### 事業項目4

# 量子・HPC連携システムを利用するモジュール型 量子計算ソフトウェアライブラリの研究開発

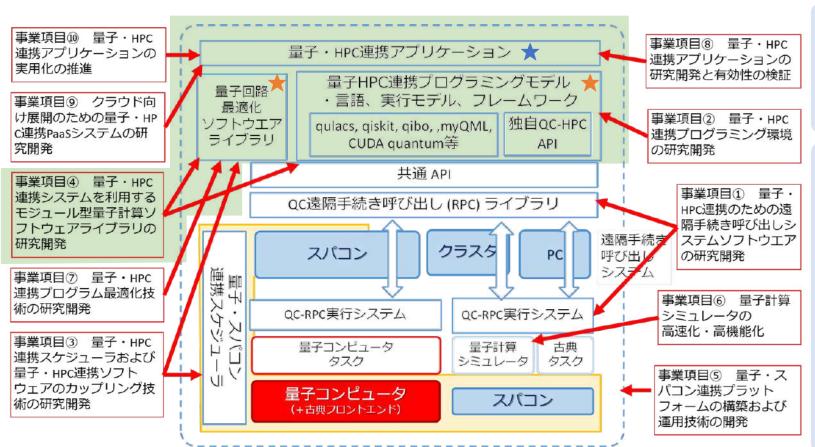
### 上田宏

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター



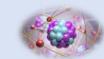
### 開発事項

### 【量子・HPC連携システムを利用するモジュール型量子計算ソフトウェアライブラリの研究開発】



★の呼び出し&利用に対応した プラットフォーム非依存型量子計 算ソフトウェア開発環境(QURI Patrs)を利用

★に資する4つのライブラリの開発



化学



物性/統計



機械学習



最適化

### 本機関の役割

量子・HPC連携アプリの充実化・ アプリ開発の敷居低下

#### JST共創の場形成支援プログラム 量子ソフトウェア研究拠点

#### 拠点ビジョン

#### 量子ソフトウェア共創プラットフォーム が拓く持続可能な未来社会の実現

#### ターゲット1

量子ソフトウェアによる 社会課題解決基盤の確立



#### ターゲット2

量子ソフトウェアの社会実装と普及



近未来のNISQの範囲で量子科学に基づくSDGs9(産 業と技術革新の基盤)を目指し、民間企業参入を促す

産業規模の大きい金融・化学等の分野で量子ソフトウェ アを社会実装し、これを通して人材を育成

窒素固定や光合成の解明を可能にする基盤技術の開発

NISQマシンだけでなく誤り耐性量子コンピュータの性 能を引き出す基盤ソフトウェアとアルゴリズムを開発

#### ターゲット3

量子ソフトウェア開発プラット フォームの構築

自前の開発環境を整備し国際競争力を確保

自前の量子ハードウェア・ミドルウェア・クラウド環境を 構築し、シミュレータや外部量子コンピュータ・サービス ともシームレスに利用できるプラットフォームの実現

ш 課題4

2018年 スタートアップ

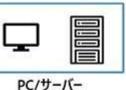


2021年 スタートアップ

QuEL, Inc.

·········· 量子・スパコン連携プラットフォーム ·······

古典コンピュータ







スーパーコンピュータ

モジュール型量子計算 ソフトウェアライブラリ 量子・HPC連携プログラム最適化技術 (エラー緩和、回路最適化)

量子·HPC連携 システムソフトウェア

遠隔手続き呼び出し 連携スケジューラ 量子・HPCプログラミング環境

量子コンピュータ・量子計算シミュレータ



大規模シミュレータ 量子計算シミュレータ (スパコン・富岳)

量子計算シミュレータ





超伝導型 量子コンピュータ

イオントラップ型 量子コンピュータ

量子コンピュータ

### 研究・開発体制

#### 理学研究科



**竹森 那由多** 准教授



**高倉龍** 特任助教

★:研究分担者 ▲:プロジェクト雇用研究員

量子情報・量子生命研究センター



上田 宏 ★ 准教授 研究統括 & ソフトウェア開発



**宮腰 祥平 ▲** 特任研究員 ソフトウェア開発



**水上 渉** 教授



吉田 悠一郎 特任研究員



**杉本 貴則** 特任准教授

化学

物性/統計



**森 俊夫** 特任研究員



**束野 仁政** 特任研究員

機械学習 最適化

#### 基礎工学研究科



**藤井 啓祐** 教授



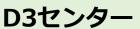
**御手洗 光祐** 准教授



**箱嶋 秀昭** 助教



**黄海 仲星** 特任助教





**伊達 進** 教授



**髙橋慧智** 准教授



計算機システム・ネットワーク

**吉田薪史** ▲ 特別研究員S

アプリ 開発& 運用







と連携



**中村祐一** 招聘教授

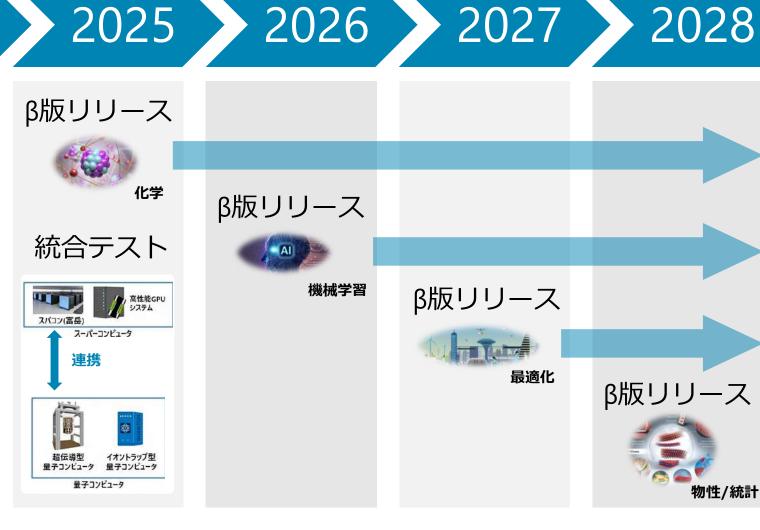


**細見岳生** 招聘准教授

### 開発スケジュール

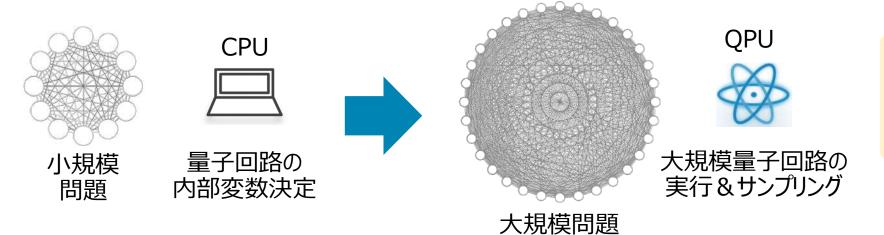
FY 2023 開発アプリ の選定 化学 機械学習 最適化 物性/統計





## 最適化

• Fixed-angle QAOA (FA-QAOA) PRA 104, 052419 (2021).



QSRHの量子ソフトウェア 勉強会で導入済み

テスト模型: ランダムイジング模型 QUBO/HUBO模型

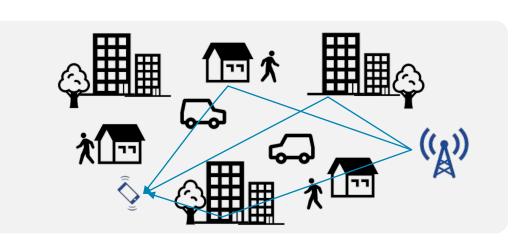
QURI Patrs化した ライブラリを準備済み

・ ソフトバンク 先端技術開発部との連携を実施中

ターゲット: 電波伝搬解析 (今井ら, 2021)

解決すべき課題:量子実機での大規模系への

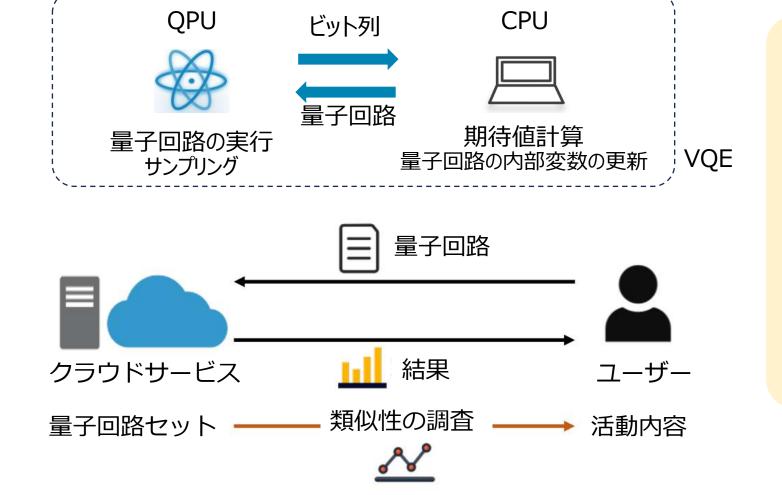
アクセス



### 機械学習



・ 変分量子固有値ソルバー(VQE)で生成した機械学習のための量子回路セット



中山ら, arXiv:2302.09751

#### 6種類のテスト模型

- ・(フラストレート)磁性模型
- 強相関電子系
- ・トポロジカル絶縁体模型



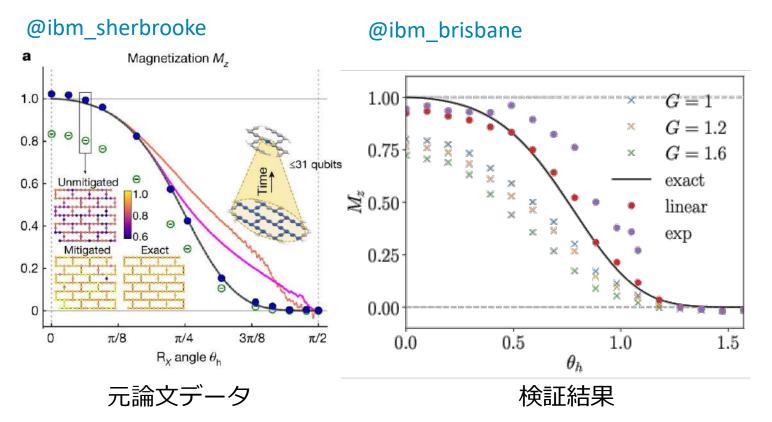
10種類の変分量子回路仮設

量子状態のFidelityという観点から 各量子回路の分類が可能

> QURI Patrs化した ライブラリを準備済み

# 物性/統計

- 横磁場Ising模型の量子ダイナミクス Nature 618, 500 (2023).
  - ・量子ユーティリティーのさきがけ
  - ・シンプルな磁性模型の実時間ダイナミクス

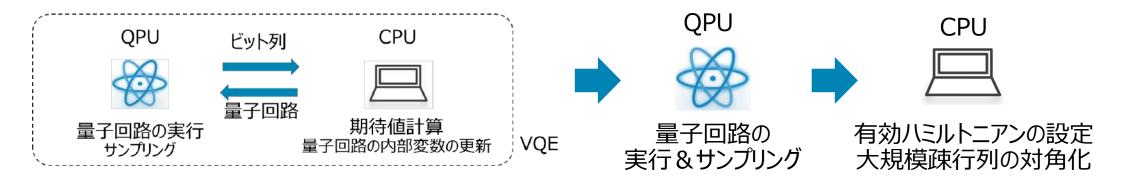


**Demonstration for Quantum Dynamics** Setup Configuration from sources, qubitnetwork import QubitNetwork from sources, qubitnetwork import QubitNetworkVisualization クラス QubitNetwork では各量子計算実機のqubitの位置を記録した devices, ison を読み込んでいて、次のようにすることで、その分布を出力すること QubitNetworkVisualization の plot にある mode オプションは内部的に指定してあるサイトごと、もしくはリンクごとの色分けを可視化するオプシ 3ンになっており、時間発展演算子のSuzuki-Trotter分解を行う際に利用する。 QubitNetwork 内の construct の status オプションは回路を構築する際に status=8 は続ませないように指定するフラグ。 QubitNetwork 内の construct\_latticeでは ["square", "triangle", "honeycomb"] のいずれの中から格子構造を生成する。 on - QubitNetwork() on construct on device(basis="ibm193" # qu. construct on lattice(7, "lieb", onv = QubitNetworkVisualization() 0000000000000

QURI Patrs化した ライブラリを準備済み

## 化学 🐠

• 量子選択配置相互作用法(QSCI) arXiv:2302.11320



Sample-based quantum diagonalizaion (SQD) [IBM-RIKEN, 2024] のベースとなるアルゴリズム

#### テスト模型

・水素鎖(計算基底:STO-3G)

#### 主な開発内容:

- ① 状態の量子回路化パートの高度化 (必ずしもQPUを使う必要はない)
- ② 対角化パートのMPI並列化
- ③ QURI Parts化

#### ① 開発済み

T. Shirakawa, H. Ueda & S. Yunoki, Phys. Rev. Res. **6**, 043008 (2024). 宫腰, 杉本, 上田, 17pPSB-9, 日本物理学会 第79回年次大会, 北大, 2024.

②, ③ 現在開発中2025年3月を目途に開発完了

各種ライブラリの富岳上での実行に順次着手

## ライブラリ一覧(開発中も含む)

