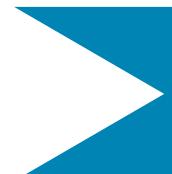


事業項目 4

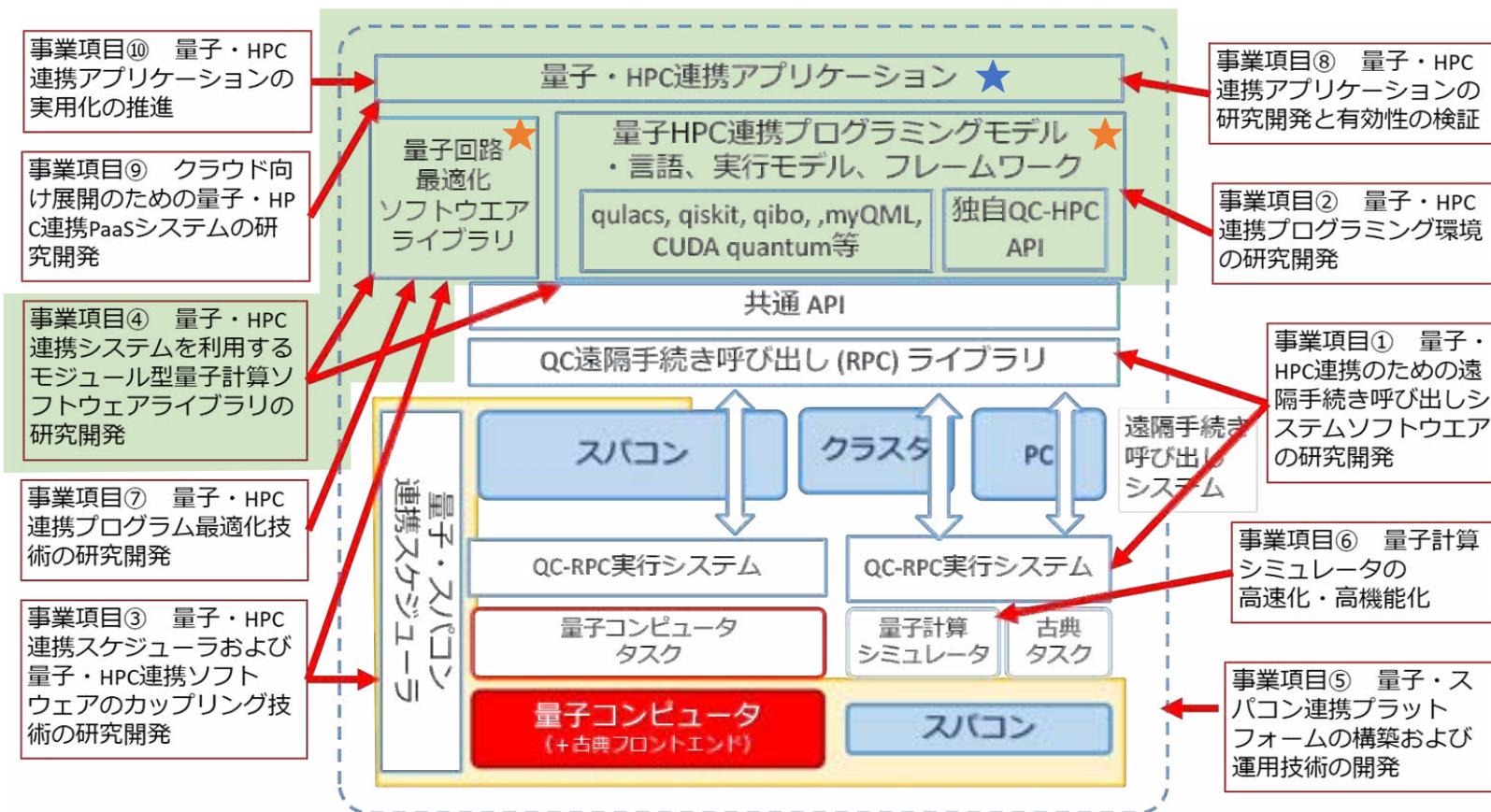
量子・HPC連携システムを利用するモジュール型 量子計算ソフトウェアライブラリの研究開発

上田宏

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター



【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

ユーザー数の拡大
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

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
能を引き出す基礎ソフトウェアとアルゴリズムを開発

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

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

目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

2018年
スタートアップ
 QunaSys
Quantum Native Systems
2021年
スタートアップ
QuEL, Inc.

課題1 課題2 課題3 課題4 課題5 課題6 課題7

量子・スパコン連携プラットフォーム

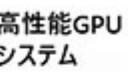
古典コンピュータ



PC/サーバー



スーパーコンピュータ
スパコン(富岳)



高性能GPU
システム

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)

量子コンピュータ・量子計算シミュレータ



量子計算シミュレータ
大規模シミュレータ
(スパコン・富岳)



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

量子計算シミュレータ

**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

研究・開発体制 (2025/12現在)

★ : 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



化学

物性/統計

基礎工学研究科



量子コンピューティング



アプリ
開発&
運用



SoftBank



と連携

理学研究科



竹森 那由多
准教授



高倉龍
特任助教

D3センター 計算機システム・ネットワーク



伊達 進
教授



高橋慧智
准教授

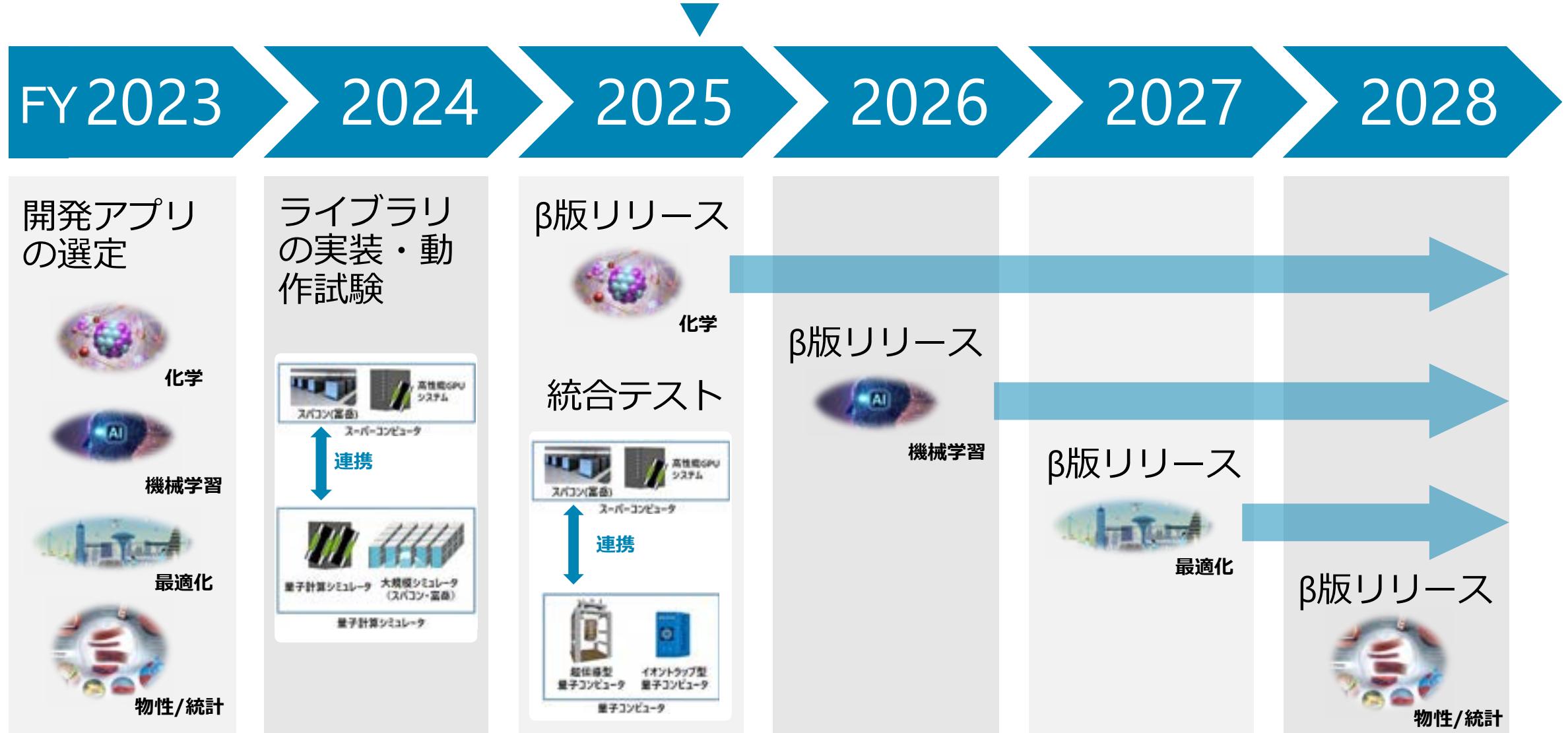


中村祐一
招聘教授



細見岳生
招聘准教授

開発スケジュール



2025年度マイルストーンと進捗状況

6

マイルストーン：

- ・化学分野のライブラリのベータ版のリリース
(HPC量子ハイブリッド環境におけるライブラリの動作確認)

進捗状況：

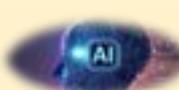


化学

量子選択配置相互作用法 (QSCI) を利用したベンチマーク計算に関するKPIを達成

チュートリアル、ドキュメントの作成

本日の話題



機械学習

量子優位なタスクの提案 (Morohoshi et al., arXiv:2504.16370.)

チュートリアル、ドキュメントの作成 [VQE生成量子回路データセットの分]



最適化

量子コンピューティングにおける組合せ最適化問題の分割統治的解法 (出願済)

ユーティリティスケールでの利用を目指したアルゴリズム設計を開始



物性/統計

変分量子特異値分解法の高度化 (Miyakoshi et al., in preparation.)

DMRGベースの量子回路最適化手法の基盤コード群の整備

KPI一部抜粋 (2023年作成)

7

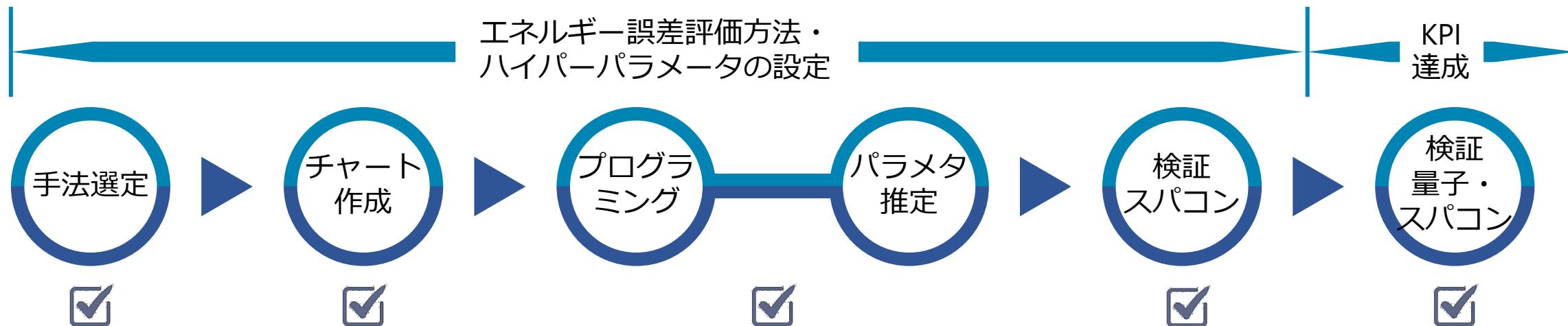
中間

量子・スパコン連携プラットフォームの有効性を検証するアプリケーションとして、新材料や化学反応の設計に不可欠な量子多体系の低エネルギー状態の計算を標的とする。現行の古典的計算リソースだけでは厳密な計算が困難な、STO-3G基底に基づく26サイトの水素原子系（52量子ビット系相当）の基底状態を、24時間以内にエネルギー誤差0.1Ha以内で求めるために必要な要件を定義する。これには、エネルギー誤差の評価方法と、該当アプリケーションに特有のハイパーパラメータの設定値の特定が含まれる。

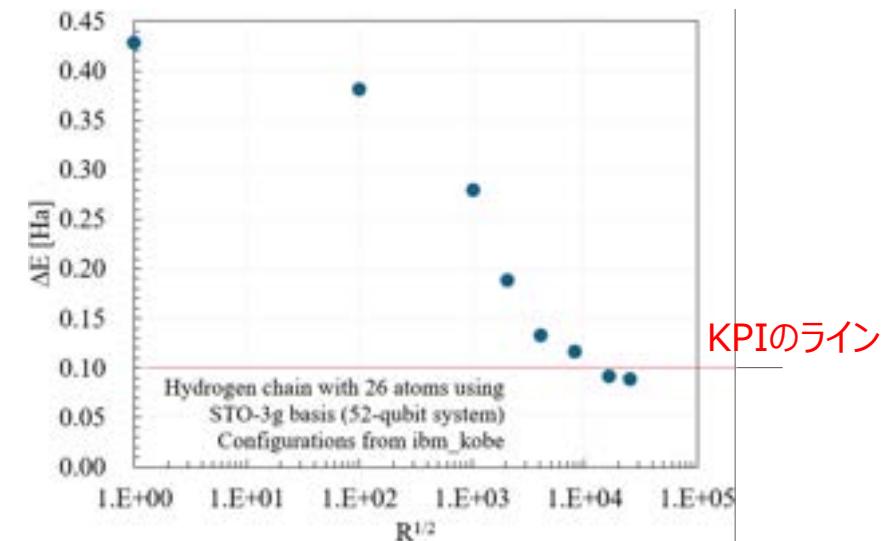
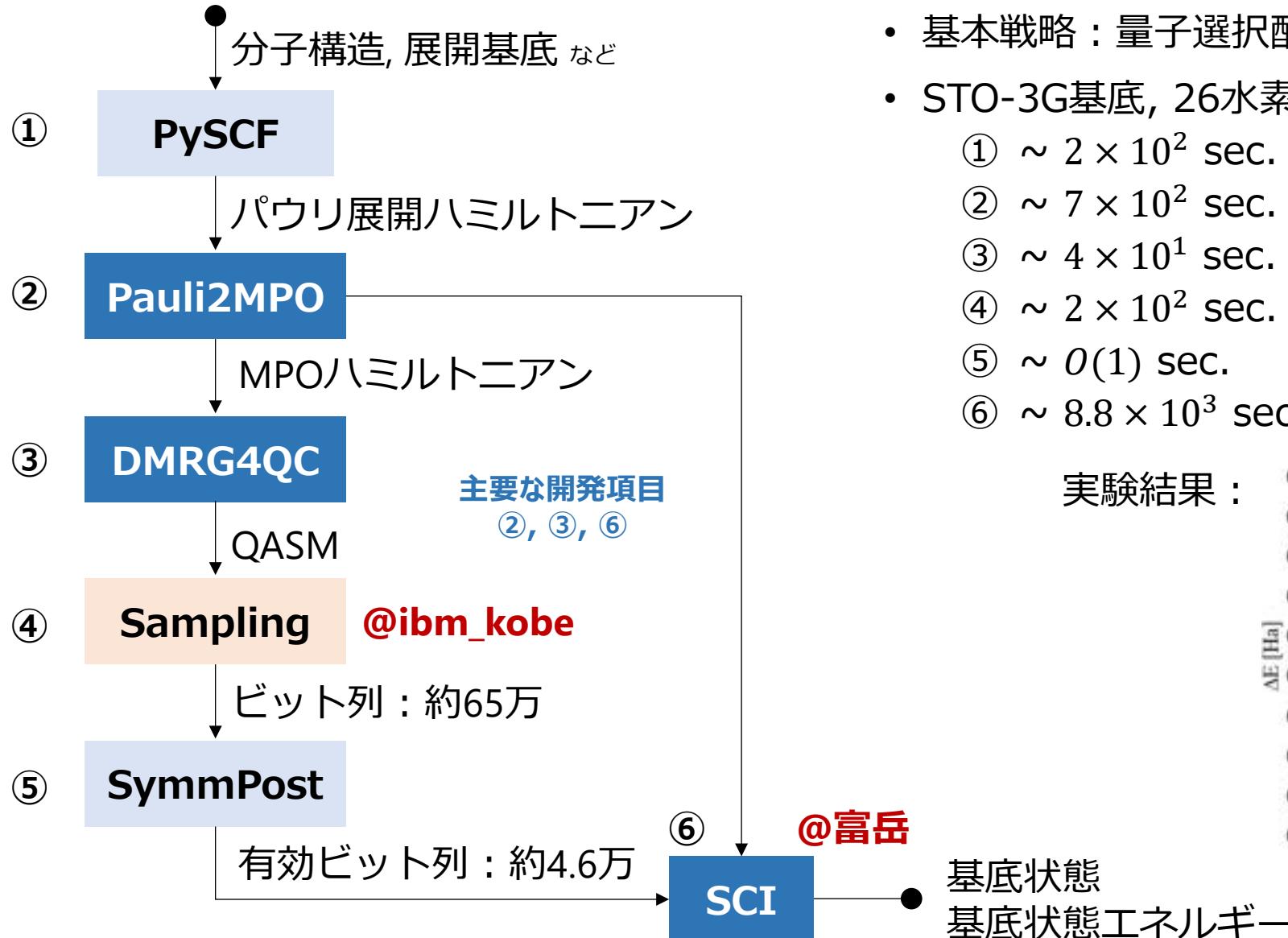
最終

上記中間KPIの検証を連携プラットフォーム上で行う。

作業フロー



本KPI達成のワークフロー概略



ライブラリ化の進捗

- 各Workflow(Pauli2MPO+DMRG4QC, Sampling, SCI)をPythonで実行できるライブラリを実装
 - Prefect; PSI/J; コンテナを用いて実行できる
- localでDockerを用いた動作確認が完了
 - 富岳でも少しの変更で実行できる見通し
 - 実行コード例を以下に示す
- ユーザー向けチュートリアルを作成(一部を右画像に示す)

今後の方針

量子・スパコン連携プラットフォーム上での動作チェックを行う

実行コード例

```
## workflow1を実行(「物理系の定義と量子回路の作成のための計算」)
singularity exec --bind "$output_path":$data_path ~/nedo_chem_app.sif uv run python3 $program_path/workflow1_local_run.py --input_xyz $input_xyz --julia_target $data_path
## workflow2を実行(「量子回路サンプリングワークフローの実行」)
singularity exec --bind "$output_path":$data_path ~/nedo_chem_app.sif uv run python3 $program_path/workflow2_local_run.py --julia_target $data_path
## workflow3を実行(「SCIワークフローの実行」)
singularity exec --bind "$output_path":$data_path ~/nedo_chem_app.sif uv run python3 $program_path/workflow3_local_run.py --julia_target $data_path
## workflow1-3を一気貫通貫通で実行
singularity exec --bind "$output_path":$data_path ~/nedo_chem_app.sif uv run python3 $program_path/workflow_all_local_run.py --input_xyz $input_xyz --julia_target $data_path
```

QSCIによる量子化学計算のチュートリアル

このチュートリアルでは、QSCI法を用いた量子化学計算のワークフローを初心者向けに解説します。QSCI法は、Variational Quantum Eigensolver (VQE) と呼ばれる手法と組み合わせて使われます。まず、電子状態を量子計算機上にVQEを用いて準備します。その後、量子計算機から重要な電子配置をサンプリングします。今回このVQEは、Tensor Network法と呼ばれる高精度で高速なアルゴリズムを用いて準備します。このサンプリングされた計算基底 (Computational Basis) から、ハミルトニアン行列を作成し、Fortranプログラムでこの行列を対角化することで、系のエネルギーを入手できます。

1. 準備とインストール

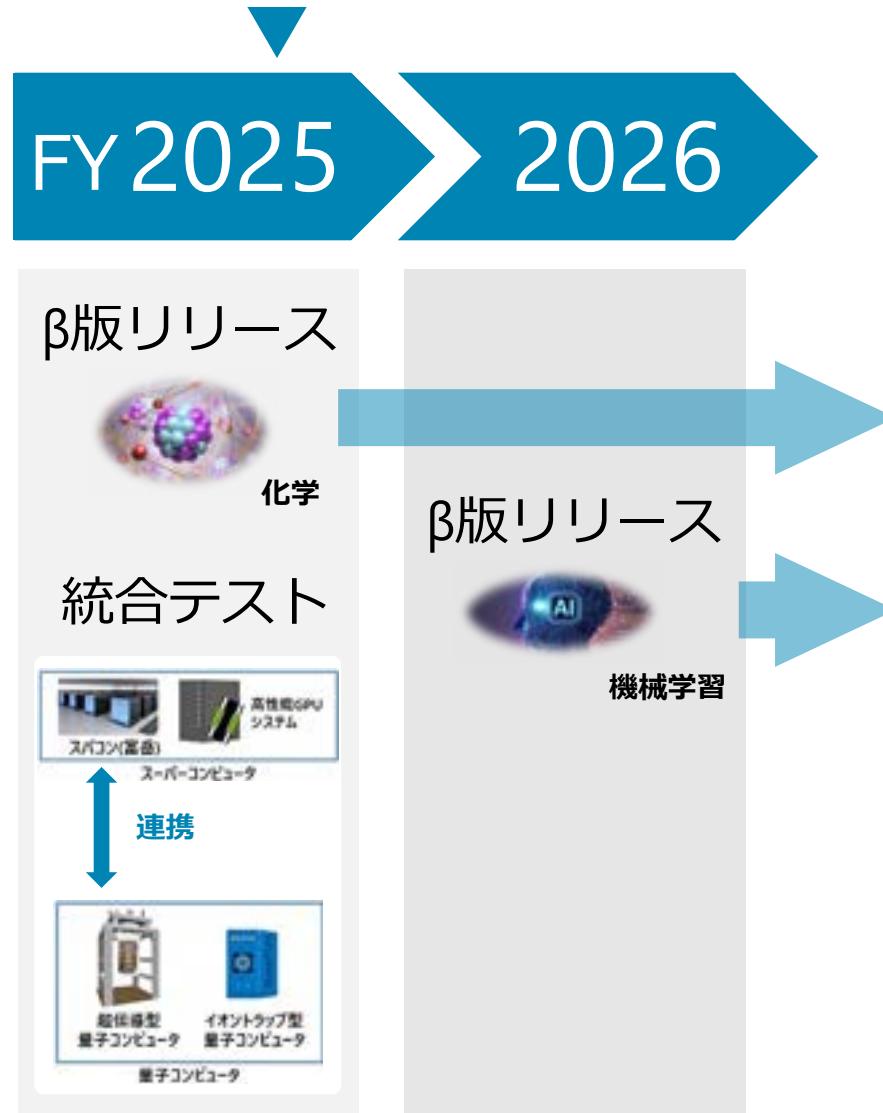
このチュートリアルは、Python・Julia・Fortran・QURI SDK・PySCF・Qiskitなど複数のライブラリを連携させて動作します。まずは実行に必要な環境を準備しましょう。Dockerfileから作られるsingularityコンテナを用いて環境を構築できます。まず、singularityコンテナを作成する準備として、Dockerコンテナを作成します。JHPC-quantum-project4のフォルダ中に nedo_chem_tutorials というフォルダがあるのでcdで移動します。既ち、以下のコマンドを実行してください。

```
# ここでDockerのイメージ作成方法を解説
cd nedo_chem_tutorials
hash make_container.sh
```

このコマンドを実行することで、必要なライブラリがインストールされたDockerコンテナが作成されます。このDockerコンテナから、Singularityコンテナを作成します。以下のコマンドを実行してください。

今後の開発スケジュール

10

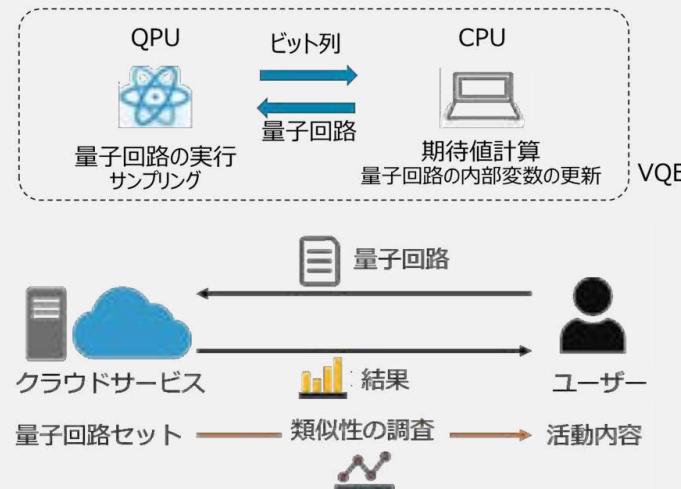


当初の計画内容

- ・ 化学分野のライブラリ化の最終調整
- ・ 機械学習分野のライブラリ化

- ・ 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
 - ・ 強相間電子系
 - ・ 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



新規アルゴリズム開発【優位性を目指して】

最適化

2024年度 JHPC-quantum シンポジウム資料より抜粋

計画を超えた挑戦的内容



最適化