

量子コンピューターの事業での活用に向け、 慶應義塾大学と共同研究を開始

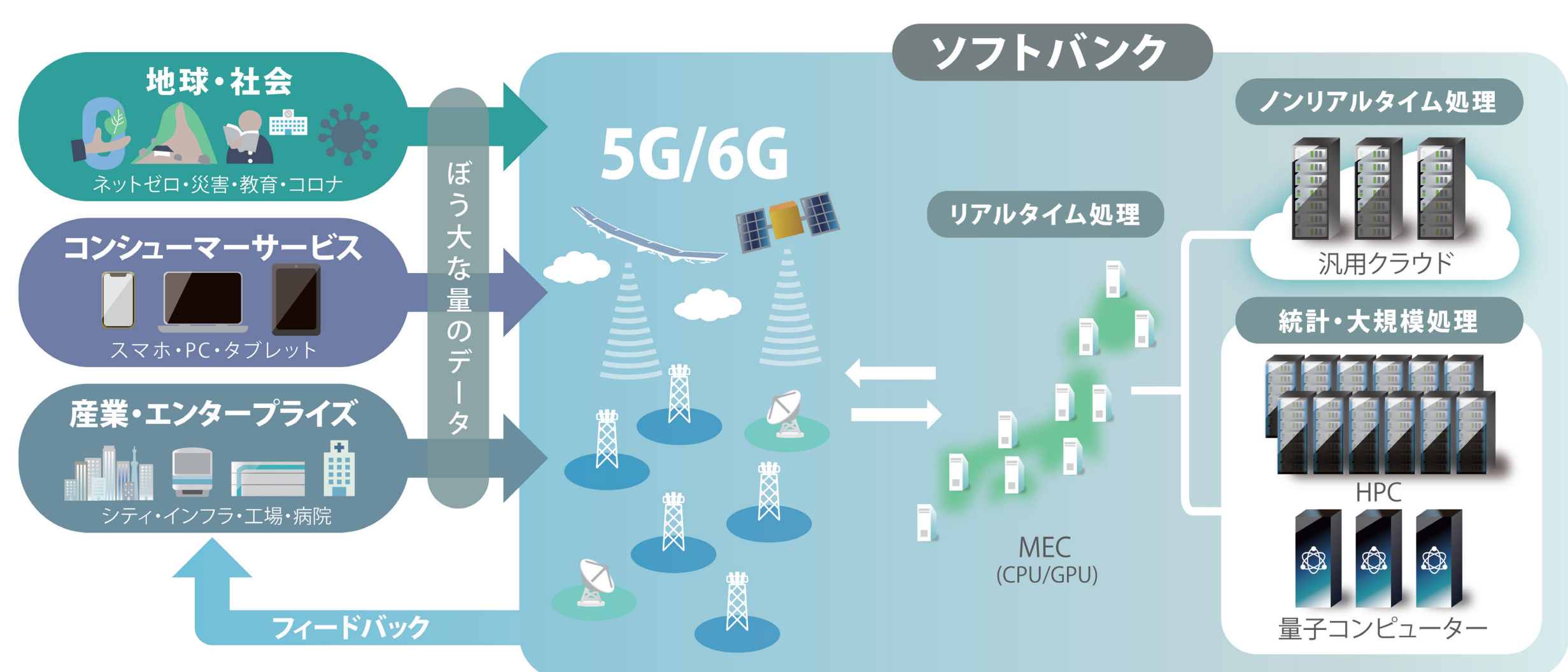
原子核の量子力学的な効果を量子コンピューター上で
シミュレーションし、ユースケースを検証

社会実装に向けたユースケース検証

分子や原子の振る舞いを量子力学的な枠組みで解析する量子化学の分野における研究を行う。これは、量子コンピューター自体が量子力学的であるため、量子力学的な挙動のシミュレーションにおいて優位性があるという可能性があるためである。

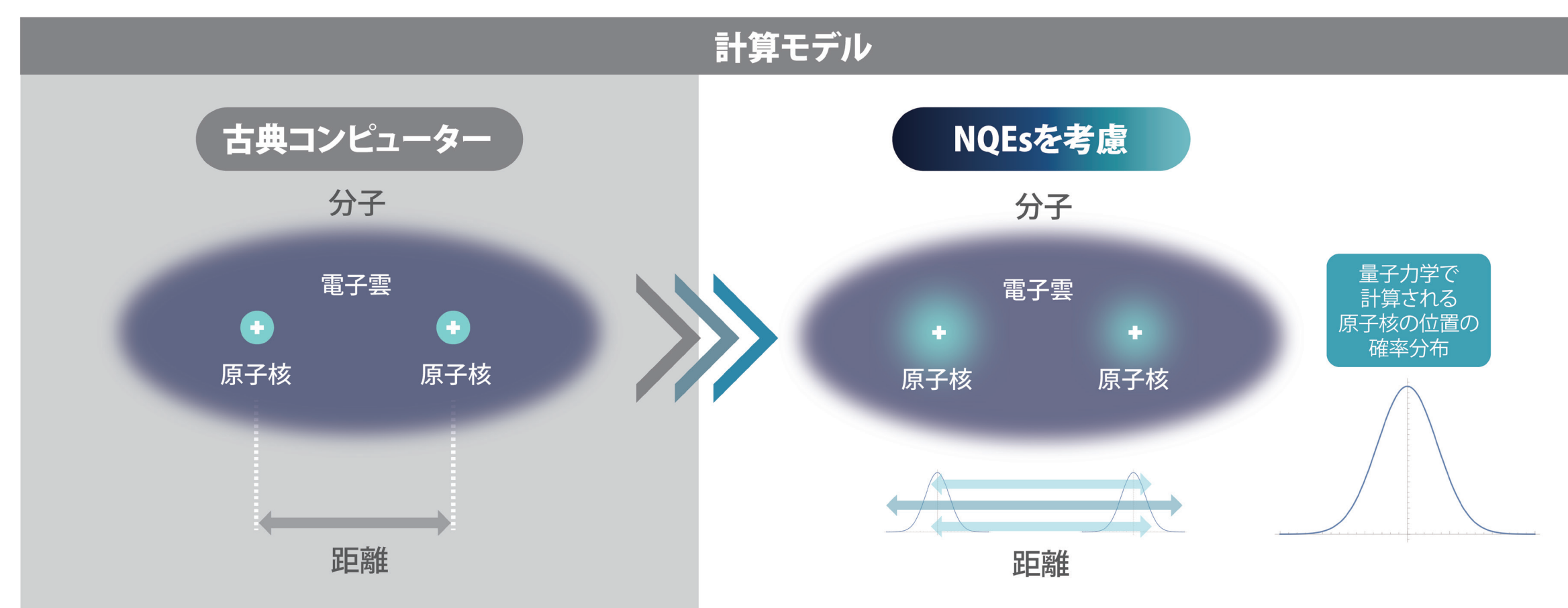
NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum: ノイズがある中規模の量子コンピューター) 量子コンピューターで、化学現象のメカニズムと、それに基づく社会実装に向けた NISQ のユースケースを検証する。

将来的には量子コンピューターの社会実装に貢献

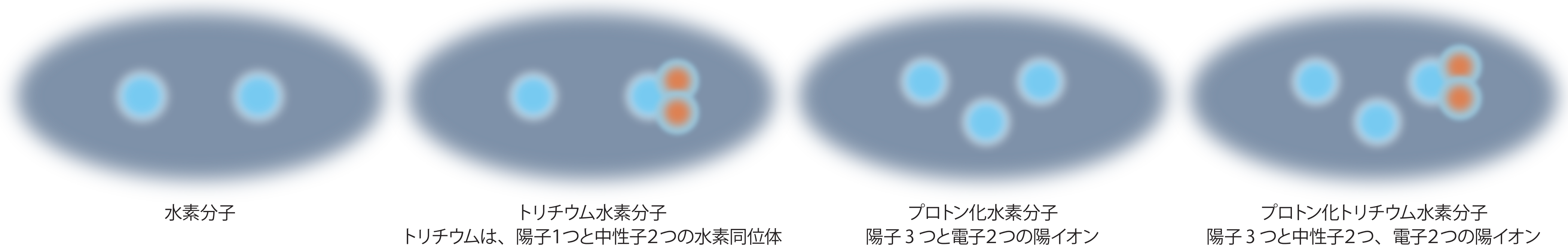


共同研究の概要 - NQEs を考慮した分子シミュレーション -

古典コンピューターを用いた分子レベルのシミュレーションの多くは、原子核の量子力学的な振る舞いや電子と原子核の間の相互作用を現実的な時間・負荷で計算できないため、原子核を電子と原子核が分離独立する古典粒子として計算されてきた。しかし、小さく質量が軽い軽原子を扱う場合、この量子力学的な効果 (NQEs: Nuclear Quantum Effects) を無視することで誤差が大きく表れるため、NQEsの考慮が必要になる。



本研究では、水素分子 (H_2)、トリチウム水素分子 (HT)、プロトン化水素分子 (H_3^+)、プロトン化トリチウム水素分子 (H_2T^+) の基底状態 (エネルギーが低く安定した状態) をシミュレーターと量子コンピューター実機で計算する。



今回の共同研究によって NISQ 量子コンピューター上で NQEs を考慮できることが実証されれば、精度が高いシミュレーションが可能となり、新薬や新素材の開発をはじめとするさまざまな分野で革新的な発展が期待できる。

SoftBank 先端技術研究所

量子コンピューターによる AIアクセラレーションに向けて

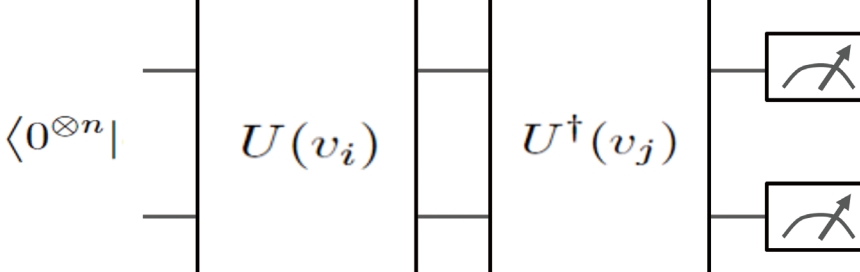
機械学習における超高次元時空間特徴量処理 ～ 量子カーネルと量子ダイナミクスについて ～

量子カーネル - 高次元な量子特徴量空間による表現力を活用 -

機械学習におけるカーネル空間 *1 を、量子コンピューターで計算することにより、古典コンピューターでは計算できないような量のデータ間距離を、効率的に扱うことが可能になる。

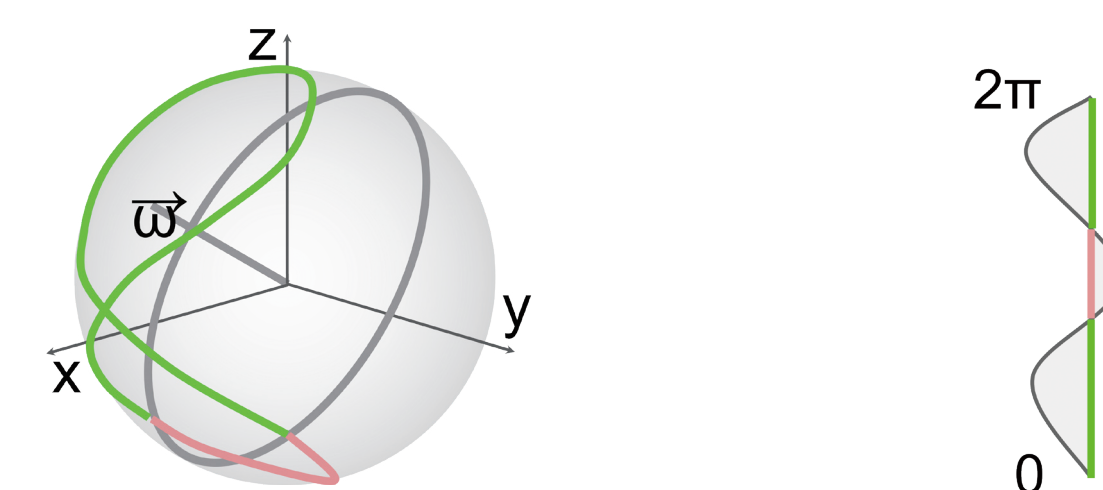
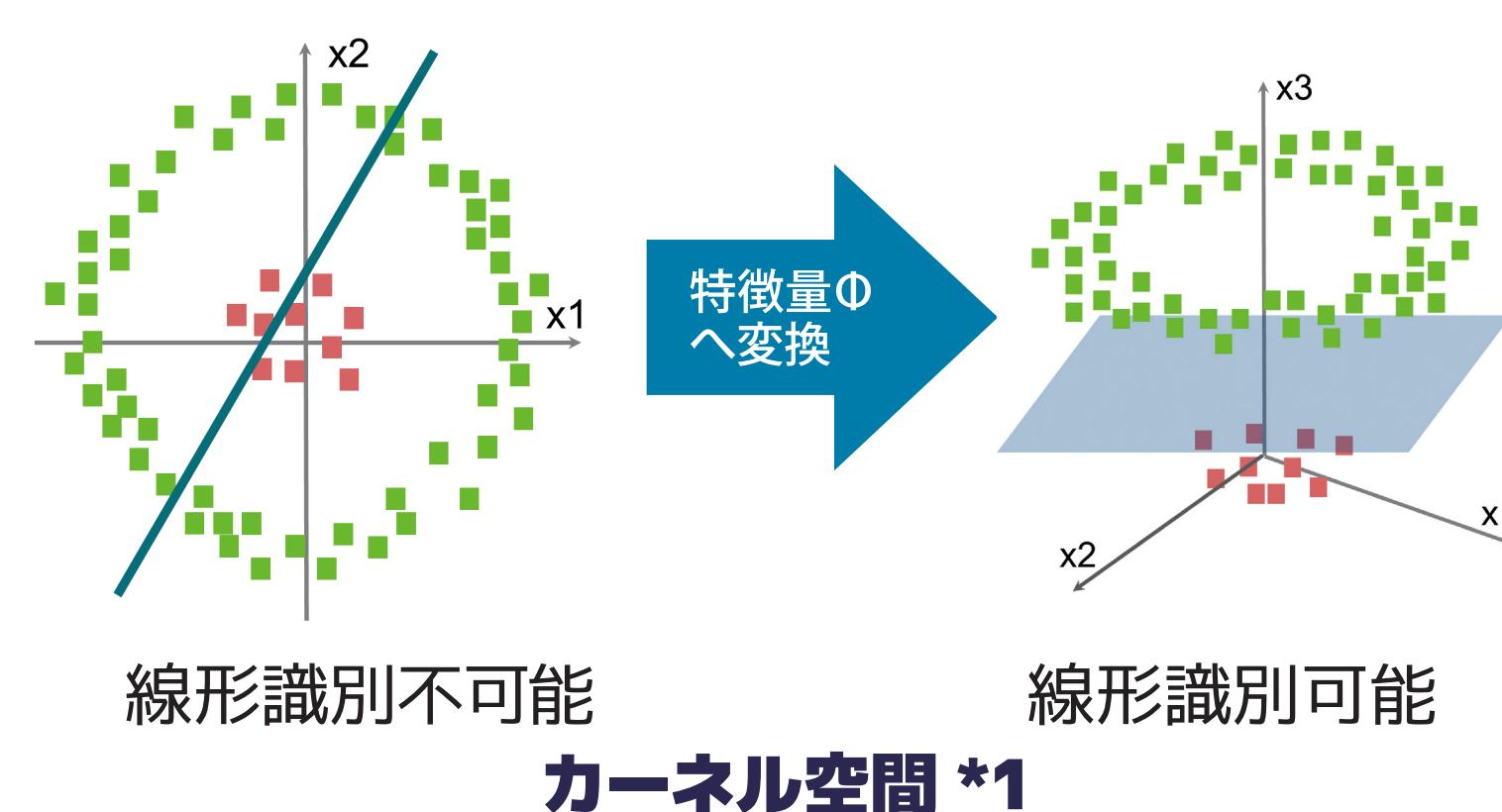
量子カーネル法による機械学習

入力データ v_i, v_j に対する内積を、量子回路 *2 で計算することにより得られるグラム行列 $k(v_i, v_j)$ を用いて量子カーネル *3 を作成する。作成したカーネルを用いてサポートベクタマシン等のモデルにより分類・回帰等の識別問題を行うことができる。

$$k(v_i, v_j) := |\langle \psi(v_i) | \psi(v_j) \rangle|^2$$
$$= |\langle 0^{\otimes n} | U^\dagger(v_j) U(v_i) | 0^{\otimes n} \rangle|^2$$


量子カーネル法における内積計算および 2-qubit 量子回路 *2

参考文献: V Havlicek, AD Córcoles, K Temme, AW Harrow, JM Chow, JM Gambetta, 'Supervised learning with quantum enhanced feature spaces', Nature 567 (7747), 209--212

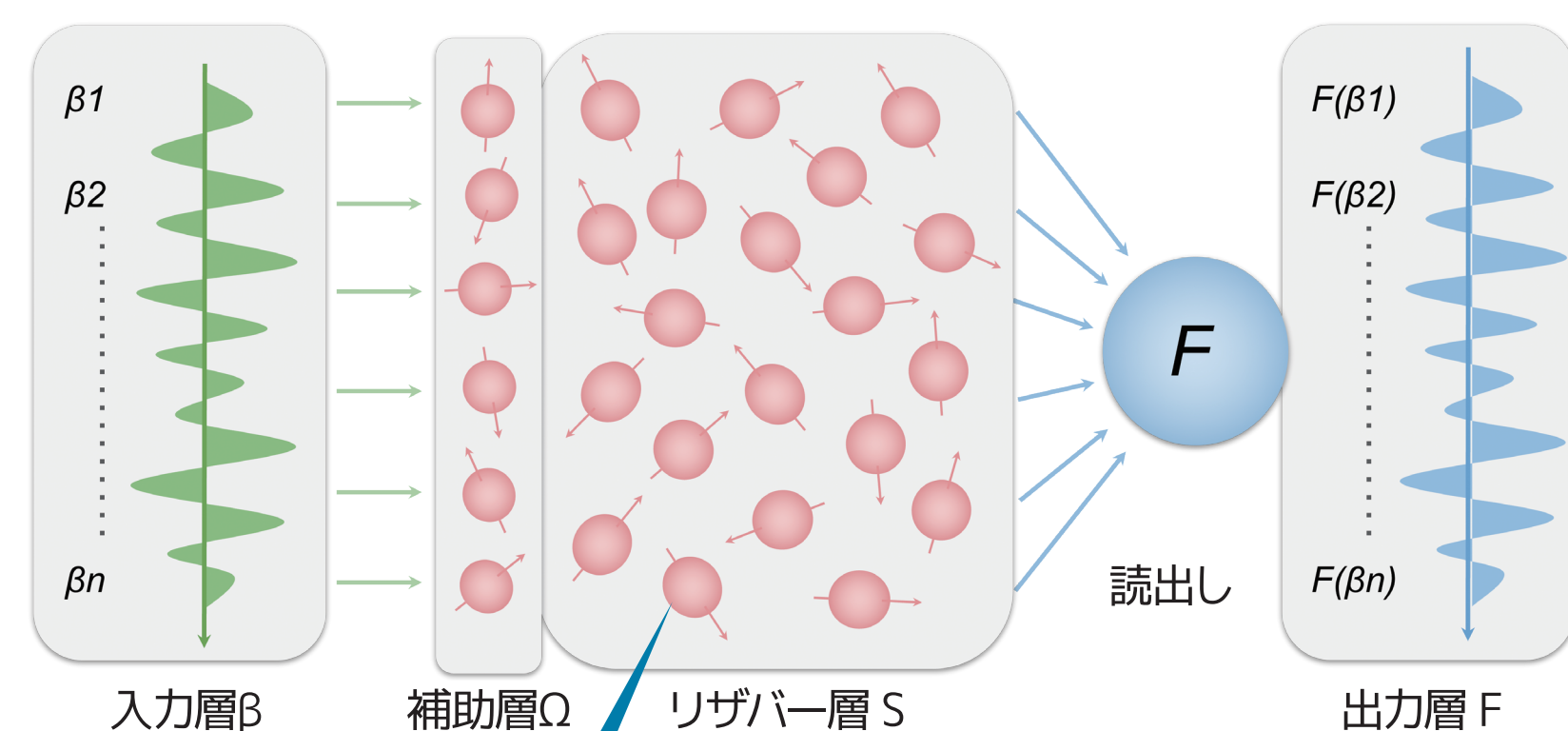


量子ダイナミクス - 量子多体系の実時間ダイナミクスが持つ複雑性を活用 -

量子力学における状態の時間発展 *4 について、指数関数化されるハミルトニアンにより、複雑な状態の変化を表現することができ、系列データを効率的に扱うことが可能になる。

量子リザーバーコンピューティング *5 による系列データ予測

入力系列を、時間発展するハミルトニアンの個別の量子ビットに関する項の係数とし、ニューロンの読み出しを個々の量子ビットに対する期待値測定を行うことで、出力系列を獲得する。



$$\text{状態 } \rho_n = \mathcal{L}_{\beta_n}(\rho_{n-1}) = \text{Tr}_\ell[U(\rho_{n-1} \otimes \beta_n)U^\dagger]$$

量子リザーバーコンピューティング *5

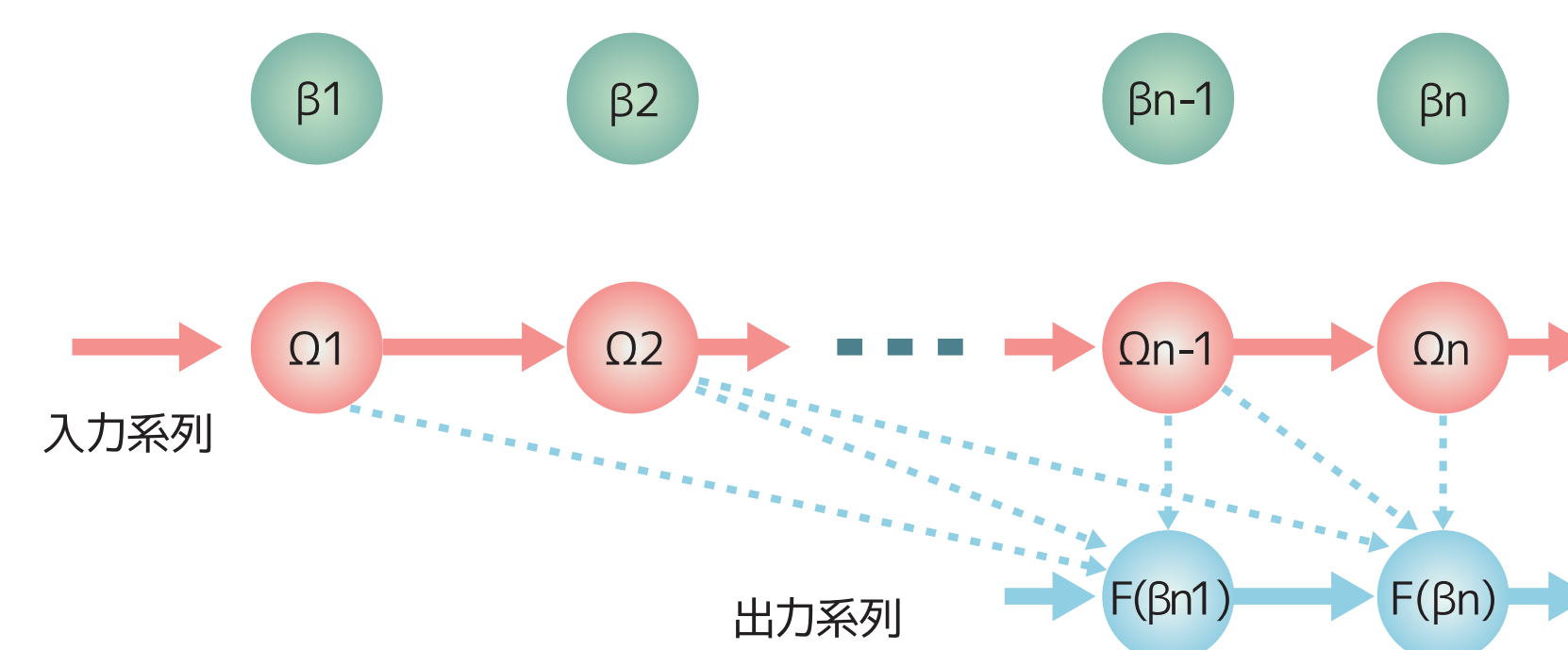
参考文献: K Nakajima, K Fujii, M Negoro, K Mitarai, M Kitagawa, 'Boosting computational power through spatial multiplexing in quantum reservoir computing', Physical Review Applied 11 (3), 034021

時間依存シュレディンガー方程式とユニタリ発展 *4

時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ が満たす時間依存シュレディンガー方程式において、ハミルトニアンは全エネルギー作用素を記述する。

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t)$$

ここで時間間隔 τ における時間発展における、ユニタリ演算子 $\hat{U}(t)$ は以下式で与えられる。

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{\hat{H}t}{i\hbar}\right)$$


本研究において、AI/HPC の計算リソース需要拡大と古典コンピューター性能限界への懸念に対し、量子コンピューターによる機械学習の優位性実証と実用化を実現する。

量子シミュレーターによる基礎実験

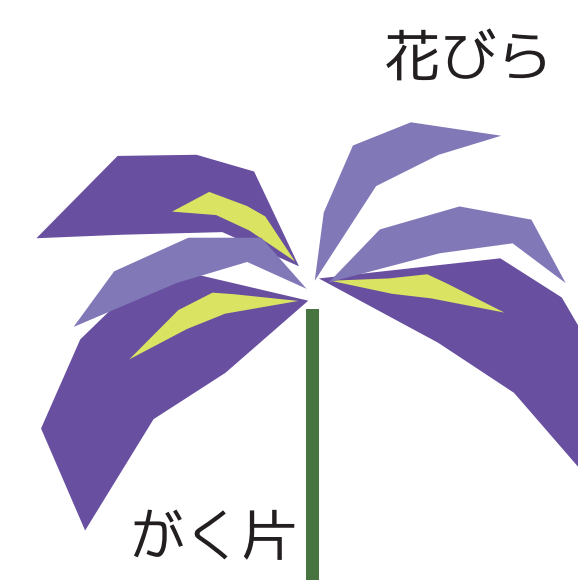
量子サポートベクタマシンを用いたあやめ品種の 多クラス分類性能評価

あやめ品種 3 クラス *6、*7 の分類に関する機械学習性能評価。
古典アルゴリズムおよび量子アルゴリズムによるカーネル作成。
サポートベクタマシンを用いて各カーネルによる分類性能を比較。

特徴抽出アルゴリズムは、古典カーネルは RBF(Radial BasisFunction)、量子カーネルは ZZ Feature Map を用いた。

クラス分類精度は、古典カーネルで 0.97、量子カーネルで 0.90。カーネル
の分類平面図を見ると古典カーネル *8
に対して量子カーネル *9 は高次元な分類
境界曲線を描いていることがわかる。

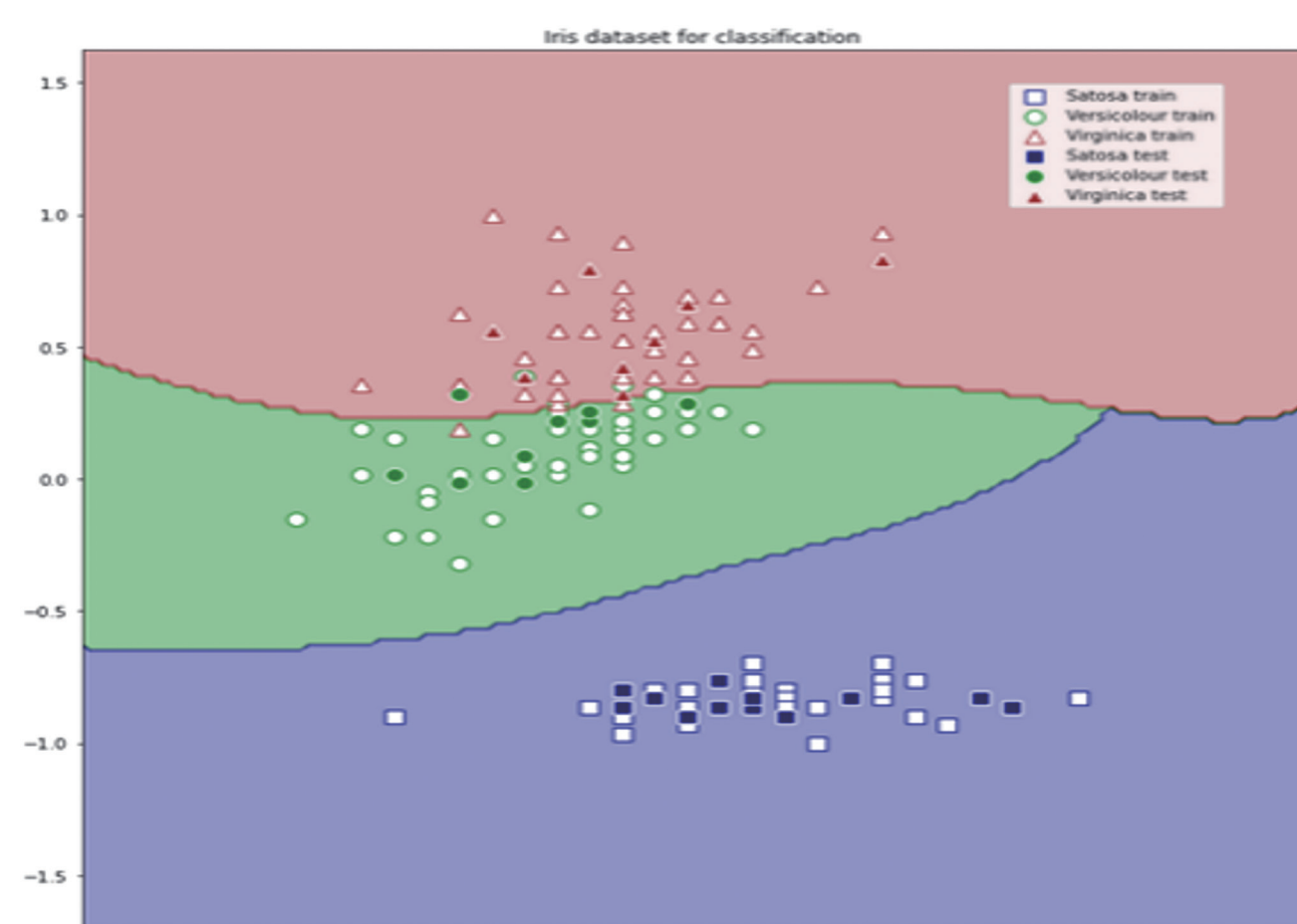
量子コンピューターを用いた分類性能
について、カーネル作成における量子
回路を工夫することにより、より複雑な
データに対する性能が期待される。



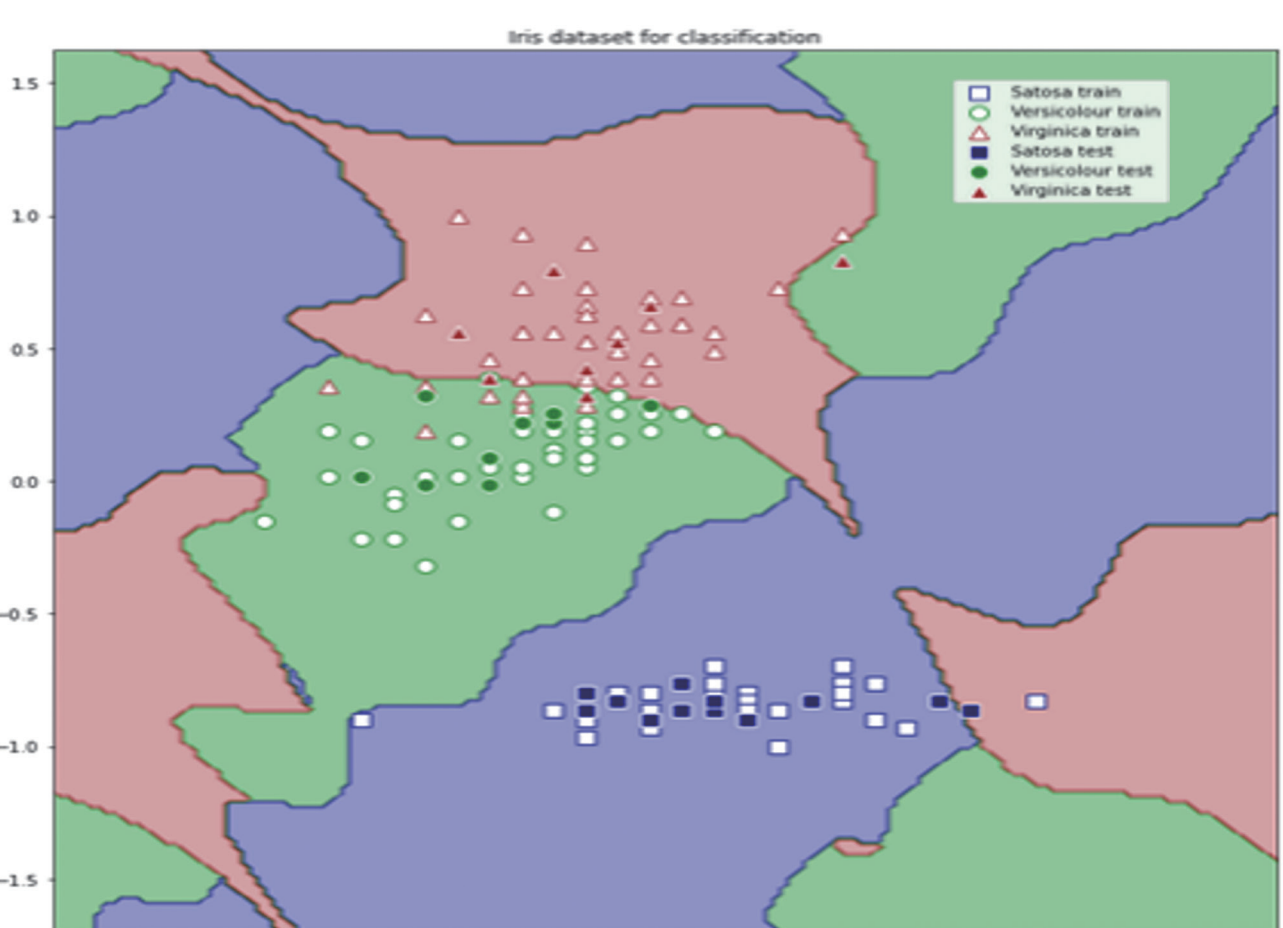
あやめ *6

特微量 (形状)	がく片の長さ がく片の幅 花びらの長さ 花びらの幅
クラス (品種)	Setosa (日本名：ヒオウギアヤメ) Versicolor (日本名：ブルーフラッグ) Virginica (日本名：ヴァージニカ)

IRIS データセット *7



古典カーネルによる分類平面 *8



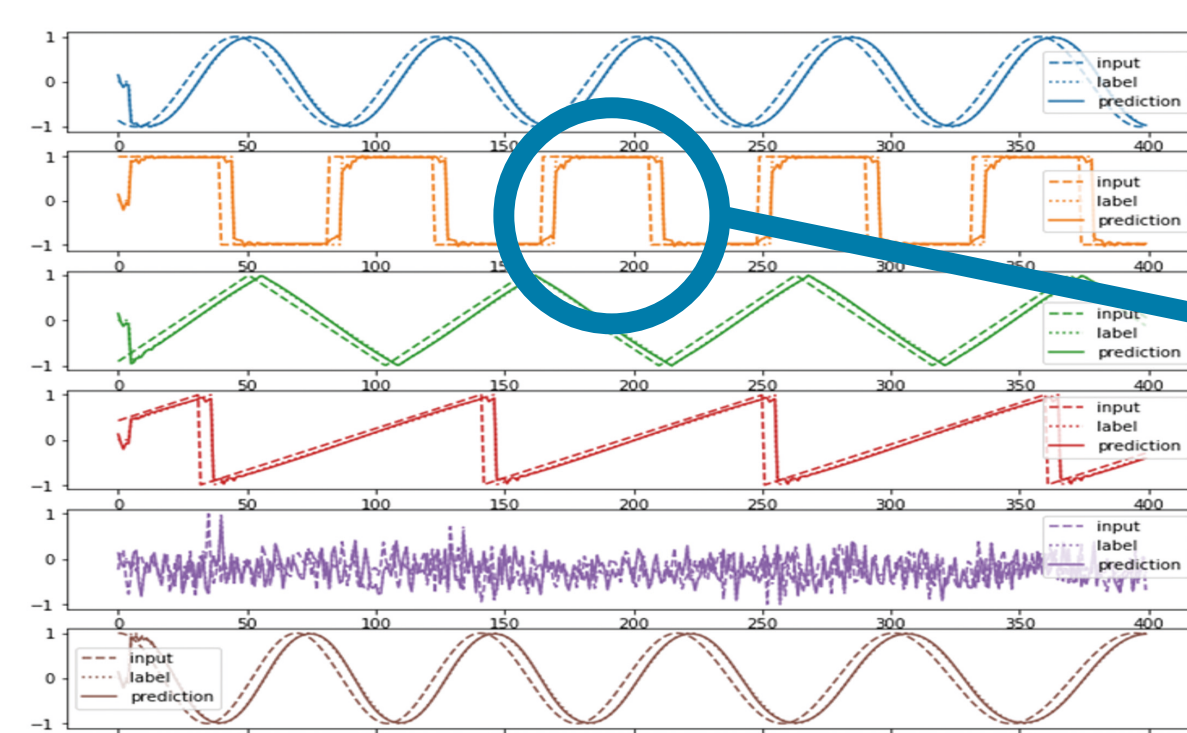
量子カーネルによる分類平面 *9

参考文献 : Plot different SVM classifiers in the iris dataset, 'https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/svm/plot_iris_svc.html'
Qiskit Machine Learning 0.6.1 documentation, 'https://qiskit.org/ecosystem/machine-learning/apidocs/qiskit_machine_learning.kernels.html'

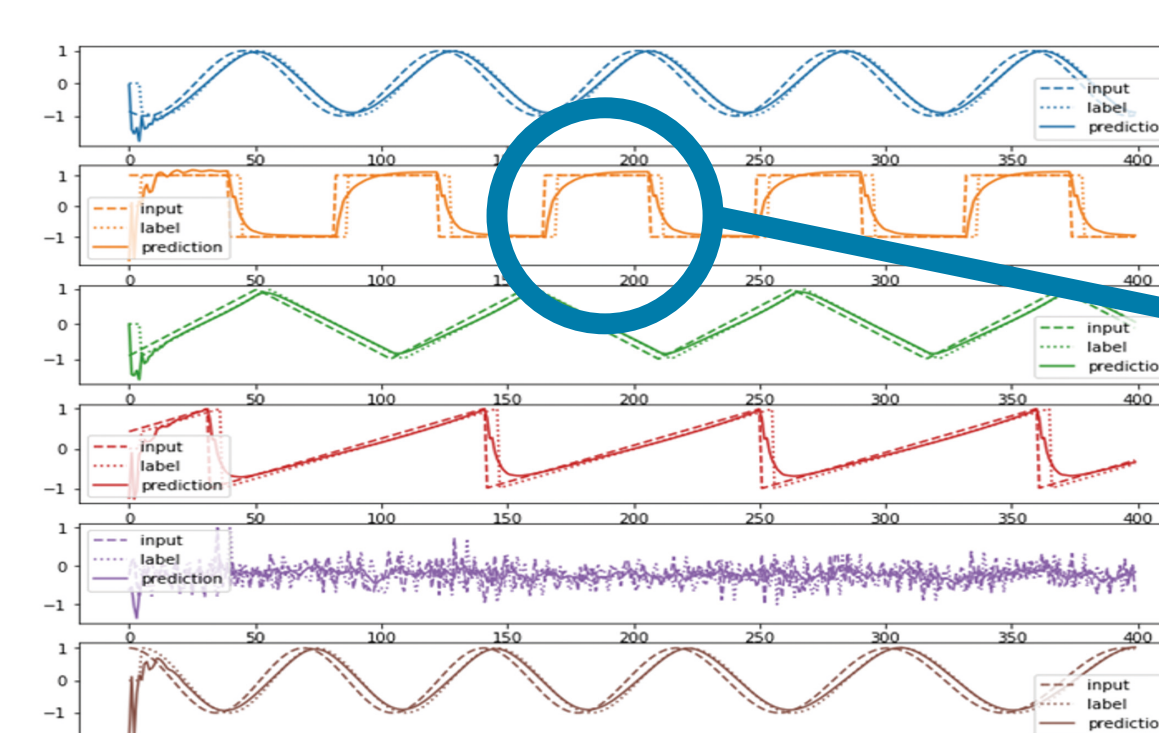
量子リザーバーコンピューティングを用いた各種系列信号に 対するエコー波形予測性能評価

予測とラベルの差となる L2 損失を最小化するように各波形について学習。
リカレントニューラルネットワークは改良型 RNN Cell、量子リザーバーコンピューティングでは 5qubit 量子回路を利用。学習後の最小損失値はそれぞれ 0.4、11.3。
Square 波の立ち上がりと立ち下がりのような急峻な変化において予測性能の差が
顕著である。量子コンピュータを用いた予測性能について、十分な qubit 数を用
いる等によりさらなる改善が期待される。

時間に依存する各種信号波形 (Sine、
Squar、Saw、Triangle、Noise、
FmSine) に対するエコー波形を教師
データとした波形予測性能を、古典
アルゴリズム (リカレントニューラル
ネットワーク) と量子アルゴリズム
(量子リザーバーコンピューティング)
について比較。



古典リカレントニューラルネットワーク *10



量子リザーバーコンピューティング *11

参考文献 : Quantum Native Dojo ' コラム : 量子リザーバコンピューティング ', 'https://dojo.qulacs.org/ja/latest/notebooks/5.2c2_quantum_reservoir_computing.html'

ゲート式量子コンピューターで解く 組み合わせ最適化問題

1. 組み合わせ最適化問題

ある制約条件の下、コストや時間、距離などを最小化する問題を組み合わせ最適化問題という。例えば、物流での最短ルート探索や、道路の渋滞緩和、学校の時間割作成など、様々な分野に登場する。

ソフトバンクにおいても無線通信を効率的に行うにあたり、様々なリソースを最適化するという課題などが当てはまる。

組み合わせ最適化問題は対象となるものが増えるにつれて、計算量が増加する。そのため古典コンピューターでは解くのが難しくなるが、規模の大きな組み合わせ最適化問題では量子コンピューターの威力が発揮される。

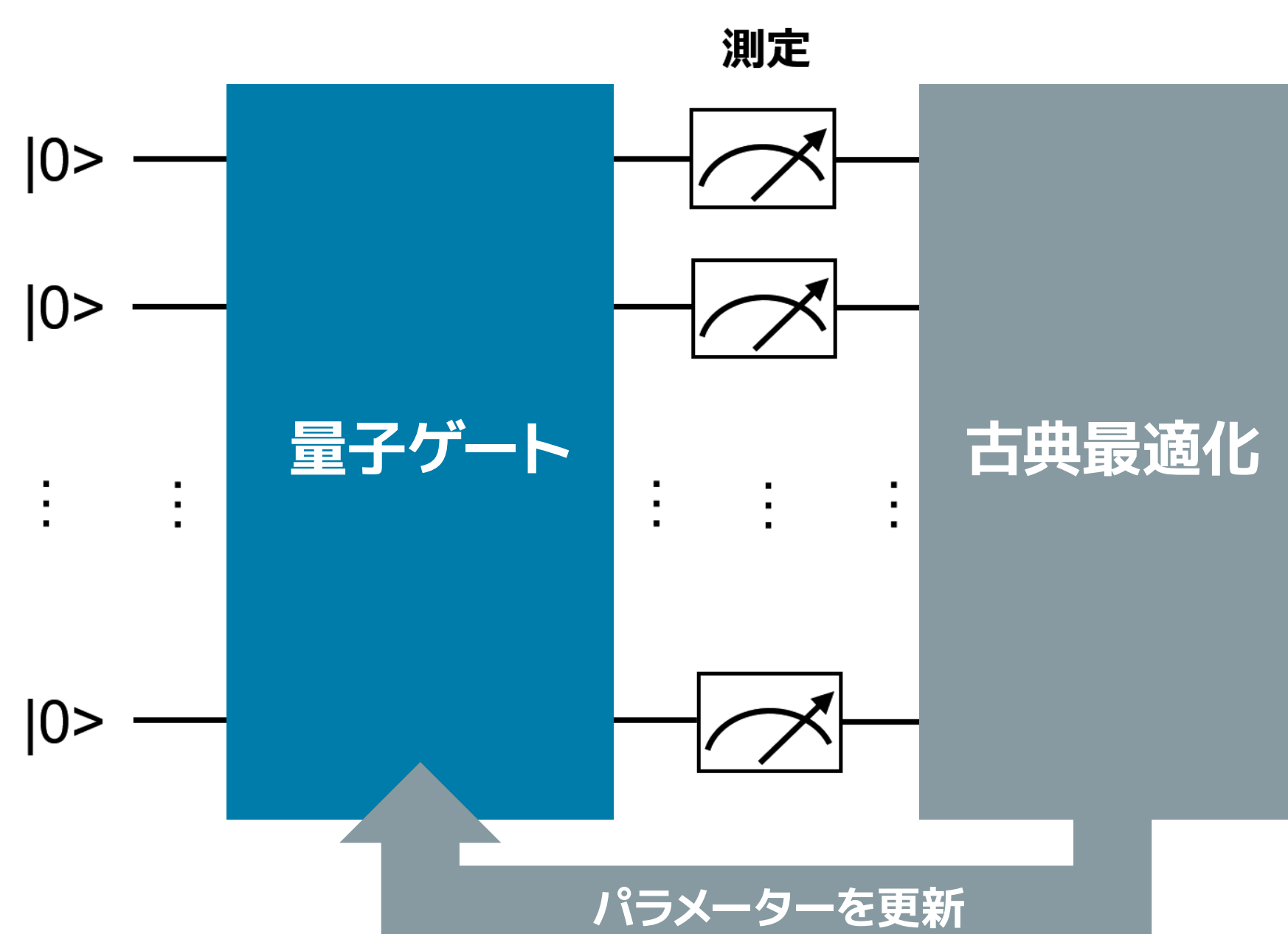
量子コンピューターを用いて、このような組み合わせ最適化問題をより効率的に解く研究を行っている。

2. 古典量子ハイブリッドアルゴリズム

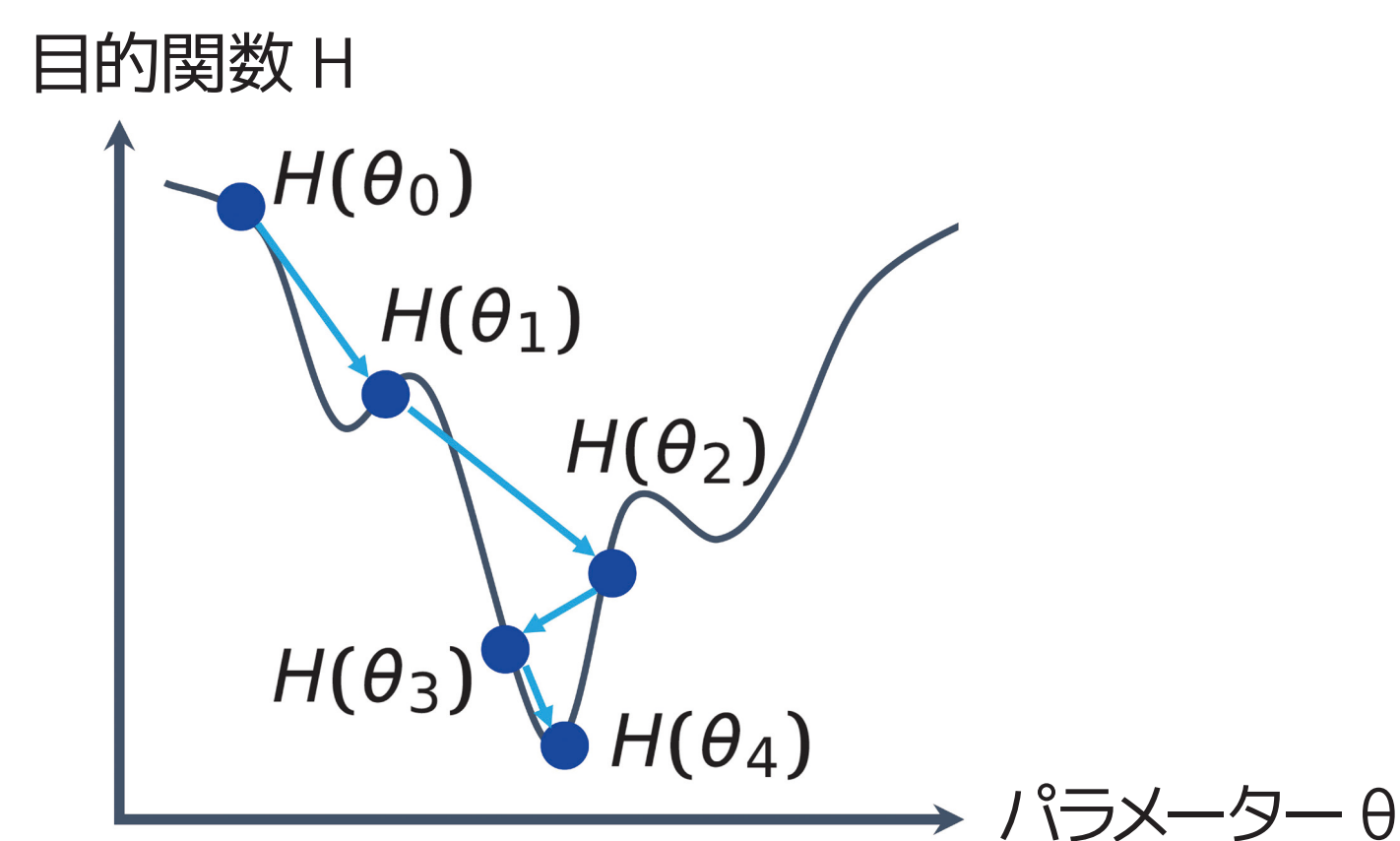
組み合わせ最適化問題を解くアルゴリズムは古典コンピューターと量子コンピューターを組み合わせた、ハイブリッドなアルゴリズムである。

具体的には量子コンピューターで解の候補を探索し、古典コンピューターでその解の評価とパラメーターを調整している。

量子回路の一例



- ① 状態を適当なパラメーターで設定
(状態=さまざまな組合せが重なり合ったもの)
 - ② 量子コンピューターで 1. の状態での目的関数を計算
(古典コンピューターではここが難しい)
 - ③ 古典コンピューターでパラメーターを
より最適なものへ更新
- ①~③を繰り返して、目的関数を最小にする状態を求める



【実例】巡回セールスマン問題

1. 問題設定

M 個のビルに訪問するセールスマンが移動する距離を最小にしたい

- 制約条件
 - ・一度に一つのビルにしか訪問しない
 - ・同じビルには一度しか訪問しない
- 経路の候補数 $(M-1)!$ 通り
 - ⇒ M が大きいと、古典コンピュータのアルゴリズムでは解くのが難しい

どういうルートが最短だろう



目的関数

=

移動距離

$$\sum_{k=0}^{M-1} \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{M-1} d_{i,j} x_{k,i} x_{k+1,j}$$

+

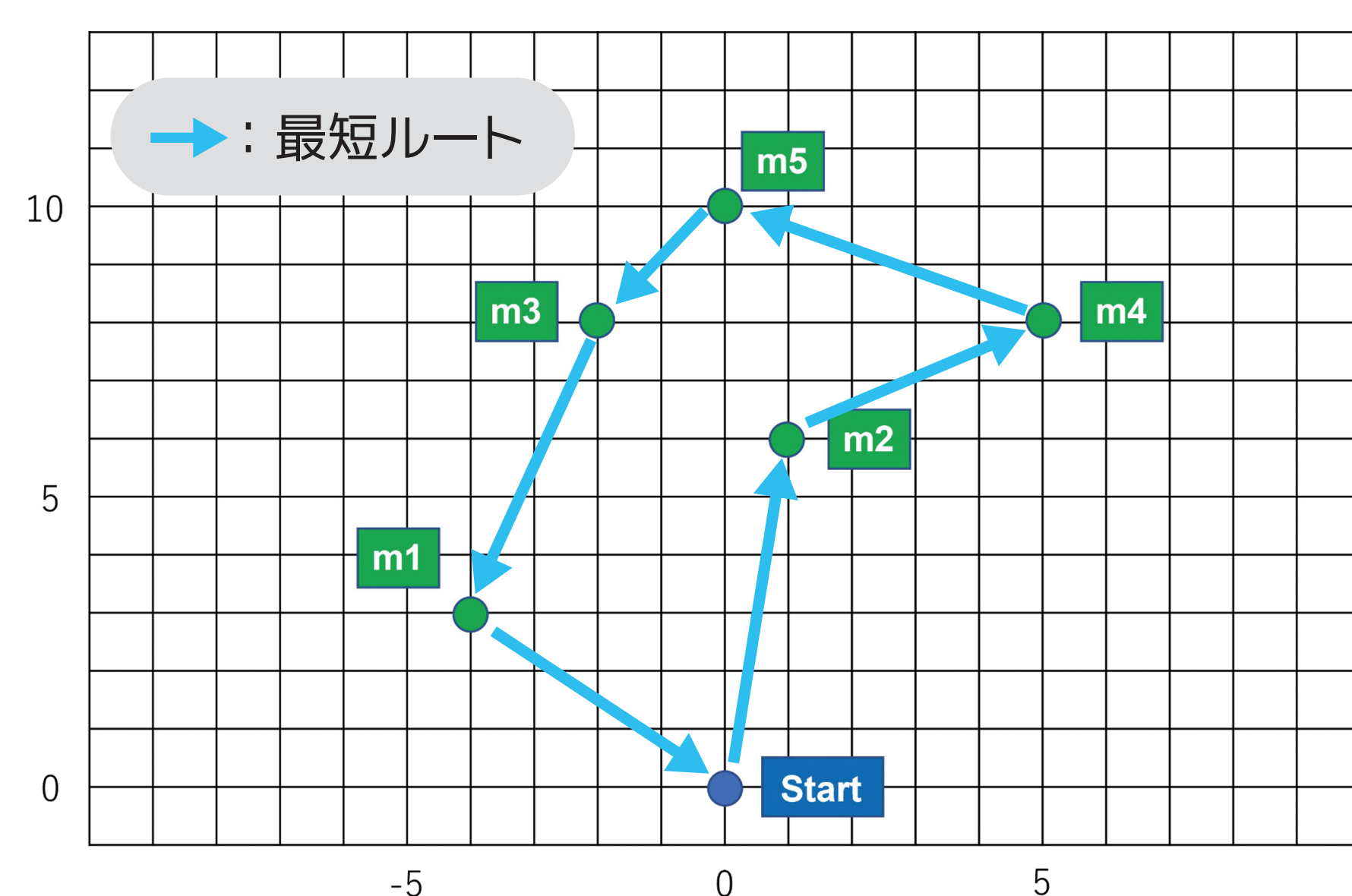
制約条件

$$\sum_{k=1}^{N-1} \left(\sum_{i=1}^{M-1} x_{k,i} - 1 \right)^2 + \sum_{i=1}^{M-1} \left(\sum_{k=1}^{N-1} x_{k,i} - 1 \right)^2$$

2. シミュレーションの例

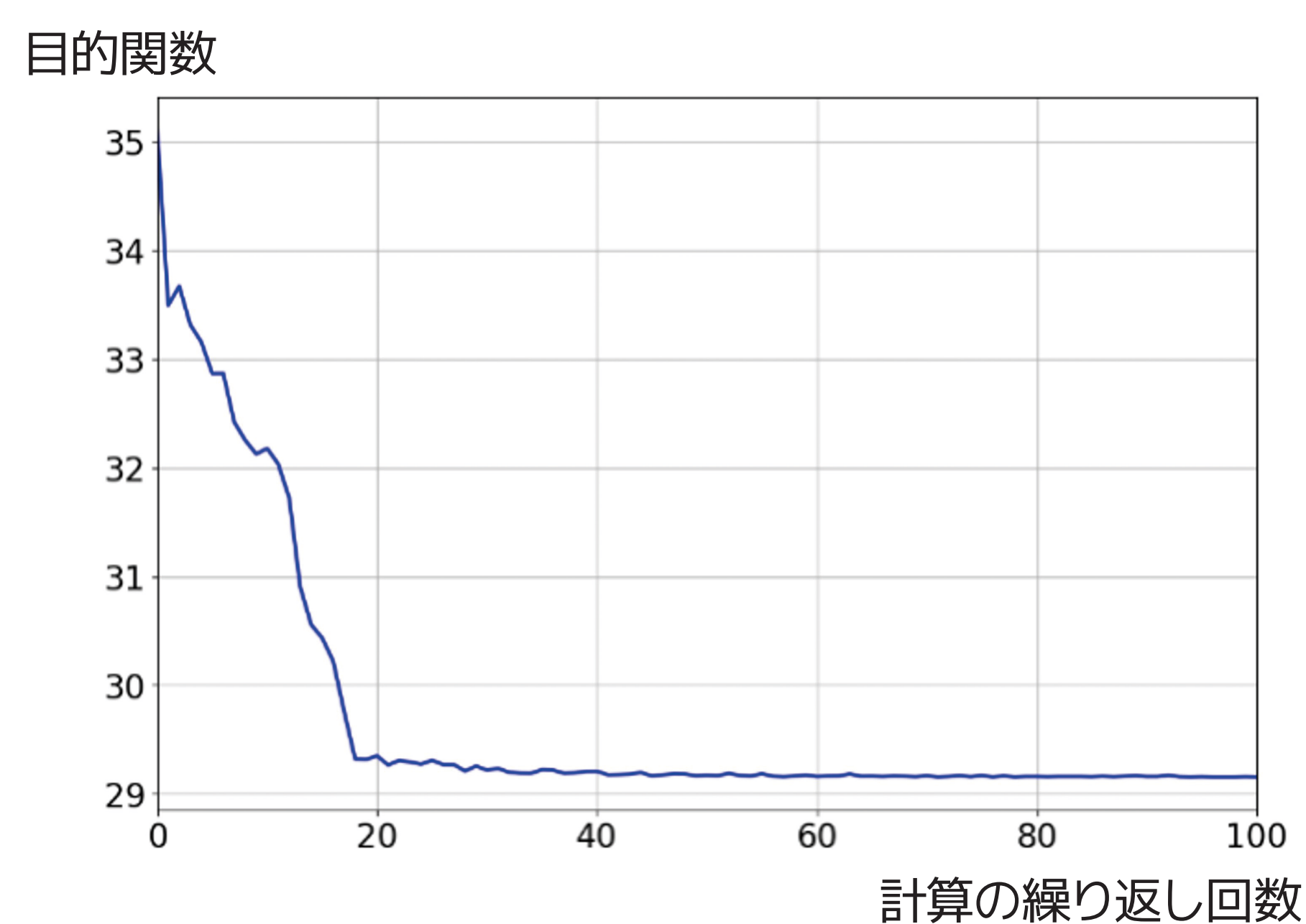
2次元座標でのビルの位置

スタート地点から 5 つのビルを経由してスタート地点に戻る間の移動距離を最適化



目的関数の変化の様子

パラメーターを最適化していき最終的に最短距離に収束



さまざまな経路を量子力学的に重ね合わせた状態を作って計算を繰り返し、最終的に一つの経路が取り出される。

量子コンピューターを 活用した電池材料の探索

先端技術研究所の取り組み

先端技術研究所では、重量エネルギー密度が高い電池の実用化に向けた開発・研究を行っている
次世代デバイスの早期実現を通して、産業革命に貢献

HAPS

ドローン
タクシー

量子コンピューターを使用した有機正極素材の 物性解析の計算

分子構造の
物性
を解析

電力量の
よい物質
を探索

有機正極素材の 物性解析の計算の流れ

古典的な
事前計算

古典コンピューター

量子
シミュレーション

量子と古典のハイブリッド

1. 分子情報を設定する

例：特定の物質に含まれる原子数、原子の軌道数、ハミルトニアンなど

2. 量子ビットの変換

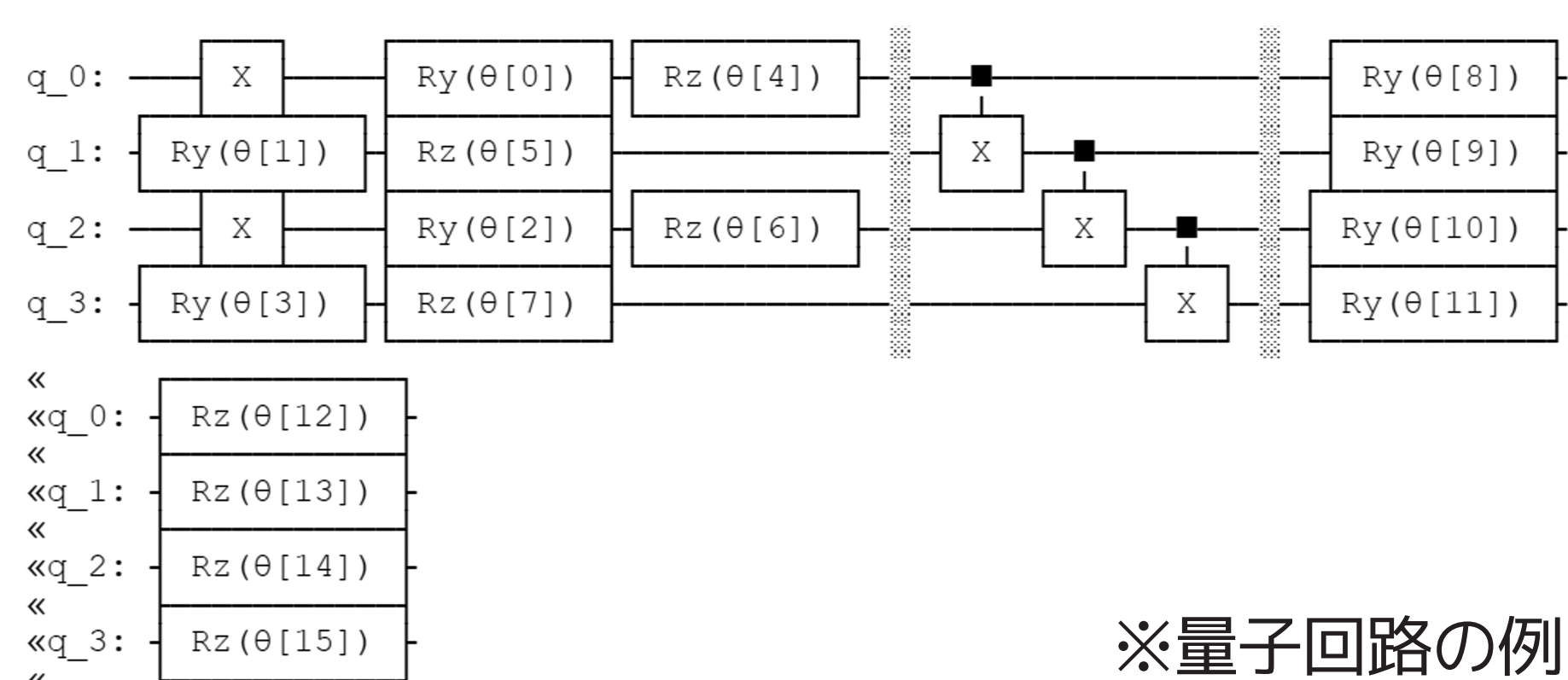
分子の情報を、量子コンピューターが理解できる量子ビットの形式に変換する

3. 量子回路の初期状態を設定

量子回路を特定の初期状態にセットする

4. 量子回路の試行状態を設定

基底状態または励起状態を近似的に表現するための量子回路を設定する



※量子回路の例

5. 基底状態エネルギーの計算

- 物質の安定な状態のエネルギーを求める
- 試行状態を用いて基底状態エネルギーを近似的に求める

6. 励起状態エネルギーの計算

基底状態よりも高いエネルギーを持つ電子の状態

量子暗号通信の実証実験

実際のファイバー環境における QKD 実証実験 ～ データセンターとソフトバンクオフィス間の QKD-VPN ～

量子力学を応用した、情報理論的に安全な鍵配送技術



通信において、公開鍵を使った暗号通信は、正規の通信相手でも計算の処理が重く、非効率的です。共通鍵を使う方式では、効率よく通信を行うことができるものの、その鍵をいかに安全に共有するかが課題となります。

現在は RSA 暗号や楕円曲線暗号などの方式が使われていますが、量子コンピュータの実用化により、将来的にはこれらの方式は解読されてしまうリスクが高いと指摘されています。

一方で、量子鍵配送 (QKD) 技術では、鍵を通信する途中での盗聴を検出できるため、安全に共通鍵を共有 (生成) することができます。QKD 技術にはいくつかのプロトコルが存在しており、BB84, E91, BBM92 などがあります。左図は、BB84 を用いた QKD の説明です。量子もつれ現象を用いずに暗号鍵を共有することができ、また、鍵の生成速度が速いという特長があります。

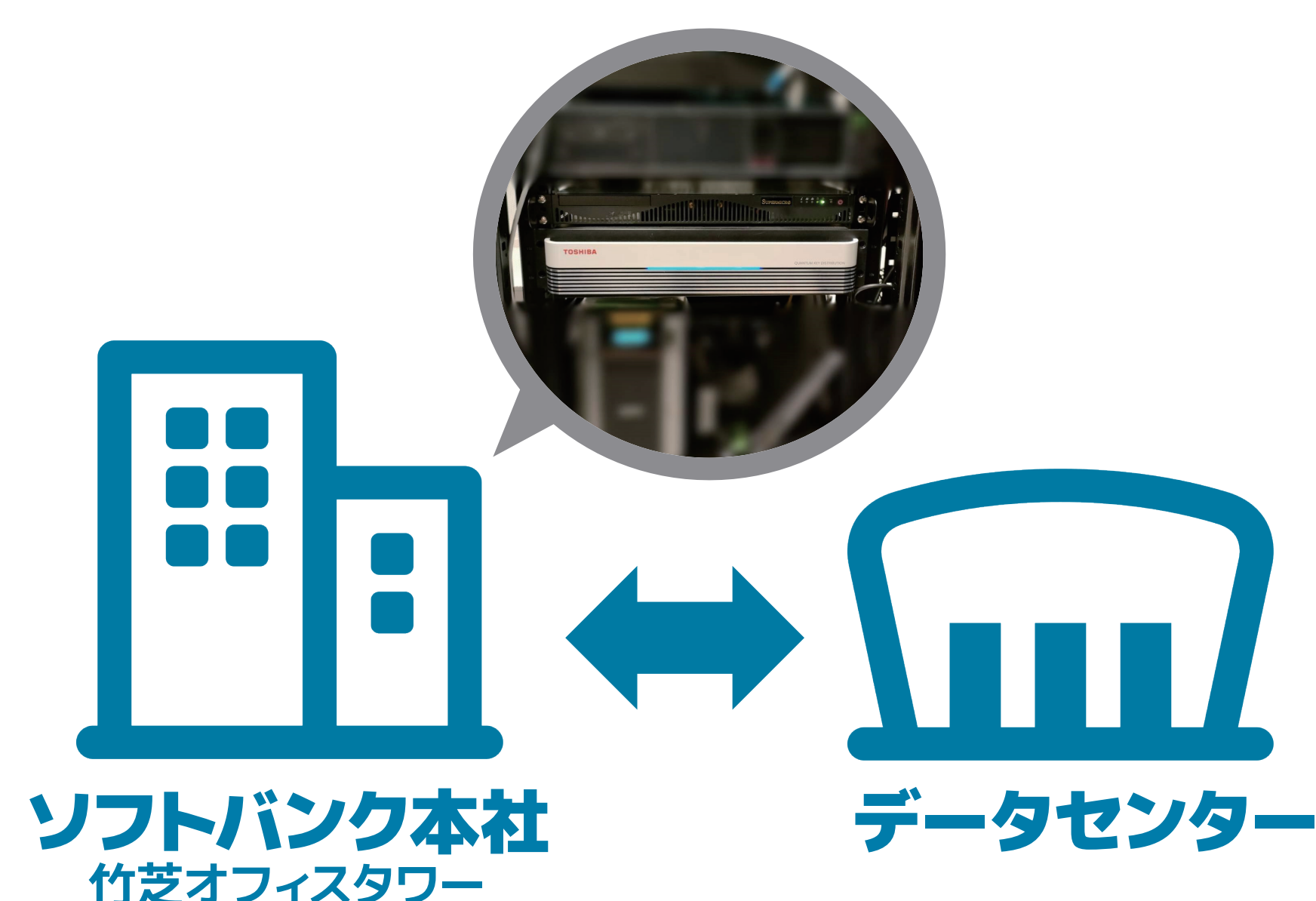
実機を用いた量子セキュアな IPsec QKD-VPN を構築

QKD における課題として、端末が QKD 対応する必要があること、実際の通信に鍵の生成が追いつかないこと、などがあります。

ソフトバンクは、東芝デジタルソリューションズ株式会社と協力し、ソフトバンク本社 (竹芝オフィスタワー) とソフトバンクのデータセンターの 2 拠点において、IPsec QKD-VPN を構築しました。

実験では、拠点間を QKD-VPN で結ぶことにより、QKD 非対応の端末の通信を QKD による暗号通信で秘匿化することに成功しました。

さらに、暗号化アルゴリズムとして AES 方式を採用しているため、データ通信速度が鍵の生成速度を上回る場合でも鍵が枯渇することなく通信できます。



- ファイバー距離: 約 **16km** (損失: 12dB)
- セキュア鍵生成速度: 平均約 **1.5Mbps**
- IPsec 通信速度: 平均約 **900Mbps**