

事業項目 4

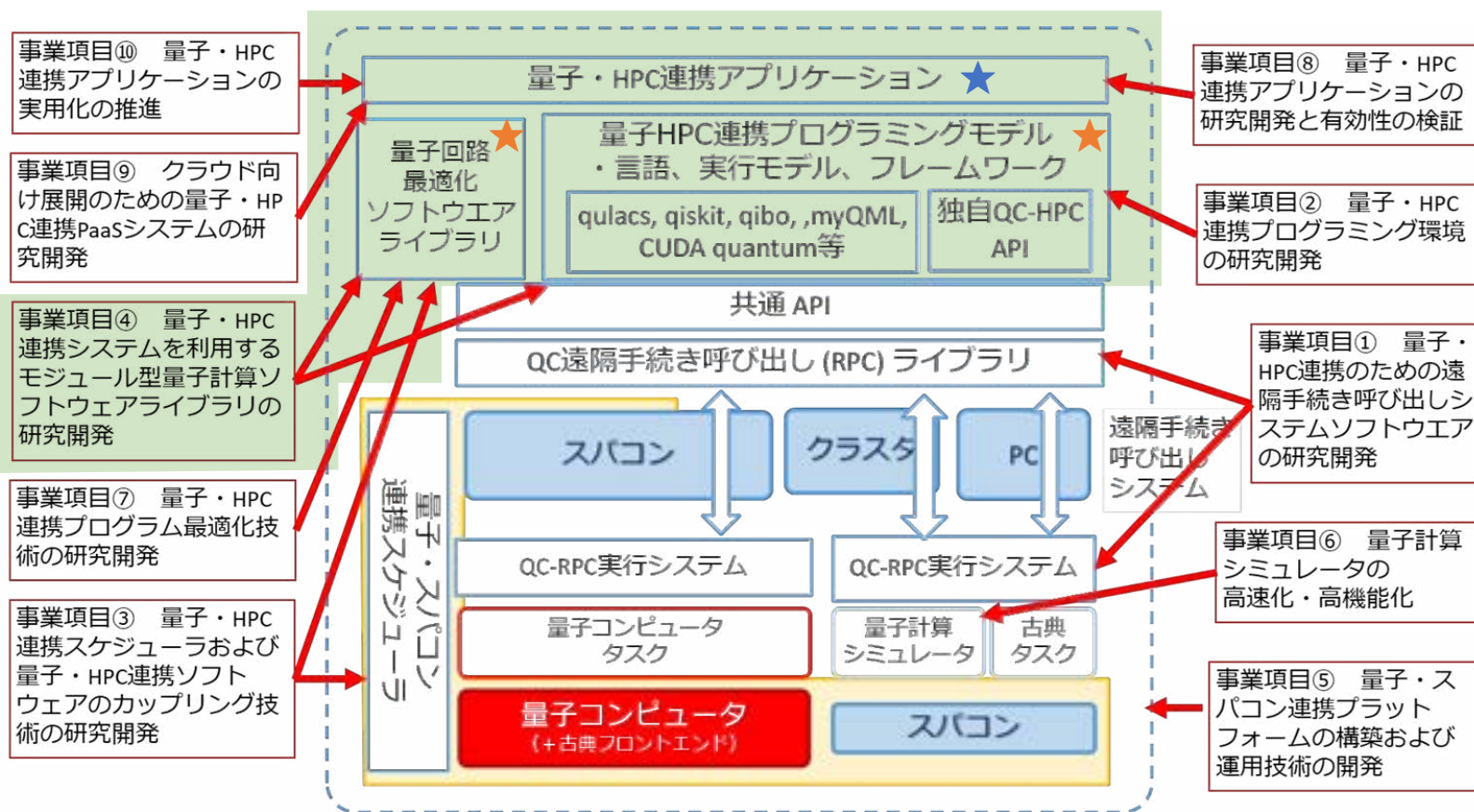
# 量子・HPC連携システムを利用するモジュール型 量子計算ソフトウェアライブラリの研究開発

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



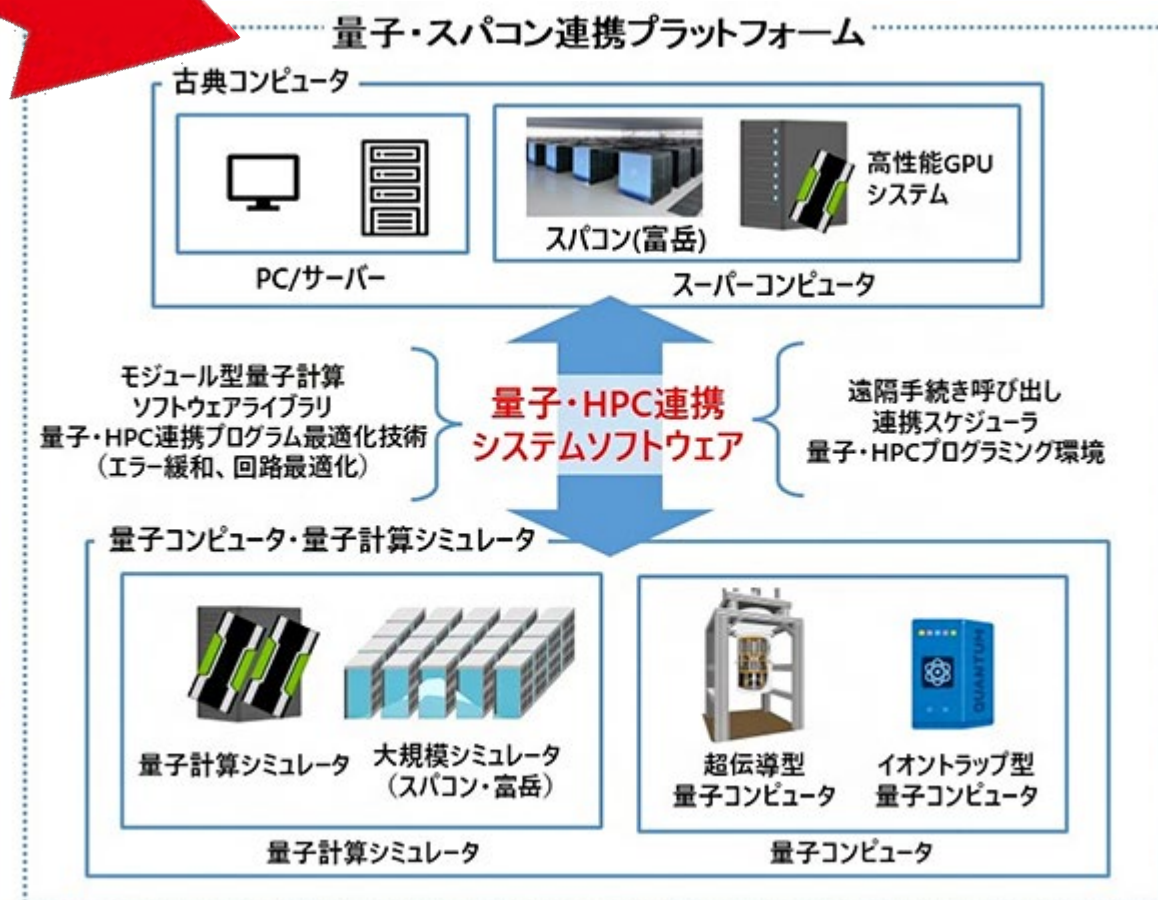
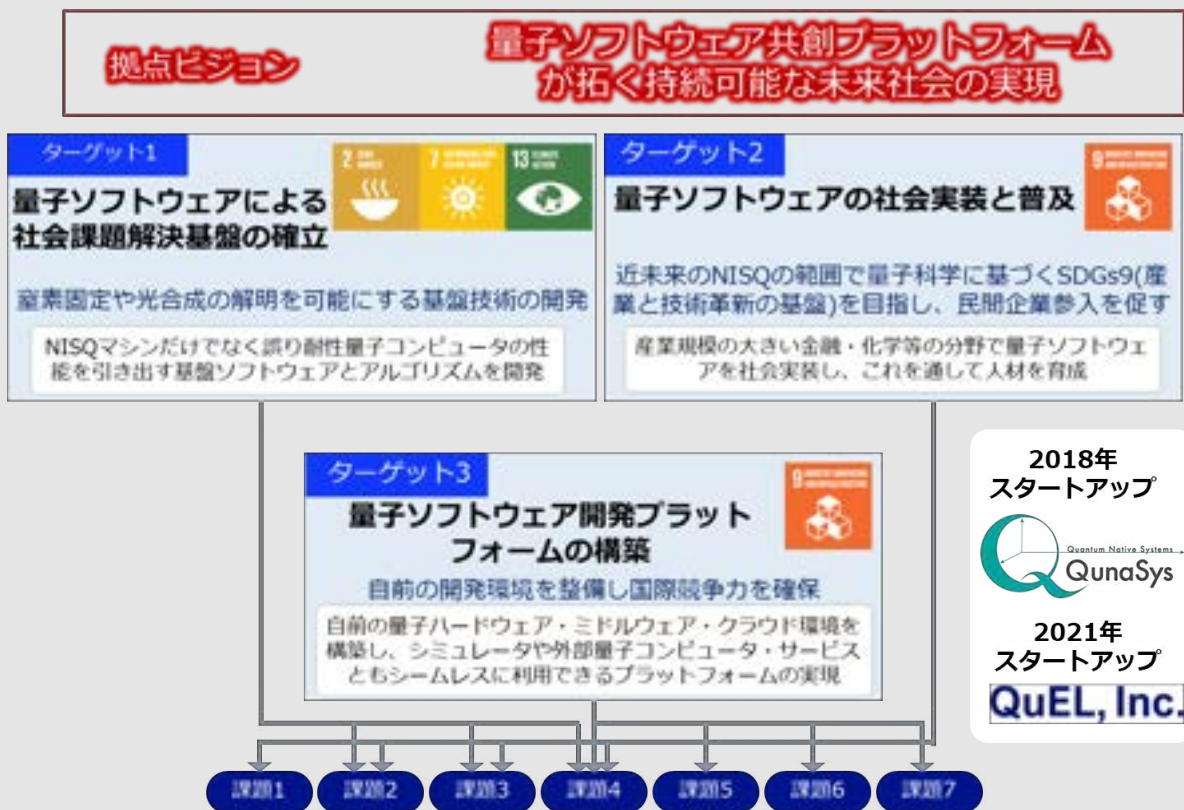
機械学習



最適化

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



# 研究・開発体制（2025/12現在）

4

★：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  
特任助教



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

## 量子コンピューティング



藤井 啓祐  
教授



箱嶋 秀昭  
助教



御手洗 光祐  
准教授



黄海 仲星  
特任助教

## D3センター 計算機システム・ネットワーク



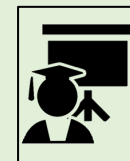
伊達 進  
教授



高橋慧智  
准教授



中村祐一  
招聘教授



細見岳生  
招聘准教授

アプリ  
開発 &  
運用

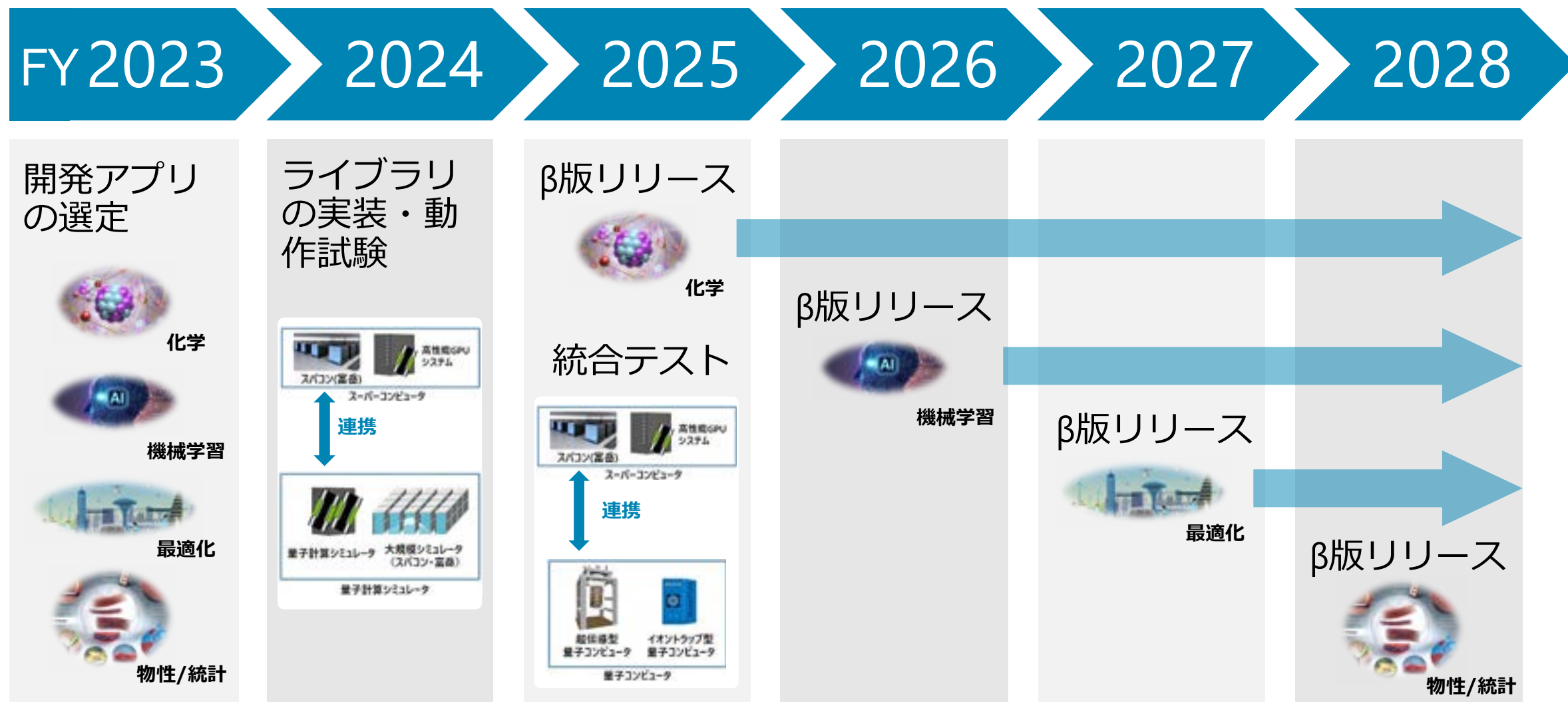


SoftBank



と連携





# 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

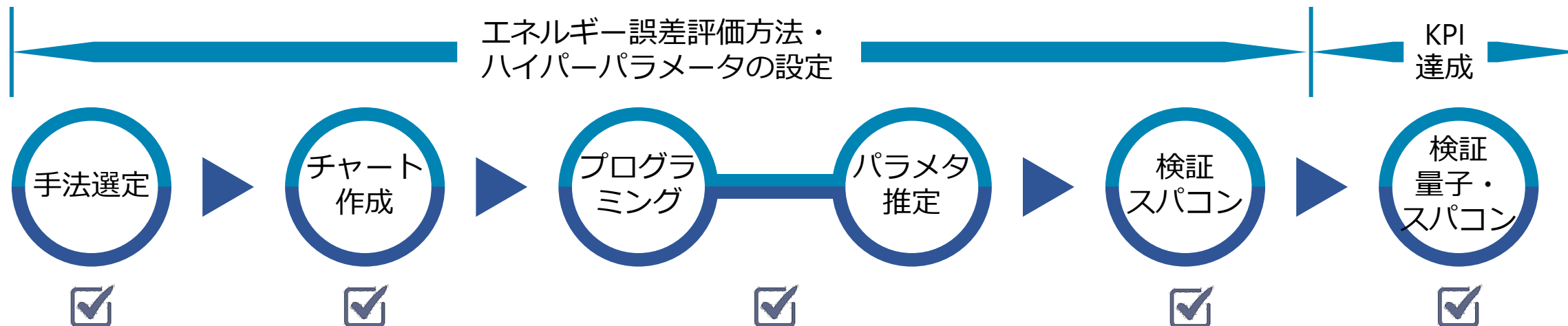
変分量子特異値分解法の高度化 (Miyakoshi et al., in preparation.)

DMRGベースの量子回路最適化手法の基盤コード群の整備

**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。

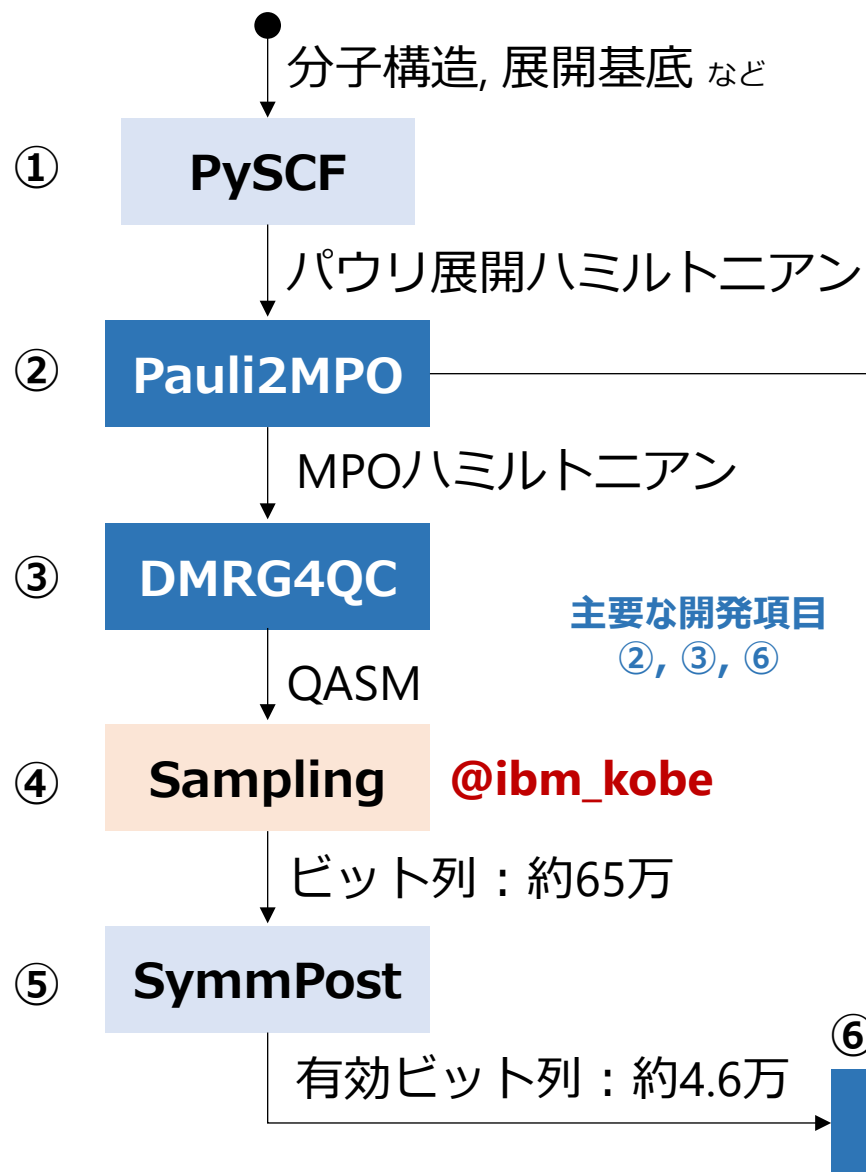
**最終** 上記中間KPIの検証を連携プラットフォーム上で行う。

## 作業フロー



# 本KPI達成のワークフロー概略

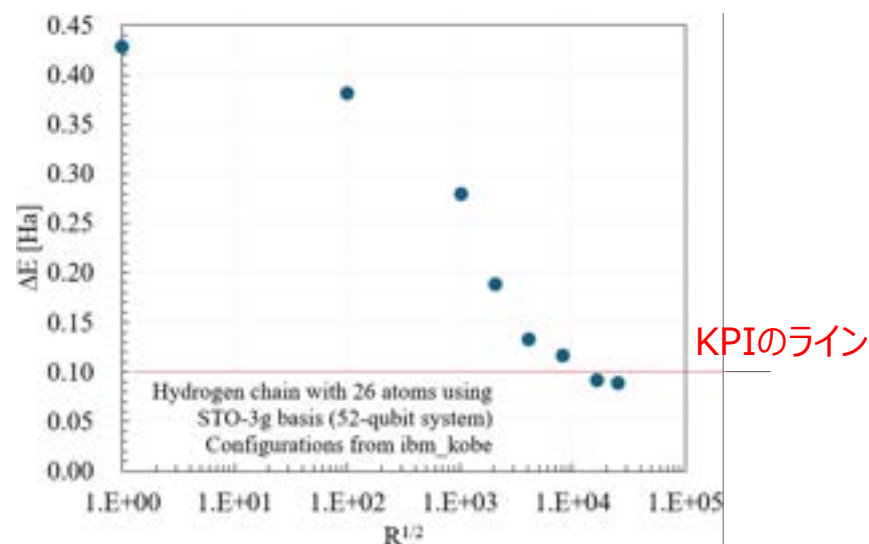
8



- 基本戦略：量子選択配置相互作用法（QSCI） arXiv:2302.11320
- STO-3G基底, 26水素原子鎖の場合の計算時間の目安
  - ①  $\sim 2 \times 10^2$  sec.
  - ②  $\sim 7 \times 10^2$  sec.
  - ③  $\sim 4 \times 10^1$  sec.
  - ④  $\sim 2 \times 10^2$  sec.
  - ⑤  $\sim 0(1)$  sec.
  - ⑥  $\sim 8.8 \times 10^3$  sec. 【625ノード並列】

計算のボトルネック

実験結果：





- 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、量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・QURP 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。  
MPC-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。  
即ち、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  
bash 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。

FY2025

2026

β版リリース



化学

統合テスト



高性能GPUシステム

連携

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

β版リリース



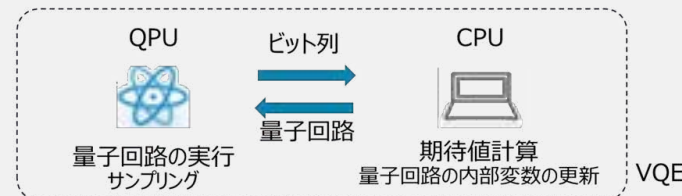
機械学習

## 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
- ・ 強相関電子系
- ・ トポロジカル絶縁体模型

X

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

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

新規アルゴリズム開発【優位性を目指して】