパラメーター付きの量子回路で得られた量子状態を測定し、古典コンピューターで後処理をする。この古典コンピューターの出力が、できるだけエネルギーが小さくなるようにパラメーターを変える。IBMのグループもVQEを使った分子のエネルギー計算をしている。

NISQ マシンの量子計算における課題は常に"ノイズとの戦い"である。例えば量子ビットがQ個あるとする。深さDステップの計算をする場合、トータルでゲートの要素が $Q \times D$ 個程度出てくる。例えば50量子ビットで深さ20としたとき、一つの素子(量子ビット)のフィデリティ(=忠実度)が例えば0.999(99.9%)とすると、すべての計算が成功して正しい結果が出る確率は、0.999の1000乗=約0.368(36.8%)となる。50量子ビットを並べてフィデリティを99.9%とすること自体、非常にチャレンジングであるにもかかわらず、それでも出力の精度は37%程度になってしまう。このようにNISQマシンは、量子ビット数と深さで決まる計算量に対して、エラーが発生しても十分出力が信頼できる程度に忠実度を上げなければならないという、非常に難易度の高い技術が要求される。

なお、「ノイズとの戦い」は、量子コンピューターに限ったことではない。現在の半導体を使った CPU の低エラーを実現するのも、今までの技術の延長線では難しいといわれている。例えば、コンピューターのベンチマークに使われる LINPACK というソフトウェアを京コンピューターに使うとする。京はいわゆるデジタルコンピューターだが、それでもエラーなしで確実に答えが出るわけではない。不良発生率は 36FIT(10 万年に 36 回のエラー)だが、京コンピューターではノード数が 9 万もあり、さらに LINPACK の計算時間は 1 日強かかる。そのため、トータルの計算としてはエラーが発生し、成功確率は 90% になってしまう。一つ一つの素子のエラーは非常に小さく、レベルこそ違うものの、NISQ マシンと同じようにノイズの問題があるということである。技術的なブレークスルーとしてエラーコレクションメモリやソフトエラー対策があげられる。従来のコンピューターと同様、究極的な計算機をつくるときは、やはり何らかの技術的なチャレンジングは避けては通れない。

次に NISQ マシンの機械学習への応用について紹介する。これまで機械学習と量子コンピューターの境界領域について研究してきた。詳細は割愛するが、深さ(ステップ数)の浅い量子回路をニューラルネットワークのように使い、外部入力を入れて誤差関数を定義し、勾配法を使ってパラメーターを調整して学習するものである。例えば非線形関数の学習(汎化)や 2 値分類問題の学習ができることを論文で発表した(図 3.1.4)。

この分野は非常にアクティブで、今年の3月に論文をarXivにあげたところ、4月にはIBMのグループが実験をした。今年の2月くらいからNISQマシンを使った機械学習に関する論文が多く出るようになり、現在はほぼ毎週のように論文が出ている。また、Rigettiのライブラリ群サービスのGroveでも、この量子回路学習が推奨されており、NISQマシンの機械学習への応用の期待が高まっている。また、機械学習を使った誤り訂正への試みも見かけるようになった。

NISQ マシンの使い方を研究する上では、ソフトウェアや量子アルゴリズムなど、ソフトウェアの開発環境も非常に重要になる。100 量子ビットを緻密に制御するようなマシンはなく、さらにハードウェアにアクセスできる環境も制限されている中でソフトウェアを開発しないといけない。この場合、40 量子ビットなどの小規模の系を高速でシミュレーションできるような環境、従来のコンピューターを使った環境が重要であると考えている。

図 3.1.5 は我々の研究室にあるインテルの Xeon の計算機サーバーである。4CPU、72core、

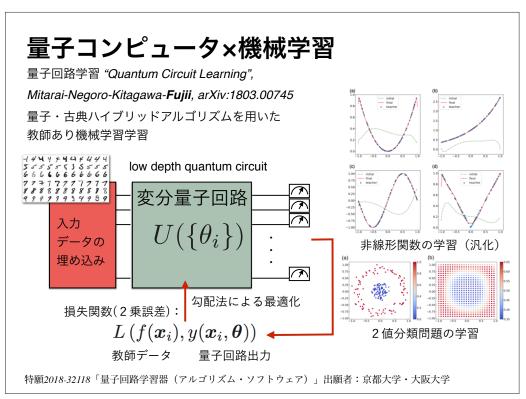


図 3.1.4: 量子コンピューターと機械学習

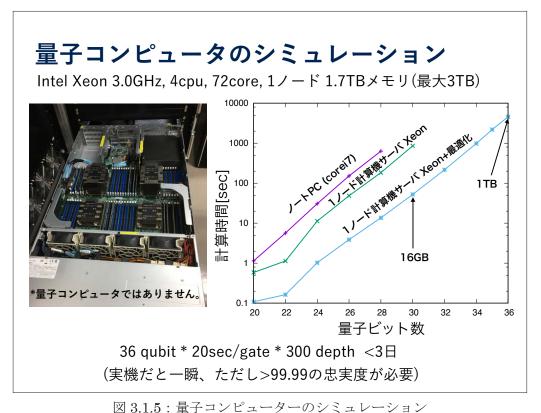
メモリは 1.7 テラバイトと大きい。量子ビット数を横軸、計算時間を縦軸にとって、深さ(ステップ数)が 150 程度の計算をしたときの計算時間を示す。20 量子ビットでは 0.1 秒の計算時間だが、30 量子ビットでメモリは 16 ギガバイト必要となる。36 量子ビットではメモリは 15 ラバイトも必要になり、計算時間も数千秒になる。実機では大体 15 99.99% のフィデリティ(=忠実度)が必要になり、実験も非常に難しい。

この計算機サーバーを使えば、36 量子ビットの場合、1 ゲート当たり 20 秒として、深さ 300 の計算が 3 日程度で終わる。例えば素因数分解などの量子アルゴリズム、量子アニーリングのシミュレーション、物理の時間発展ダイナミクスのシミュレーションに使うことができる。いくつかの雑誌でこれらのシミュレーションについてソースコードも含めて説明している。ぜひコンピューターサイエンスの方に見ていただきたいと考えている。

最後に人材育成について説明する。私の研究室は去年の10月に立ち上げた。学生がいなかったため、プログラミングに取り組んでくれるコンピューターサイエンス系の学生をツイッターで募集したところ、非常に優秀な人が約10名応募してくれた。例えば競技プログラミングや、Kaggle (予測モデリング)、Numerai (仮想通貨) などから応募があり、現在は4名 (京大、阪大、奈良先端大) の学生がいる。

彼らは量子についての知識はなかったが、最初の1カ月、集中的に量子計算についてレクチャーすると、現在はかなり理解できるようになってきた。量子コンピューティングのルールを知ってもらうことにより、分野の障壁は何とでもなると感じている。

量子コンピューターができるのは、例えば 20 年先などと言われているが、その 20 年先に 40 歳でバリバリ活動している人は、現在は大学にいる。大学ではやはりこのような人材育成に取り 組まないといけないと考えている。京大で「量子コンピューターを動かそう」という学部 1 年生向けの授業をした(図 3.1.6)。ベクトルと行列の積、1 量子ビットの演算、IBM Q の量子力



凶 3.1.3:里ナコンヒューターのシミュレーション

学実験、Python でシミュレーターを書くなど、量子コンピューターの仕組みを理解してもらった。

学生の反応もよく、最後は課題に取り組み、非常にレベルの高い発表であった。IBM Q を使ったトモグラフィや量子状態の可視化、Open Fermionを用いた量子化学計算、素因数分解アルゴリズムのシミュレーターなど。いわゆる伝統的な物理学、量子力学から入らなくても、コンピューターとしてのルールを学ぶことにより、人材育成が可能になると考えている。

最後に図 3.1.7 のようにまとめた。NISQ マシンの利用にあたっては、これまでとは異なる新たなフィールドで新しい問題の設定をする必要がある。NISQ 時代は永遠に続くものではなく、我々はこれを乗り越えなくてはいけない。その他、ソフトウェアの開発環境として、シミュレーターが重要と考えている。CPU や GPU、スパコン等、ハイパフォーマンスコンピューティング分野の知見が活かされると考える。もちろん長期的には誤り訂正や高度な量子アルゴリズムの開発が重要となる。

人材育成については、量子コンピューターの実現が 20 年先だとしたら、今こそ取り組む必要があると考えている。情報系、特に機械学習やハイパフォーマンスコンピューティングの分野の人材は売り手市場であり、どのように量子コンピューターの分野に参戦してもらうかが非常に難しい。しかし重要なミッションだと考えている。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:量子コンピューターのシミュレーションが興味深かった。例えば20量子ビットを、この時間でシミュレーションできるのは非常に速いという印象を受けた。

A: 物理時間では 100 マイクロ秒であり、やはり実機が圧倒的に速い。量子ビット数を固定するとシミュレーターは 0.1 秒であり、その差は 3 桁。量子ビットの数に対して指数的にシ

「量子コンピュータを動かそう」

20年後40歳でバリバリ活躍する人材はすでに大学にいる! 課題発表 7/18

課題テーマ(7班):

- ·IBMQ用いたトモグラフィ&量子状態の可視化
- ・量子状態の可視化, SU(2)のTgate, Hgate分解
- ・OpenFermionを用いた量子化学計算
- ・量子回路を用いた機械学習(2値分類)
- ・素因数分解アルゴリズムのシミュレータ
- ・足し算回路の実装
- ・量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングの比較

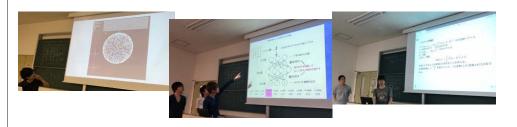


図 3.1.6.「量子コンピューターを動かそう」

まとめ

•NISQデバイスの利用という新たなフィールド. 新たな問題設定をし, NISQ時代を乗り越える必要あり.

→量子コンピュータ×機械学習

- •量子ソフトウェアの開発環境(シミュレータ・実機?)も重要. → <u>並列シミュレータ(CPU?GPU?ベクトルエンジン?)</u>
- •量子誤り訂正や高度な量子アルゴリズムもやはり重要.
 →量子誤り訂正
- •人材育成はも重要(基礎・応用にまたがる体系的なカル キュラムが必要).

→授業, 集中講義(東大,阪大,京大,お茶女,OIST,名大,阪市大,東工大)

•情報系(機械学習・HPC)の強い人を取り込む窓口も必要.

→共同研究, 未踏?

図 3.1.7: 今後の展望のまとめ

ミュレーターの方が遅くなる。

- Q:シミュレーターをつくるとき、どのような粒度で正しさを担保するのか? (古典) プロセッサーのシミュレーターの場合、例えばクロックサイクルレベルや命令レベルで精度を保証する。このシミュレーターの場合は、どのようなレベルで精度を保証するのか? 量子ビットのふるまいをどれだけ正しくシミュレーションしているのか?
- A: 基本的には倍精度で表現できる実数のレベルで精度を保証している。このシミュレーターは、ノイズのない理想的な量子コンピューターをシミュレーションしている。
- Q:量子ビットがあると、全ての場合をきちんと計算しないと正しい結果が出てこない、既存のコンピューターでは処理できないと考えていたがシミュレートできるということか?
- A: これぐらいであれば何とかなる。いわゆる複素確率を、複素数として全ての場合について 保持すると大体1テラバイト必要になる。
- Q:実機とシミュレーターが同じ問題を解くということなのでは。量子コンピューターで物理 系として起こっていることを、それを全部シミュレートしているわけではなく、実機と既 存のコンピューターで、同じ問題を解かせるということではないか?
- A:シミュレーターではいわゆる量子力学で記述できる状態についてすべてのパターンをベクトルとして書き上げて計算している。
- Q:しかしデジタルに 64 ビットの精度で落としているということか?
- A: そのとおり。単精度で計算が深くなると、本来なら確率のトータルが1にならないといけないものが保存されなくなるなど、倍精度必要になる。
- Q: いわゆる量子のアプリケーションを考えたとき、解きたい問題のスケール感はどのくらいのものか。
- A:スパコンで解けない素因数分解は2000 ビット程度のレベル。これを量子コンピューターで計算するには少なくとも2000 量子ビットと、レジスタや補助量子ビットでさらに2000 量子ビット程度必要なので、4000 量子ビットは必要になる。現在シミュレーションできるのが36 量子ビット、これが限界である。やはり従来のコンピューターで様々な問題をシミュレーションするのは難しい。問題をできるだけ簡単化し、誰でもできる機械学習を36 量子ビットで動かしてみたい。将来的に100 量子ビットになったとき、さらにこういう問題も解けるという期待を抱くことができる。そういう使い方になるのではと考えている。
- Q: NISQ マシンについて、量子計算で確率振幅の増幅をせずに途中で計算をやめて、出力を 古典的コンピューターで後処理をするという話があった。どのように後処理するのか。何 回か実験を繰り返すのか。
- A: そのとおり。何回も何回も繰り返して期待値を評価する。
- Q:繰り返すとき、それも一つの計算の過程に入れるのか。それとも実験のように取り出して、計算の過程の外で見るのか。
- A: 実機でサンプリングをして期待値を計算するときには、それらが計算の過程の中に入っている必要がある。同じ過程を1000回やって平均値をとる。これが古典量子ハイブリッドアルゴリズムである。
- Q:ループの部分は古典コンピューターであり、その中で一つのきちんとした量子演算を行い、実証するということか?
- A: その通り。古典コンピューターの中の、量子計算のアクセラレーターのようなもので何回 も繰り返し、サンプリングして期待値を計算する。その期待値に基づいて、次のパラメー

ターをどうするかというループである。

- Q: NISQ マシンで量子計算をして、古典コンピューターで後処理するためのデータを取り出す時間、途中で計算をやめたときのスループットにかかる時間はどれくらいか?
- A: 実機で取り出す時間はマイクロ秒程度。スループットはおそらく1ミリ秒以上必要となる。ソフトウェア処理が入るともう少しかかるが、1秒もかからない。
- Q:量子コンピューターと機械学習について。現在の機械学習やディープラーニングは古典コンピューターの上にシステムが載っているが、量子コンピューターの機械学習への応用に取り組むことにより、精度の向上や、答えが早く見つかるなどのメリットがあるか?
- A: ニアタームではなくロングタームの量子コンピューターであればメリットが証明できる。 ニアタームでディープラーニングを早くできるかどうかは全くわからない。今や機械学習 は Python 経由で簡単に使えて非常に高い精度が出る。更によい機械学習がニアタームの NISQ マシンでできるかはわからない。期待できることとしては、機械学習はほとんど線 形代数であり、量子状態も指数的に次元の大きい線形空間である。いずれもヒルベルト空 間で記述され、言語的には非常に似ている。量子のヒルベルト空間を特徴量空間にして使 うことにより、何か新しい理論ができるのではと考えている。
- Q:人材育成について。せっかく育てた学生がずっと量子のエキスパートであり続けるために はどこにいればよいか。企業か大学か。
- A: なかなか難しいが、最近は量子分野を扱う企業が増えているらしく、企業も一つの選択肢になると思う。もちろん大学のポジションも増えてほしい。伝統的な物理分野や情報分野に比べると理論のポジションは特に少ない。様々な量子のキャリアパスが増えるとよい。機械学習分野では、インターンに行って論文を書いて、優秀な人はそのままヘッドハンティングされてしまうことがある。幸いなことに現在は量子コンピューティングが過剰なブームで、企業が興味を持っており、量子分野の人材が企業で力を発揮してくれれば、暗黒時代を迎えずに、量子コンピューターの発展が続くのではと考えている。
- C:人材のほとんどを海外に取られてしまっている。海外では研究員のポジションが幾らでもある。ベンチャーも含めれば非常に高給のポジションがたくさんある。しかし、それがいつまで続くのかわからない。今はすごく盛り上がっているが、それをいかに持続性のある形にしていくのかを考えなければいけない。また、機械学習や AI などの流行っている分野の人をターゲットにすることは、量子コンピューターのように息の長い分野ではなかなか難しい。一方で、コンピューター業界でも行き詰っているところがたくさんあり、優秀な学生もたくさんいる。そういう人たちにアピールしていくことも非常に重要である。世界各地でサマースクールやウィンタースクールなどの取り組みがなされている。国全体として協力して、例えば地域ごとに供給が行きわたるような仕組みやサポートが大切になるのではないか。

3.2 量子コンピューターへの期待~量子化学の立場から~

望月 祐志(立教大学)

本日は量子化学の立場から量子コンピューターへの期待を述べさせていただく。基本的な考えとして、量子化学というものはすべてシュレディンガー方程式をどう解くかである。シュレディンガー方程式とは、原子核と電子から成る系を量子論で記述する微分方程式であるが、余りに複雑すぎるため、コンピューターのなかった当時、ディラックでさえどうやって解くかわからない、と言ったほどである。ちなみに、ディラックはスピンという概念を導入したり、ディラック方程式を導いて反物質を予言した有名な物理学者である。

シュレディンガー方程式を解く際に重要なステップとして、ボルンオッペンハイマー近似というものがある。これは原子核が電子よりもずっと重いことを利用して、原子核を止めて電子の量子状態のみを計算しましょう、というものである。それによって、ポテンシャルエネルギー曲面というものが求まるわけであるが、それを核座標で微分すると力が出てくる。実際には分子構造の最適化などに非常に有用な原理となっている。

近似法としては、先ずハートリーフォック(HF: Hartree-Fock)近似というものがある。これは分子軌道法という量子化学分野で基礎となるものであるが、電子の波動関数を 1 個の電子状態(スレーター行列式)で近似したものである。分子の軌道を原子の軌道の線形結合で表し、電子間の相互作用は平均的な場として扱う。いわゆる平均場近似と言われるもので、電子同士が反発しあうという効果は十分考慮されていないため、電子相関効果を別途導入する必要がある。実際にはハートリーフォックの基底配置に励起配置を加えることになる。その際、変分的に配置の係数を決めるのが配置間相互作用(CI: configuration interaction)法、摂動論的に決めるのがメラー・プレセット摂動論(MPPT: Møler-Plesset perturbation theory)法と呼ばれるものである。2 電子励起のみを考慮する最も簡単な 2 次メラー・プレセット(MP2)法と呼ばれる方法を用いると、80% 程度の電子相関エネルギーを求めることができると言われている。

重要なことは、配置の重ね合わせでは2電子励起によって電子相関が記述されているという 点で、今の量子化学計算でよく使われている密度汎関数法では、基底配置一つで実効的に電子同 士が避け合う相関効果が入っている。

量子化学計算で一番代表的なプログラムとして GAUSSIAN というものがあるが、主な用途は力を計算して反応の解析をするなどで、かなりルーチン的にできるようになっている(図 3.2.1)。様々な物理量の計算が可能であるが、実際にはエネルギーを解析的に微分して得られる様々なプロパティが重要になっている。

次に配置間相互作用 (CI) の話をする。基本的にはハートリーフォック近似に対して励起状態も含めた配置を線形結合で表して、最後に必ず規格化する。規格化をすることで「size-consistency (大きさについての無矛盾性)」が失われるが (Full-CI 法の場合には保たれる)、解き方としては、大次元行列の対角化になるために反復法を用いる。個々の行列要素は1電子、2電子の分子軌道積分の積和で書かれるが、実際に行列要素を評価するときには、第二量子化の手法を使う必要がある。

図 3.2.2 は水素分子の例であるが、ハートリーフォック近似だけで計算すると赤線のように、 基準となる青線からかなり外れた結果になる。実はイオン性の寄与が共有結合性の寄与に対して 混ざってしまっており、正しく解離させるためには励起電子配置を適切に混ぜる必要があり、い わゆる静的相関の考慮が重要となる。一方で、安定構造付近では平均場近似からのズレにあたる

電子相関の区別

■動的相関

運動する電子間の避け合い、近距離

⇒ HF近似での平均場/有効1体化近似からのズレ、揺動ポテンシャル

■静的相関

多数の電子配置の必然的な混合、定性的な正しさを保証

⇒ 結合の生成・開裂、1重項ラジカル、遷移金属多核錯体などで重要

■取扱い

動的相関: HFを参照するMP2やCCなどで

静的相関: CASSCFなどで(重要領域のみFCIを行い、分子軌道を最適化) ⇒ その後にPTで動的相関を追加的に補正 (CASPT2など)

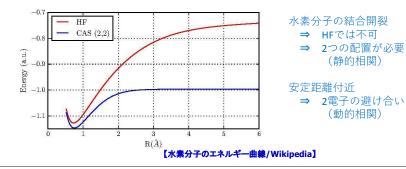


図 3.2.1:量子化学計算から得られる諸量

2個の電子の避け合いが本質的で、こちらは動的相関と呼ばれる。

次に Aspuru-Guzik 先生が量子コンピューターに適しているとして利用を提唱しているユニタリー結合クラスター展開(UCC: unitary coupled cluster)という方法について説明したいが、その前に通常のクラスター展開にふれる。CI 展開と異なり、非線形の指数展開になり size-consistent であるが、ハミルトニアンが 2 電子演算子までなので交換子関係を 4 重までで打ち切れるところがポイントである。一方、UCC となると打ち切りが不可能で、トロッター展開の 4 次で近似するなどしないと解けない。ということで、これまで余り使われてこなかったという歴史がある。

現在まで量子化学というものは 50 年近くの歴史があり、かなり発展してきているが、中でもエポックメイキングな開発としては、CI を行列要素を露わに作らず解く直接 CI 法、完全活性空間自己無撞着場(CASSCF: complete active space self-consistent field)法とその摂動補正(CASPT2: complete active space second-order perturbation theory)があるが、それは Roos 先生の仕事として知られている。CASSCF 法とは、限られた領域だけを Full-CI で展開し、あとはハートリーフォック的に扱うという方法である。

結合クラスター展開に関しても、1982年にBartlett 先生によって画期的な論文が発表され、これ以降はプログラム開発が急速に進んで、現在では3電子励起まで摂動的に補正する方法で良質の基底関数を用いることで信頼性の高い計算がルーチン的にできるようになっている。結合クラスター展開を計算する際にはものすごく複雑な代数方程式が出てくるが、それを人間が導出するのは止めて、Python ベースの自動導出するツール(TCE: tensor contraction engine)を平田聡先生(現イリノイ大学)が開発された。おそらく、量子コンピューターで計算するときにもこのようなミドルウェアというか、ツールを使わないとうまくいかないのではないか。

次に繰り込み群の話で、これは White 先生という元々は物性物理が専門の方が、90 年くらい

従来型の量子化学計算から得られる諸量

◇代表的なプログラム

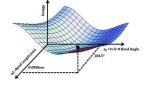
GAUSSIAN, MOLPRO, MOLCAS, GAMESS-US, NWCHEM・・・

⇒ 各々に特徴あり、ただ実際にはGAUSSIANが寡占

◇構造とエネルギー

力による安定構造や遷移状態の最適化、振動数計算

- ⇒ 反応の解析、エネルギー面の探索
- ⇒ 自由エネルギー変化の算定
- ⇒ 相互作用エネルギーの評価



◇物性値

軌道(HOMO, LUMOなど)の分布 電荷(自然密度、静電ポテンシャル系)、多重極子能率 応答量としての<mark>励起エネルギー、(超)分極率、NMR、EPR・・・</mark> 機能性材料の設計に好適

実際にはエネルギー微分(力など)が重要な役割を果たしている

図 3.2.2: 水素分子のエネルギー曲線

に開発した密度行列繰り込み群(DMRG: density matrix renormalization group)という方法 が最近では量子化学でも使われるようになっている。日本では柳井毅先生(現名古屋大学)や倉 重佑輝先生(現京都大学)が非常にアクティブな活動をされている。DMRG 法を使うことで、例えば 10 0 18 乗個も多数の変数が出てくるような Full-CI の問題をコンパクトに解くことが 可能である。

先程お話したが、Unitary Coupled Cluster 法は、1980 年代くらいから提案されていたが、Bartlett 先生らが実用的に定式化し直した。UCC のいいところは変分的にエネルギーを求めることができる点であるが、実はそこで無限次の展開が出てくることが難しさとなる。それを量子コンピューターで何とかすることができる、というのが Aspuru-Guzik 先生の主張である。

おそらく従来型の計算では最も困難なクラスに入ると思うが、 Cr_2 という 2 個のクロム原子間で 6 重結合している分子がある。2009 年の Muller さんの論文では変分的な CI 変数を 28 億個集めて超並列計算で計算したという報告があるが、同じ系に対して、2011 年に倉重先生と柳井先生は DMRG と CASSCF を併用した方法を用いて計算した後で摂動計算もして非常に良い値を出している。たぶんワールドレコードになっているのではないかと思う。実はクロム分子の場合には、化学結合に重要な軌道として 3d 軌道だけでなく 4d 軌道も入れないと定量的に正しい結果が出ない。その分だけ変分空間は大きくなるが DMRG だとうまく計算できる。

さらに倉重先生たちは、量子コンピューターの応用対象にもなると思うが、生体系の金属錯体で光合成における酸素発生の核になる $\mathrm{Mn_4O_5}$ という電子状態が非常に複雑な系を扱った。形式通りの Full-CI の展開をすると 10 の 18 乗個も変数が出てくるが、 DMRG を使うと解けたという論文を 2013 年に Nature 系の雑誌に出している。これもインパクトのある論文として知られている。

DMRG に限らないが、行列積状態(Matrix Product State)のような非線形の展開法が最近

著しく発展しており、定量性を保ちながら、なおかつ、計算時間も短縮する方法として知られるようになっている。

ここで従来型の量子化学計算をまとめると、非常に整備されてきており、相対論効果も並列化などでうまく扱えるようになってきている(図 3.2.3)。また、機械学習を取り入れていたり、ストカスティックなサンプリングを使ったり、先ほど平田先生の例にもあったように計算機代数を使ってコードを自動生成するなど、様々な方面で進化している。また、タンパク質のような大規模分子系を解く問題分割の手法の開発も進んでいる。

従来型の量子化学計算の現状のまとめ

◇定量性の向上

定式化/アルゴリズムの進歩

- ⇒ 巧妙な静的/動的相関の扱い、F12法、相対論効果
- ⇒ エネルギー微分、並列処理、行列積型の演算 良質な基底関数系の充実 (cc-pVnZなど)

◇新しい流れ

情報科学的な要素

- ⇒ 機械学習、統計/確率論的算法、計算機代数
- ⇒ GPGPUの利用
- ⇒ テンソルネットワークによる近似、問題規模の縮小タンパク質などの大規模分子の扱い
 - ⇒ 階層型、分割-統治型: QM/MM, FMO, D&C...

◇プログラムの整備

高度/大規模な計算が出来るコードが種々選択可能

⇒ 実用的なツールとして広く普及 (実験家も使う)

図 3.2.3: 従来型の量子化学計算の現状まとめ

次に本日の主題でもある、量子コンピューターによる量子化学計算に関して知っている範囲で お話する。

最初に挙げるべき論文は Aspuru-Guzik 先生と Head-Gordon 先生らが出したもので、位相推定アルゴリズム (PEA: phase-estimation algorithm) で量子化学計算ができることを発表した 2005 年の Science の論文である。2011 年には水素分子に対して Jordan-Wigner 変換を用いて定式化した論文も発表している。欧州でも、これはシミュレーターではあるが、メチレン分子 (CH₂) に対して量子コンピューターを適用できるという例も報告されている。

日本では 2016 年に大阪市立大学の工位先生のグループが、遷移金属錯体のような多開殻系に対して初期値におけるスピン状態をうまく設定することで収束しやすくなるということを発表されている。

2017年のIBM グループのNature 論文の結果はよく目にする図であり、LiH のエネルギー曲線にハンプがあるのはちょっとおかしいなという気もするが、実機を使って計算したということで非常にインパクトのある論文である。

最後に、量子コンピューターへの期待としては、シュレディンガー方程式の「正確な解」を提案してくれるのではないか、という点がやはり強い。線形展開のFull-CIではなく、Unitary

Coupled Cluster のような非線形な形でも「正確な解」が実効的には得られるため、いろいろな近似解法に対して基準線のようなものを提供してくれるのではないかと期待している(図3.2.4)。また、金属錯体の活性中心の理解から触媒開発も進展するだろう。酸化物超伝導体やMOF(金属-有機フレームワーク)などもうまく理解ができるようになるかもしれない。

量子コンピュータによる量子化学への期待

◇正しい解の求解

シュレディンガー方程式の「正確な解」

- ⇒ FCI, UCCなど
- ⇒ 様々な近似解法による「精確な解」に対する基準線

◇大規模/複雑系の扱い

多核金属錯体

⇒ 酸化還元系酵素の活性中心の理解、触媒の開発 固体/凝集体

⇒ 酸化物超伝導体、金属-有機物フレームワーク タンパク質やDNA

⇒ 分割&統合系アプローチと好相性(?)

◇応答量の評価

励起エネルギー/スペクトルの算定、微分量は難しい(?)

現時点で未だ読みきれないのが"本音"のところ...

図 3.2.4: 量子コンピューターによる量子化学への期待

一方で課題としては、何と言っても基底関数の向上が挙げられる(図 3.2.5)。STO-3G などの最小基底では定量性はまったく得られないため、それを超えることが必須である。また、最近では DMRG の波動関数の最適化に機械学習を使ったり、様々なアプローチも出てきているため、このあたりの技術の量子コンピューターへの応用もかなり進展するのではないか。金属錯体の場合には、複数のスピン状態の違う状態がエネルギー的に近接縮退してくるため、それをうまく解くような方法も必要になるのではないかと思う。

ミドルウェアとしては、平田先生の第二量子化の操作を自動化する TCE のようなツールの整備が期待される。今の OpenFermion は第二量子化からブラビ・キタエフ変換まではやってくれるようだが、その先はあまり賢くできていないため、更なる進展が必要であろう。したがって、当面は従来型との併用、いわゆる量子-古典の混成になるのではないかと考えられる。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

- Q:シュレディンガー方程式が基本になっているということだが、量子シミュレーションをするときに、例えば分子のキラリティまで分かるといった報告はないのか?
- A:厳密に量子化学で解こうとすると、相対論的な効果を入れないと左と右の違いは現れない のではないかと思われる。具体的な成果はまだあまり出ていないのではないか。
- **Q**: 基底関数に対して同じ数だけ量子ビットが必要になるということだが、そうすると大きな分子の計算はどんどん辛くなるのではないか?

考えられる課題

◇軌道空間の拡大

基底関数系の向上

- ⇒ 最小基底系では定量性無し、相対論効果はECPで? 相関記述軌道の調製
 - ⇒ 局在化軌道や自然軌道の利用 (定石的な工夫)

◇収束性の向上

(試行)波動関数

⇒ UCC, CAS/DMRG(?) (因子分解、機械学習の利用) 誤差/精度管理

⇒ 純なスピン状態の保持 (近接縮退根の存在時)

◇プログラムの整備

ミドルウェア

⇒ <mark>自動化ツール</mark>の整備は必須(OpenFermion-Cirq等) 汎用システム化

⇒ 当面は従来型との混成/併用か

図 3.2.5: 量子コンピューターによる量子化学への期待

- A: 実はある種の軌道変換をすると、変換前には量子ビットが 200 個だったものが、精度的には 90% くらい担保しながら 30 個に減らすことができる手法もあるので、今後はそのような手法が進化していくのではないかと考えている。
- Q:フェルミオンを量子系で表現するときのメリットとして実時間ダイナミクスをそのままハミルトニアンで扱えることではないかと感じている。一方、量子化学計算ではエネルギーを求めることが主流のように思うが、実時間ダイナミクスに対する期待のようなものはあるのか?
- A:量子コンピューターの話とは異なるが、光応答に対する電子ダイナミクスに関する論文が 出始めているところなので、それを古典ではなく量子コンピューターで解くというアプローチは今後ありえるのではないか。基本的には多配置の線形結合を最適化しながら時間 発展を追っていくというスキームなので、将来的な応用先としては十分にありえる。
- Q:量子化学計算の分野では、Aspuru-Guzik 先生のグループがかなり強い印象を持っていて、 日本でも量子情報分野の人と量子化学計算の人が協働して新しい理論を構築してほしいと 思っているが、その点に関してどう考えられているか?
- A:日本にも DMRG や量子モンテカルロ計算などで実績を上げられている先生が化学だけではなく物理にもおられるので、そういった方々と連携していくことが重要ではないか。最終的には米国とも連携した方がいいのではないかと個人的には感じており、エンドユーザーとしてソフトウェアを使うだけに終わらないようにすべきだろう。

3.3 量子アニーリングや類似技術の研究開発における現状と課題

田中 宗(早稲田大学)

現在、量子アニーリングやアニーリング技術に関係する研究開発を行っている。そこから得られた知見や課題から、みんなの量子コンピューターという提案につなげて行ければと思っている。図 3.3.1 では、量子アニーリングや量子に限らない、いわゆるイジングマシンと呼ばれるものを全て関連技術として、概要をまとめた。



図 3.3.1: 高速かつ高精度な組合せ最適化処理が可能であると期待される計算技術

これらは、高速かつ高精度な「組合せ最適化問題」「組合せ最適化処理」が可能であると期待される計算技術と世の中では言われている。具体的には、「社会課題」を 0-1 整数計画問題に定式化して、量子アニーリングマシンに入力、組み合わせ最適化処理を行い、結果を得ている。

図 3.3.2 は量子アニーリングや関連技術の歴史であり、まず 1998 年に理論提案、また 90 年代に超伝導エレクトロニクスが進展、その後 2011 年に D-Wave 社が世界初の商用量子アニーリングマシンと称し 128 ビットの D-Wave というコンピューターを作った。以後 2013 年に 512 ビット、2015 年に 1152 ビット、2017 年に 2048 ビットと 2 年で倍ぐらいの成長である。

この D-Wave の取組に関連して、他にも研究開発の歴史が有り、2015 年頃には量子アニーリングに興味を持つ企業が増えてきたこと、量子力学を使わないアニーリング技術が再開発されてきたということの 2 点がポイントで、例えば日立の CMOS アニーリングマシンや富士通のデジタルアニーラーなどが挙げられる。

図 3.3.3 に示したように、研究開発上大事なのは、アプリ探索、ソフト開発、ハード開発、の 3 点で、現段階ではそれらは FS (フィージビリティスタディ) や PoC (概念検証) といった段階ではあるものの、さまざまな連携が進んでいる。アプリ探索においては、実問題に対して今すぐに既存のコンピューティング技術を凌駕するかどうかは不明だが、各企業と一緒に可能性を探っている段階である。

ハードについてもさまざまな観点から進んでおり、D-Wave は搭載スピン数が多いマシンの開発を進めている。一方 NEDO 委託事業では、産総研や理研による超伝導量子アニーリングマシ

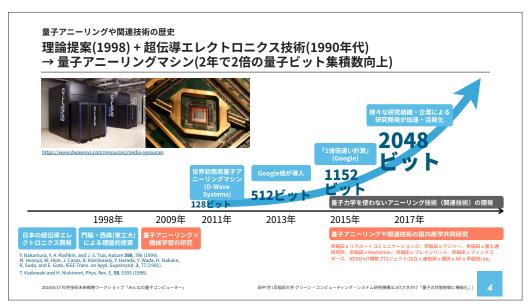


図 3.3.2:量子アニーリングや関連技術の歴史

ンの開発を行っており、大規模化だけでなくコヒーレンス時間の延長を目指して研究している。 NEC も 2018 年 1 月に量子アニーリングマシン開発への参入を発表した。社会課題やキラーア プリがどこにあるかという質問がよく出るが、答えるのは非常に難しい。そこを泥臭く企業の 方々と模索しているのが現状。例えばリクルートコミュニケーションズとは 2015 年から広告配 信最適化、それに引き続き、デンソーとのモビリティ最適化、Nextremer との人工知能などが 挙げられる。こういった連携で知見を積み上げていくことが重要である。さらに、フィックス ターズと共同でソフト開発に取り組んでいる。

他には NEDO 委託事業でもアプリ探索を行っている。そこでは、集積回路系の先生と連携し、電子回路などに関連していろいろなものを出していこうと考えている。

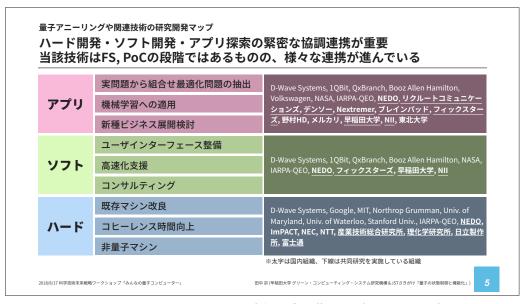


図 3.3.3: 量子アニーリングや関連技術の研究開発マップ

図3.3.4 は応用探索事例の中のパッキング問題で、さまざまな矩形をひとつの枠の中に小さく納めるのにどういったパターンがあるかということで、集積回路設計を念頭に置いた問題設定だ

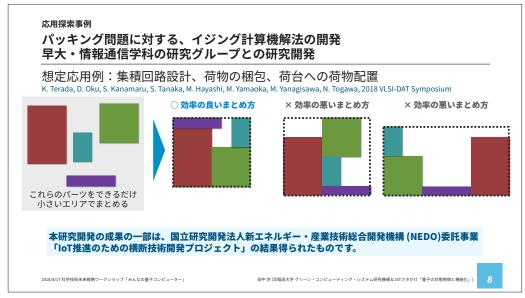


図 3.3.4: 応用探索事例

が、これを更に工夫すると荷物の梱包など配送に関係する最適化問題にも使える。この問題をイジングモデルに変形し、CMOS アニーリングシミュレーターを用いてデモを行った。その結果、理想的なアニーリングマシンにおいてこの問題が効率よく解法可能と示唆する結果を得た。この問題は、普通のデジタルコンピューターでは難しい。

他にもスロット配置問題がある。これは二次割り当て問題であり、LSIの自動設計や配送管理システム設計などに使われているもので、例えばスマート工場でどこに何を置くべきかといった設計に関係している。

また、リクルートコミュニケーションズとの共同研究では、特徴量選択という機械学習の中のひとつの問題があり、これはあるデータを説明するのに、どの特徴量が有効でどの特徴量に意味が無いということを見いだすものである。例えば、弱学習器を組み合わせて学習を行う QBoostを一般化したアルゴリズムの検討や、相互情報量最大化に基づくアルゴリズム検証など。こういった問題に対してイジングマシンをどのように使うかを考え、さまざまなアルゴリズムを検討してきた。これらの共同研究から得られる応用例やアプリケーション事例について、私は特に力を入れている。

日本発の組み合わせ最適化マシンで、量子アニーリングとは異なる非量子型だが、日立の CMOS アニーリングマシンや富士通のデジタルアニーラー、ImPACT プロジェクトによるコヒーレントイジングマシンなど、国内ではいろんなタイプのイジングマシンが出てきており、どう使えるのか、またどういう場所ではどういうマシンが良いのかということをしっかり考えていく必要がある。CMOS アニーリングマシンやデジタルアニーラーといったものが発展途上ではあるもののそれなりに使えるようになってきているので、経済産業省と情報処理推進機構とで、「未踏ターゲット」という人材育成プログラムを今年度からスタートした。

また、私は 2007 年頃から量子アニーリングと機械学習の境界領域に取り組んでいる。研究当初は量子アニーリングを使ったクラスタリングを研究していた。当時はスパコンを使うことを前提として、量子アニーリングをアルゴリズムとして利用するものであった。この研究は 2009 年に情報工学系の国際会議の口頭講演に採択された。この研究を行っているときに、D-Wave の存在は知っていたものの、動向を理解していなかったため、イジングモデルへ変換し、機械学習アルゴリズムを作るという発想に至らなかった。私たちの研究が国際会議に採択された同年末に、

課題	私見
キラーアプリケーションの探索(「潮流に乗る」)	世界的に大きな流れとマッチしたアプリケーション(量子化学、機械学習、その他?)は重要度が高いため、ドメイン知識があり、当該計算技術に興味を持つ方々と連携して進める必要。
キラーアプリケーションの探索(「潮流をつくる」)	世界的に大きな流れとマッチしたアプリケーションのみでは後追いの危険 性。過度の絞り込みは危険。裾野を広げる必要あり。尖ったアプリケーション提案を行える場を様々な研究ドメインで用意。
ハードウェアのスケーラビリティー	私自身がハードウェア開発そのものの専門的知識を有さないため、ハード ウェア開発者の方々のご意見を頂きたい。ソフトウェアでどの程度吸収可 能かはシミュレータベースで検討する?
ミドルウェア・ソフトウェアの開発	過去のコンピュータ開発の歴史を参考にする。情報科学、情報工学の分野 の方々を積極的に取り込む必要。萌芽期計算技術(アニーリング技術)の 開発状況の情報共有も有意義。
人材育成・コミュニティ形成	有意義に見えるアプリケーションを持つが、「自分には難しそう(自分にはついていけなそう)」と思う方が多い。藤井先生(奈大)の学郎一回生向け講義の情報共有は春意。IPA未踏ターゲット取り組み等の情報共有を進める。組織間連合ほど硬直ではなく、個人レベルでの情報共有ほど狭くないコミュニティ形成の国内外成功事例をもとに、「場作り」の検討をすると良いのではないか。大学や国立研究開発法人だけでなく、高い見識と技術力を有する企業の研究開発の現場担当者との連携も重要と考える。

図 3.3.5:「みんなの量子コンピューター」を実現するために

Google と D-Wave が、量子アニーリングマシンの利用を前提とした二値分類の提案を行った。 私たちの論文も彼らの論文には引用されているが、彼らの論文ほどには後の量子アニーリングの 研究業界に影響のある研究とはならなかった。これらの経験を振り返り、戦略の立て方の重要性 を再認識した。図 3.3.5 に「みんなの量子コンピューター」実現のポイントをまとめた。

【質疑応答】(Q:質問、A:回答、C:コメント)

Q:企業の方々とのコラボレーションでは、過度な期待と過度な成果を求める多様な相談が来ると思うが、どういった対応を取るのか?

A: 過度な期待をお持ちの企業とはやっていない。基本的にはエクスペリエンスベースでやっている。企業側も新たな技術にチャレンジする時間と考え、これだけに100%費やすのではなく、労働時間の一定の割合をこのような新たなことに取り組み、エンジニアの経験を積むことにも力を入れている企業もある。企業の考え方によるが、新たな技術へ挑戦をできること自体が、企業が新たなエンジニアを獲得する価値になる。一年後に儲けるという話ではない。

Q:事業に貢献するというモチベーションより、経営判断として会社の方向性の一部の事業の 柱にするといったことか?

A: 現場のエンジニアも新たなことをやり、楽しいね・・・で終わるのでは困るので、コンピューターの進化でこういったことが出来るという課題感を持たないと困る。それが半年後、一年後ということでは無いが、一緒にやらせて頂き、共に考えさせていただいている。

Q:これまでの企業とのつきあいで、研究テーマの方向性で参考になり、企業との経験で研究 の抽象化レベルを高め、一段上のレベルの知見が得られたということがあるか?

A: 現段階ではご指摘のレベルに達していないが、例えばリクルートコミュニケーションズと の機械学習の例では、D-Wave 活用のノウハウや知見が得られた。

Q:機械学習での最適化に使うアプリケーションでは、量子アニーラーをサンプリングに使うという方向性もないわけではない。ゲート型のほうでも、ある種のサンプリングマシンに使うという方向で、やや同じ方向性に見えた。また QAOA もゲートモデルの上で量子ア

ニーリングをシミュレート/エミュレートするように見えたりするので、量子アニーラーからゲートに近寄ってくるような方向性はあるか?

A: 現段階では、よく分からない。

- C: 双方の大きな違いは何かというと、制御の方法が、アニーラーのほうが非常にスパースになっていて、そのために大きな数の量子ビットを扱えるようになっている。そのために、量子性は実際には証明されていない。そういう作りはデジタルコンピューターのほうではできないので、そこが一番大きな違いである。もちろんソフトウェア的には、アニーラー上で動くものをデジタルコンピューター上で動かすことはできる。ただし、「アニーラー」の意味するところが歴史的にどんどん変わり、D-Waveが「アニーラー」と言っているものが、昔は「アニーラー」とは呼ばれていなくて、おそらく一番の計算原理は、断熱計算と思われる。
- C: 断熱量子計算は、ゲート型の量子計算とは等価なので、理論的にはもちろんマップされる。今の D-Wave のアニーラーの問題点は、元にしているイジングモデルが古典計算でも十分早く解けるというような簡単な問題に基づいているということが問題。今までは解けなかったが、いろいろな角度からアルゴリズムを古典上で考えることにより速くなること、例えば、今までは NP だと言われていたのが実は P で解けるというようなこともあると思う。そのときに、D-Wave のアニーラーだと、ある程度はプログラミング可能だが、決まった簡単な問題をハード化しているため、もし優れたアルゴリズムがあっても必ずしも実行できない。また、スケールさせるためには、非常に難しい誤り訂正符号などを組まなければならず、誤り耐性を持たせるのが、非常に難しい。一方、似ているところもある。物理に戻れば、似ているところは多い。重要なのは、古典制御の部分で多くの技術発展があることだが、そこは D-Wave がたくさんの特許を持っている。共通で使われていくものもたぶん多いので、スピンアウトとしては重要な発展は多くあると思われる。ただ、違う点ももちろんあるので、きちんと考慮しないといけない。

4. 総合討論

モデレーター 嶋田 義皓 (JST-CRDS)

参加者には事前に質問票を送付し、回答をまとめた資料をもとに議題を区切って討論した。討論を通して明らかになったポイントや重要な示唆を以下にまとめる。

4.1 計算・キラーアプリケーション

ドメイン志向

- ・ハードウェア開発からみても、長期的なアプリ開発があるとよい。持続可能な形で量子コンピューター開発を続けるには、LIGOにおける重力波の観測のようなゴールがあると、量子コンピューターを分かり易い形で世間に示せる。
- ・量子コンピューターによって超多項式加速をもたらし効率的に解ける問題の範囲に固執せず、多項式加速のある問題についても積極的に取り組んでもらいたい。
- ・ビッグデータ時代を鑑みると、量子検索はキラーアプリになる可能性を秘めていると考えられる。ただし、アプリケーション特化型ばかりに焦点を当てるのは危険をはらんでおり、常に、いかに汎用性を高めることができるか(古典とのハイブリッドも含め)を探求する必要があると考える。

量子化学計算

- ・マテリアルや量子化学計算はそもそも量子力学が関与しているような系を扱うので、そういうところに量子コンピューターを使ってゆくというのは非常に重要と思う。一方で、創薬では分子力学法 (MM) でも十分解決できているものもあるので、既存の量子化学計算にある QM/MM のように量子の部分と MM の部分をうまく切って、本当に量子性が寄与しているところだけ量子コンピューターで扱うというアプローチがあるとよい。
- ・量子化学計算、特に触媒能を有する遷移金属多核金属錯体(生体内酵素を含む)などでしば しば現れる大次元完全配置間相互作用(Full-CI)系の難問題の扱いが期待される。これに より、新しい触媒開発の設計などで役立つ可能性がある。また、多ラジカルの有機機能性材 料の設計にも有効と思われる。光学・磁気特性を有する金属-有機格子(MOF)の開発にも 有用かもしれない。
- ・量子化学計算では、今のところ基底関数が非常に小さいということがいちばんの問題。定量性を上げるためには、基底関数を増やし、軌道を増やす。そうすると、扱うべき変数、配置展開する変数も増えてゆくので、それをどういうふうに現実的に利用可能なビットで扱えるような問題に簡約するかが重要。テンソル積の分解、Matrix Product State (MPS) など、いろいろな技術を持った方が、おそらくここ数年で乗り込んできて、定量性の上がった計算ができるようになる。
- ・基底関数を上げたときに、全ての軌道が有効に使えるわけではないので、いらないものを捨てるような、非常に細かい量子化学的な小技を使ってビット数を節約できる。古くからある量子化学的な手法を温故知新的に集めてきて、それを複合して実装してゆくことが重要だろ

う。

- ・量子モンテカルロなど、物理系で発展した技術は化学の分野にもかなり来ている。ガイド関数を改良して、遷移金属系でもかなり定量的な計算ができるようになってきている。物理・化学横断的な組織やグループを構成するとよい。
- ・1QBit の人たちが 6 月の arXiv 論文で提案しているが、大きな問題を分割して小分けで計算し、最後に合算する「Divide & Conquer」のような分割して統合する考え方のアプローチで分散的に量子コンピューターをつないで計算を行うことも必要。必ずしも量子的につながっていなくてもいいと思うが、エラーやコヒーレント時間の短さの問題を回避しながら、現実的な解を得る。HPC 分野であれば並列処理というのは当たり前にされているので、量子コンピューターの文脈の中にも出てくるとよいと期待。
- ・電子ダイナミクスや励起状態など、既存の量子化学の方法では計算が重いからリーチしていなかったところの「ツボ」を教えていただきたい。そのような形で、量子化学計算の人との連携を模索している。
- ・例えば、多核金属錯体での系で、遷移金属元素が複数あるときには、開設爆発で普通は解けないところは量子コンピューターをうまく使って、それ以外の外側のレイヤはもう少し簡単な量子化学のスキームで、さらに外側を古典力学的なもので済ますというような、多層のQM/MM的アプローチが、量子コンピューターを現実的に使う上で重要な考え方になるのは間違いない。

機械学習

- ・機械学習(線形代数との相性が良い。量子機械学習は学術的に未開拓)。社会的インパクト は少ないかもしれないが、物性物理への応用や量子コンピューター開発や賢い使い方の理解 を深めるために量子コンピューターを利用することも重要(波及効果が大きくキラーアプリ 探索につながる)。
- ・マテリアルズインフォマティクスへのつなぎ込みを検討すべきだと考える。量子化学計算の 性能を期待して、ソルバとしての利用が適切なのか、機械学習の性能を期待して、機械学習 部分への差し込みが適切なのかを検討する研究テーマは重要であると考える。
- ・逆問題的なアプローチとして、マテリアルズインフォマティクスも注目されている。いろいるなやり方があるが、量子コンピューターによる機械学習の高速化ができるのであれば、その部分に対して使うという方向性もある。

さらなる応用へ

- ・界面・表面の解析、量子情報デバイスの開発、量子熱力学に絡む新しい機能、などまだ取り 組まれていない新しいアプリケーションの開発。多くは世界的にもまだあまり考えられてい ないが、量子系との相性がよい。また明らかに社会的なインパクトが大きい。
- ・自然界には必ず熱浴というものがくっついてくるが、この熱浴の効果が入ったシミュレーションはすごく大変。ETHで解析がされているが、非常に多くのリソースと時間がかかりなかなか難しい。
- ・少しエミュレーション的な考え方を含んでいるが、コンピューターというふうに考え過ぎず、新しいリソースを加えたことによってできる計算というのがたくさんあると思う。こう

いったものを組み合わせることによって、近似型の量子コンピューターは非常に広がるだろう。

- ・量子コンピューティング研究者の多くが述べている量子化学計算や機械学習については、い わば現段階で見えている優先度の高いアプリケーション例であるので、迅速に着手する必要 がある。スピントロニクス分野やトポロジカル分野がそうであるように、世界的に大きな流 れとマッチした研究テーマに対する研究開発は、量子コンピューティング萌芽期である現在 において、重要であると考える。
- ・近似型の量子計算には、近似型ならではのリソースがある。近似型の量子コンピューターが エラー耐性量子コンピューターに比べて何が優れているかというと、連続的なパラメーター を持ったゲートの実装が可能である点である。エラー耐性だけではなく、誤り訂正符号が 入った時点でこれはできなくなる。
- ・物理の人間はハミルトニアンに縛られているが、あまり得策ではないのではないかという気がする。自然界に現れる面白い量子現象は、必ずしもコヒーレンスを伴って現れるわけではなく、量子効果として現れているものもたくさんある。例えば、レーザーではロックされていないコヒーレント光でも十分いろいろなことができる。そういう意味で必ずしもコヒーレンスを最終的には必要としない現象というのはたくさんあり、近似型量子コンピューターというのを広く捉えて使うという方策は有効なのではないかなというふうに考える。
- ・大規模ができないから小規模なのだ、と考えるのはあまり得策ではないだろう。すべてのものがスパコンではないように、いろいろな量子技術がある。ここでは、量子コンピューターというふうに言ってしまっているが、やはり量子 ICT だと思う。そのとき、他と組み合わせて、例えばセンサーと組み合わせてそれに特化した量子コンピューターというのがあってもいいと思う。古典計算で言われている SAT 問題とか決まった問題を量子に落としてきてアルゴリズムを考えて計算する、というのはあまりにも狭すぎると思う。
- ・泥臭いアプリケーションでは、理論家と実験家が組むのが理想的で、CS的なものよりは、 制御など電子工学的なものを活かしてこそ可能な応用が出てくると思う。もう少し計算っぽ い話であれば、古典コンピューター上にシミュレーターをつくって動かしてみるというとい うののもある。
- ・NMR 量子コンピューターで初期化する技術が、MRI の感度を 1000 倍に上げたりするという方向性で、量子コンピューターとは違う形かもしれないが、量子コンピューターのための技術のスピンオフもあっていいだろう。
- ・コンピューターシステムやアーキテクチャを見たときに、キラーアプリを探し始めた途端に うまく行ったというものは、あまり聞いたことがない。キラーアプリとは、いろいろな状況 でいろいろな人が使って、その中で、「こう使ったらいいんじゃないか」という知恵やアイ ディアがどれだけ出るかだと思う。したがって、いかに早く、いろいろな人が使いやすい環 境をつくるが重要と思う。この部屋の中だけでキラーアプリは何だと考えるよりも、地球上 のみんなが使ってくれて、小学生から大学生までふくめていろいろなものを考えてくれた方 が絶対キラーアプリが出てくると思う。NVIDIA が最近の AI ブームの中で取り組んできた 仕組みと似たようなことをするのも重要。
- ・もしキラーアプリがポンっと出てきた時に、みんながそれに集中してしまい、ほとんど専用マシンみたいになってしまうと、コンピューターシステム的には一般性がかなり落ちる。そして、いろいろな人が使えなくなって、そのブームが過ぎたら終わってしまうようなことにならないか、というのを心配している。したがって、いかに早くいろいろな人が使えるよう

にするかが重要。その意味で、シミュレーターというのは1つのツール。

- ・量子化学や機械学習はよく語られているので、ある意味、それはやればいいという印象で、 それだけに集中投資してしまうと、機会を失ってしまうと危惧する。裾野は広めに取ってお いた方がよいだろう。
- ・Quantum-inspired アルゴリズムの研究も盛んになっており、NISQ 量子デバイスでの計算が実現しなくとも、副産物としていまの古典コンピューター上で動かしてもご利益があるという可能性もある。

4.2 ボトルネック・重要課題

科学技術上の課題

- ・近似型量子コンピューターは物理的には素晴らしいが、計算量的にはどうということはない。このギャップをどう乗り越えるのか、ということが最重要課題。
- ・誤り耐性型量子コンピューターでは、ハードウェアに関する課題が多い。ソフトウェアでは、制御回路のアーキテクチャ、量子回路の実装方法の開発、前処理の最適化古典計算、量子計算実装に伴う古典データ処理を行う高速ソフトウェア等が課題、ボトルネックとなっている。
- ・今の超伝導の開発は大規模なものに特化した形で進んでいる。実際には、いろいろな物理系 でのインプリメンテーションが可能で、それによってインターフェースに向いているもの や、室温で動くものもある。
- ・超伝導での実装の限界を超えるには、他の物理系に基づく実装が必要。そのためには量子状態制御、量子情報デバイスの設計、アーキテクチャなど、様々な課題、ボトルネックがある。
- ・ソフトウェアの観点からもインタフェースや量子メモリなどは重要な研究課題である。どう すれば量子優位性が得られるかという一般理論は今のところない。そういう本質的な問題を 扱う理論的な基礎研究も重要。
- ・今の段階では、プラットフォームのところを取り組むべき。それがまだ 10 年かかるかもしれない。また、ハードとアプリが密接に関係するという方向もあるが、せっかくレイヤ構造というのが考えられ始めているので、分離して進んでいく方向との両軸がある。
- ・古典の場合には、プログラミング意味論がしっかり確定しており、仕様記述からプログラムを導出する数学的な手法は確立している。その上で、アルゴリズムがいろいろ開発されていく。量子計算では、プログラミング言語に加えて、量子プログラミング作法みたいなものが未確立で、ボトルネックとなっている。個人のアイディアでアルゴリズムはどんどん考えて作られているのだが、メソッドが確定していない。数理系の人が入ってきて、そういったものを開拓してゆく余地はたくさんある。
- ・海外で進んでおり、日本は出遅れている感がある。量子プログラム言語は、古典のアナロジーではあるが、どんどん出てきて、量子ラムダ計算などやられている。日本ではちょっと他のところをやっているので、もうちょっとここのところもしっかりしなければいけないと思う。ここは今、日本が一番人材がないところ。
- ・量子化学計算に関しては、量子ビット数の増加が技術的にはネック。現在は、小規模分子、 しかも最小基底ないし原子価2分割程度の基底関数の計算で、定量的な記述にはほど遠い。

基底関数を上げると、軌道空間が広がるため、試行波動関数の構築を工夫する必要も出てくる。

制度上の課題

- ・色んな分野の研究者が協業しなければならないところが課題。「面白いから」という興味で 続け、成果が境界領域であるがゆえに評価されない研究に、持続性がどこまで維持されるの か疑問である。
- ・開発コミュニティの国際化と開発人材の確保が課題。この領域は、コンピューターサイエンスの知識と量子情報の知識の融合分野であり、両方に精通した人材が非常に少ない。もしくは、その人材が活躍できる場所(組織や拠点)がない。
- ・量子コンピューター工学分野における分業体制(現在は各研究者が手広くすべての領域に手をだしている状況)。特に理論側は深刻な人材不足。QIP、TQC、AQIS などの量子情報分野の国際会議で発表できる人が少なすぎる。量子コンピューター全般に関する体系的な知識を学部のうちに学べる大学がほぼない。海外の研究者が訪問したくなるようなビジビリティのある研究所がない。
- ・プログラム意味論は特殊な人たちしか習わず、企業のプログラム検証をやっている技術者しか知らない。 巷には出てこない。 ホールマンなどを普通のプログラマーは習うが、 量子ではそこが確立していない。
- ・鶏と卵だが、プログラム意味論のところは、いろいろ経験を積んだ上で、それを反映する形で作られてゆくということもある。一方向ではなく、お互いに行ったり来たりしながら、これがあるからこれができます、というようにシステムとして確立されてゆく。そのためには、やはり早く手をつけなければいけない。
- ・数学の人が入ってこないといけない。数学会ではなく、いまはおそらくソフトウェア科学会 とかにいる。
- ・人材がいないのは制度上の問題が大きい。人材はいる。これだけ人口があり、これだけ大学 進学率も高く、女子は限定されているにしても、やはりそれなりに人材はいるのだと思う。 しかし、選考・評価をするときに、非常に新しいことや、分野の常識ではないことをやるの が非常に難しい。今、若手を元気付ける制度がたくさん出てきてはいると思うが、選考委員 を見るとシニアな方が多く、そこに気に入られないといけないということになると、逆効 果。やはりシニアな方々が評価する分野の研究をしたほうがいいいうことになりがちであ る。
- ・ハードウェアであまりにクレイジーなのは難しいというのはわかるが、ソフトウェアの場合には、ある程度クレイジーなものも受け入れていかないと、新しいものはなかなか出ない。 制度には懐の広さが欲しい。
- ・さきがけは良いと思う。そして、その若手の上でやっている我々とかが、もっと楽しく生き 生きと研究をしないとやっぱり下はこの分野って面白くないのかと思ってしまうだろう。優 秀な人材はたくさんいる。その領域にくれば、いろいろな分野の方に出会えて、そこで話を するとすごく育っていくと思う。全体としての分野の盛り上がりができないと、なかなか 色々な分野からはこないだろうが、そいういうしくみが結構重要。
- ・これまでは微細化が進んでいたので、例えばある提案が5年後にうまくいきそうかは判断 しやすかった。しかし、本当に微細化が止まった瞬間に、誰も判断できなくなる世界がやっ

てくるはず。そのとき、どれだけ多様な提案が遠慮せずに出せる環境になっているかという のは、重要なところ。

4.3 推進方策

- ・どうやって企業と連携するかというのが1つのポイント。外から見て、ここが量子の拠点ですというわかりやすいビジビリティーがある拠点があると、企業もそこに入りやすいのではと思う。いち研究室レベルではIntelがデルフト工科大に行ったような支援を期待するのは難しい。
- ・オランダー国で QuTech を実現し、Intel や Microsoft が支援している。カナダにも IQC があり、量子情報分野の PI がたくさんいる。日本もビジビリティのある研究拠点に、海外とも連携しつつ資源を集中させるべき。他の伝統的分野にも量子情報分野の存在意義や面白さをアピールする教育や人材育成ができる人を増やさないといけない。
- ・拠点はあった方がいいが、どうやってそのような拠点を作っていくかとか、どうデザインしていくかはなかなか難しい。組織間の連合ほど硬直はないが、個人レベルの情報共有ほど狭くはないというコミュニティー形成が、まずは必要だろう。
- ・東京地域だけでいっても非常に多くの研究機関が、量子情報の研究を何らかの形でやっている。プレーヤーの数も1個1個見るとすごく少ないが、全体としてみればかなりある。予算も、東京地域を集めたらデルフト工科大より絶対多い。したがって、予算がないというのではなく、予算の使い方、その組み方をきちんとやれば、もう少し上手く回るのではないかと思う。
- ・量子情報技術は、一国では成り立たないというのが国際的な常識。国際化が重要であるとと もに、国際的な研究協力を推進する体制の強化が必要。人材獲得も国際競争のため、研究環 境の改善が必要。
- ・それぞれの大学からは中立的な立場で、そういったものを統合してサービス提供する共同利 用機関が、例えば、なんらかのハブになるというのはありがたい。
- ・何か大きな角があると、企業もお金を出しやすいかもしれないし、学生もそこに行って、そこで研究も教育もするとか可能になるだろう。そういった大きなフレームワークを作ってもよいと思われる。
- ・現状、計算機工学としての量子コンピューティングはまだまだ学問形態が定まっていないと 思われる。このような状況でのいわゆる「教育」は極めて難しく、また危険性をはらんでい ると思われる。当面は、研究を通しての人材育成(特に、複数技術レイヤを横断できる人材 の育成と教育)を進めることになると思われる。
- ・研究成果を産業利用するまでに長い期間を要する可能性もあり、短期・中長期でみた産業利用を想定しておく必要があり、そのための仕掛けも検討しておく必要がある。
- ・派手にぶち上げて、内容が伴わないのに予算を集中させる現状は不健全だと思う。量子コン ピューターという分野を早く作り、将来を見据えたプロジェクトの選択・推進が必要と感じ る。
- ・大手企業ばかりでなくベンチャーも含めた企業連携やスタートアップ促進を期待。

A. 開催趣旨・プログラム

概要

日時:2018年8月17日(金)10:00~17:30

場所: JST 東京本部別館2階セミナー室

主催: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 (CRDS)

開催趣旨

JST CRDS は、科学技術に求められる社会的・経済的なニーズを踏まえて、国として重点的に推進すべき研究領域や課題、その推進方策に関する提言を行っています。この活動の一環として、科学技術分野を俯瞰する「俯瞰ワークショップ」や、重要テーマの研究開発戦略を検討する「科学技術未来戦略ワークショップ」などを開催してきました。

本ワークショップでは、世界的に研究開発が進む量子情報処理分野の中で、とくに量子コンピューターのコンピューター科学としての側面に着目します。ここでは、エラー耐性を備えた万能デジタル量子コンピューターから、量子アニーリングに代表されるアナログ量子コンピューターまで幅広く俯瞰し、現状と課題を議論します。具体的には

- ・電子工学やコンピューター科学の視点で、現在の量子コンピューター研究開発はどのような 状況に見えるか? 何を期待し、その実現を妨げる課題は何か?
- ・コンピューター科学分野の研究者・技術者が量子コンピューター研究開発分野に参入すると きの障壁はどのような点で、どう下げたら良いか?
- ・量子化学計算や機械学習などへの応用が期待されているが、具体的にどの部分の計算を量子 コンピューターで行うことが有望なのか? その理由は何か?
- ・どのような特性の問題が量子コンピューターに向くか? 今後 10~20 年で実現が可能そうな小中規模量子コンピューターには、どのような用途が期待できるか? 従来のコンピューターと比較できるような具体的な問題設定は何か?

などを幅広い観点から議論し、科学技術と推進方策の両面からボトルネック課題を探索します。

また、CRDSで現在検討を進めている戦略プロポーザルの内容もご紹介し、今後の量子コンピューター科学を強化する戦略となりうる研究開発の方向性の共通認識を得たいと考えています。当日は、活発な議論をよろしくお願いいたします。

なお、本ワークショップは非公開とさせていただきますが、議論の内容は報告書としてまとめ、参加者に配布後、CRDSのウェブサイト上で一般公開させていただき、今後の施策や提言書作成の参考にさせていただきます。

招聘有識者

井上 弘士 九州大学 システム情報科学研究院 教授

田中 宗 早稲田大学グリーンコンピューティングシステム研究機構 主任研究員

田渕 豊 東京大学 先端科学技術研究センター 助教

根本 香絵 国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授

平木 敬 東京大学大学院 理学系研究科 特任研究員 藤井 啓祐 京都大学大学院 理学研究科 特定准教授

望月 祐志 立教大学 理学部化学科 教授

山崎 清仁 OpenQL Project

廣川 真男 広島大学大学院 工学研究科 教授 (コメンテーター)

楊 天任 株式会社 QunaSys CEO (コメンテーター)

プログラム

10:00~10:10 開催挨拶・参加者紹介

10:10~10:25 趣旨説明(問題意識、論点、プロポーザル骨子の説明)

10:25~14:10 量子コンピューティング×コンピューター科学

田渕 豊 (東京大学 先端科学技術研究センター 助教)

根本 香絵(国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授)

平木 敬 (東京大学大学院 理学系研究科 特任研究員)

(昼食休憩)

井上 弘士(九州大学 システム情報科学研究院 教授)

山崎 清仁 (OpenQL Project)

14:10~14:20 (休憩)

14:20~16:05 量子コンピューティング×機械学習・量子化学

藤井 啓祐(京都大学大学院 理学研究科 特定准教授)

望月 祐志(立教大学 理学部化学科 教授)

田中 宗(早稲田大学 グリーンコンピューティングシステム研究機構 主任研

究員)

16:05~16:20 (休憩)

16:20~17:20 総合討論

17:20~17:30 ラップアップ

B. ワークショップ参加者一覧

招聘有識者

井上 弘士 九州大学 システム情報科学研究院 教授

田中 宗 早稲田大学 グリーンコンピューティングシステム研究機構 主任研究員

田渕 豊 東京大学 先端科学技術研究センター 助教

根本 香絵 国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系 教授

平木 敬 東京大学大学院 理学系研究科 特任研究員 藤井 啓祐 京都大学大学院 理学研究科 特定准教授

望月 祐志 立教大学 理学部化学科 教授

山崎 清仁 OpenQL Project

廣川 真男 広島大学大学院 工学研究科 教授 (コメンテーター)

楊 天任 株式会社 QunaSys CEO (コメンテーター)

JST-CRDS 調査チームメンバー

木村 康則 JST CRDS システム・情報科学技術ユニット 上席フェロー

嶋田 義皓 JST CRDS システム・情報科学技術ユニット フェロー

辻 真博 JST CRDS ライフサイエンス・臨床医学ユニット フェロー 日江井 純一郎 JST CRDS 科学技術イノベーション政策ユニット フェロー

的場 正憲JST CRDS システム・情報科学技術ユニット フェロー宮下 哲JST CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット フェロー

鹿島 泰介 JST 未来創造研究開発推進部 主任調査員永井 諭子 JST 研究プロジェクト推進部 副調査役

藤田 維明 JST 監査・法務部 主任調査員

関係府省・機関

千嶋 博 内閣府 政策統括官(科学技術・イノベーション担当)付 政策企画調査官

菅野 普 内閣府 政策統括官(科学技術・イノベーション担当)付 上席調査員

龍 政彦 内閣府 政策統括官(科学技術・イノベーション担当)付 上席調査員

平山 雅章 内閣府 政策統括官(科学技術・イノベーション担当)付 上席科学技術政策フェロー

柳田 真利 内閣府 政策統括官(科学技術・イノベーション担当)付参事官(課題実施担当) 付 内閣府本府行政実務研修員

西山 崇志 文部科学省 科学技術・学術政策局 研究開発基盤課量子研究推進室 室長

三浦 昭彦 文部科学省 科学技術・学術政策局 研究開発基盤課量子研究推進室 科学技術・ 学術行政調査員

福井 義成 文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)付計算科学技術推進室 技術参与

山木 大輔 文部科学省 研究振興局 参事官(情報担当)付計算科学技術推進室 調查員

大洞 龍真 文部科学省 科学技術・学術政策局企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略 室 室長

鈴木 慎司 文部科学省 科学技術・学術政策局企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略 室 室長補佐

脇田 史城 文部科学省 科学技術・学術政策局企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略 室 専門職

宇藤 健一 文部科学省 科学技術・学術政策局企画評価課 新興・融合領域研究開発調査戦略 室 調査員

田中 伸彦 経済産業省 商務情報政策局 デバイス・情報家電戦略室 室長

千田 和也 経済産業省 商務情報政策局 デバイス・情報家電戦略室 課長補佐

鈴江 祥典 経済産業省 商務情報政策局 情報技術利用促進課 課長補佐

大嶋 洋一 新エネルギー・産業技術総合開発機構 IoT 推進部 統括主幹

竹上 嗣郎 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター 次長

伊藤 智 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター ユニット長

川上 駿 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター 職員

寳迫 巖 情報通信研究機構 未来 ICT 研究所 所長

仙場 浩一 情報通信研究機構 未来 ICT 研究所 フロンティア創造総合研究室 上席研究員

紺野 友彦 情報通信研究機構 ソーシャルイノベーションユニット知能科学融合研究開発推 進センター連携研究室

萬 伸一 日本工学アカデミー(日本電気株式会社 システムプラットフォーム研究所 主席 技術主幹)

水野 弘之 日本工学アカデミー (株式会社日立製作所 研究開発グループ 基礎研究センタ 主管研究長)

JST

曽根 純一 JST CRDS ナノテクノロジー・材料 上席フェロー

永野 智己 JST CRDS 総括ユニットリーダー・研究監

稲上 泰弘 JST プログラム戦略推進室 研究監

中田 希衣 JST 戦略研究推進部 グリーンイノベーショングループ 主査 藤井 新一郎 JST ERATO 中村巨視的量子機械プロジェクト 研究推進主任

(敬称略、所属・役職は2018年8月時点)

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

総括責任者 木村 康則 チームリーダー 嶋田 義皓 チームメンバー 鹿島 泰介 辻 真博 津田 憂子 永井 諭子 日江井 純一郎 福島 俊一 藤田 維明 的場 正憲 宮下 哲	上席フェロー フェロー 主任調査員 フェロー 副調査ロー フェロー 主任調査 フェロー フェロー フェロー	(システム・情報科学技術ユニット) (システム・情報科学技術ユニット) (未来創造研究開発推進部) (ライフサイエンス・臨床医学ユニット) (海外動向ユニット) (研究プロジェクト推進部) (科学技術イノベーション政策ユニット) (システム・情報科学技術ユニット) (監査・法務部) (システム・情報科学技術ユニット) (ナノテクノロジー・材料ユニット)
---	--	---

※お問い合せ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2018-WR-09

科学技術未来戦略ワークショップ報告書

みんなの量子コンピューター

~情報・数理・物理で拓く新しい量子アプリ~

2019年2月 February 2019 ISBN 978-4-88890-617-3

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 システム・情報科学技術ユニット Systems and Information Science and Technology Unit

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

東京都千代田区五番町7番地 〒102-0076

> 電話 03-5214-7481 (代表) ファックス 03-5214-7385

> > http://www.jst.go.jp/crds/

©2019 JST/CRDS

許可無く複写/複製することを禁じます。 引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission. Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

