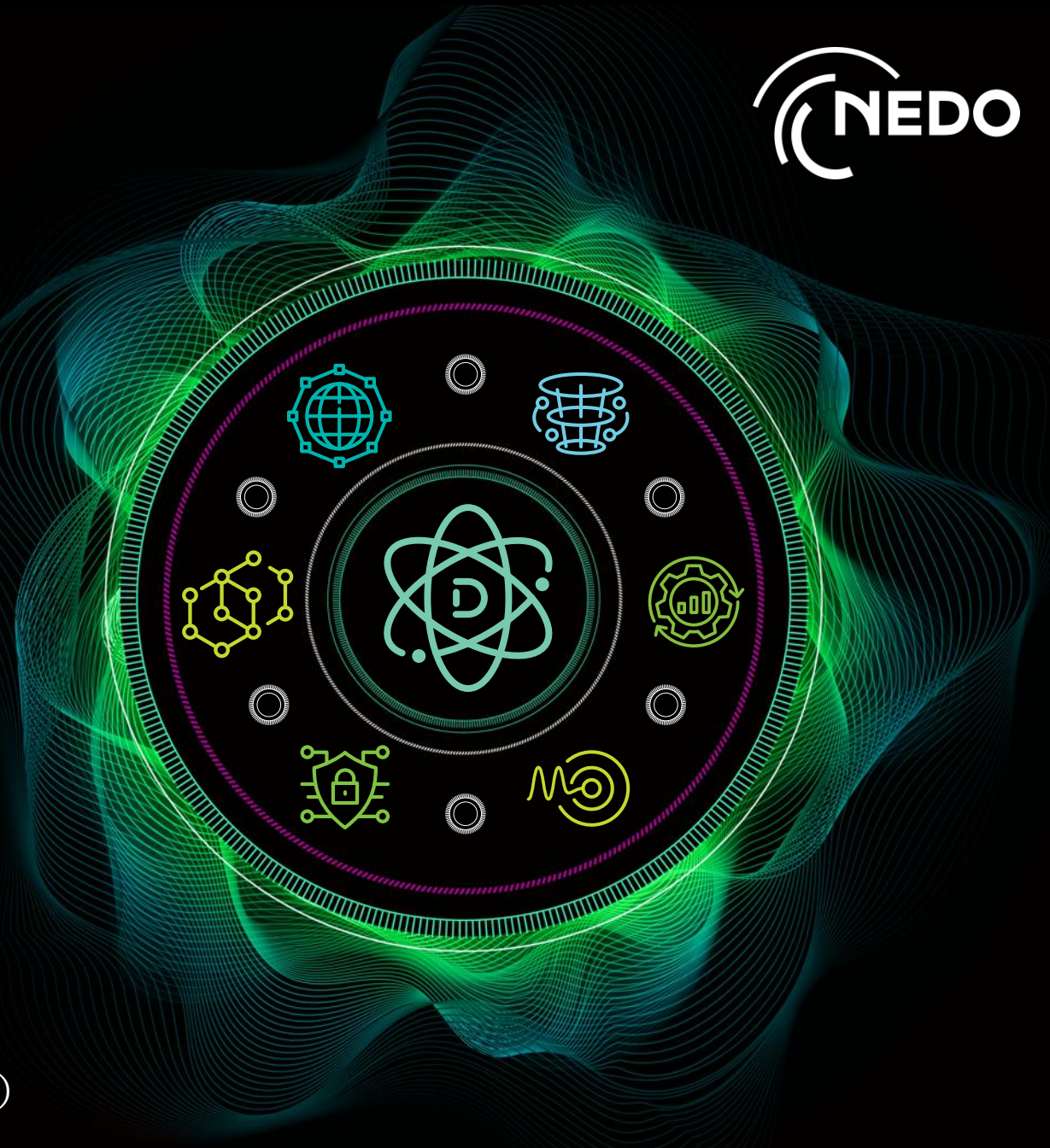
量子コンピューティング ユースケース集

量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化

Google



国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

Google：量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化【2022/6】 1／3

検証

産業領域	その他
手法	AI
プロセス	インプット
技術分類	ゲート*

取組の背景

- 機械学習/深層学習の利活用が進み、産業・商業用途だけでなく新素材開発などR&D領域での活用も進展している
- **大規模・高速計算に優位性を持つ量子コンピューターを機械学習に適用するための研究が進展している**
  - ✓ １つの方向性は、機械学習でのテキスト・画像データといった「古典データ」の学習や生成AIでのLLM学習などを量子コンピューターが代替することでの高速化
  - ✓ もう一方は、本取組のように物理系の量子状態（分子中の電子状態など量子力学で記述される波動関数）や量子コンピューターのためのプログラムといった、**量子性を帯びる「量子データ」とその重ね合わせ状態を量子コンピューターで直接解析・学習することでの効率化**

解決したい課題・モチベーション

- 物理系の量子力学的プロセスをシミュレーションするなど、量子状態を直接処理することに量子コンピューターの強みがあり、量子データに対する量子機械学習を推進するモチベーションになる
- **そのためには、実験データ等を量子コンピューターにインプットする量子センサーと量子コンピューターでの処理を組み合わせた量子機械学習が必要になる**
- 上記を踏まえ、Googleはノイズの影響のあるNISQマシンを活用し、**物理実験から得られた量子データを、量子性（重ね合わせ状態）を壊す「測定」をすることなく量子コンピューターに格納し量子機械学習アルゴリズムで学習する場合と、量子コンピューターで「測定」し古典データに変換した後に学習する場合の予測性能を比較する研究**を実施した

参考：J-STAGE「量子コンピューターを用いた機械学習」（https://www.jstage.jst.go.jp/article/oubutsu/93/1/93_19/_pdf/-char/ja）
*ゲート（gate-based） = 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

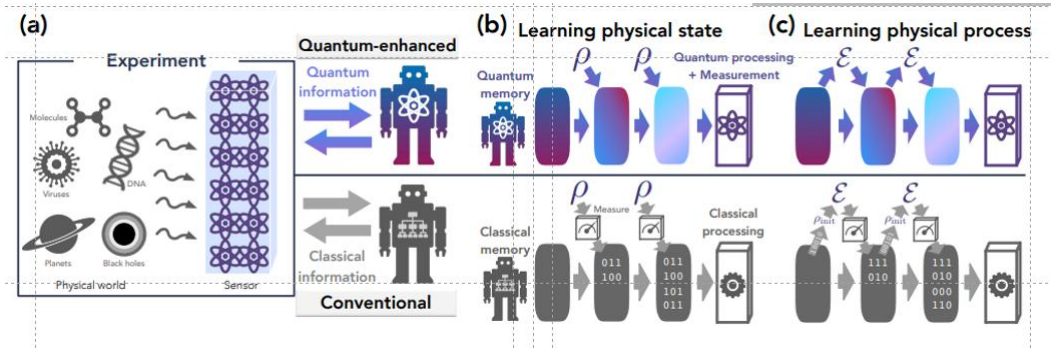
Google：量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化【2022/6】　2／3

検証

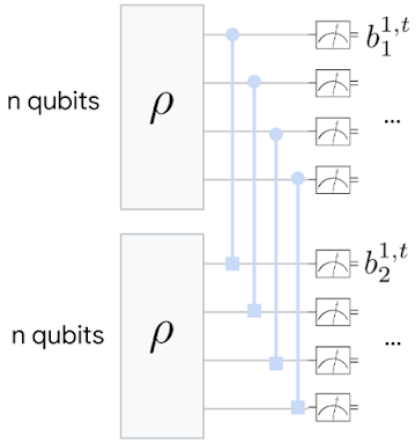
産業領域　その他
手法　AI
プロセス　インプット
技術分類　ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

- 重ね合わせ状態の物理系の波動関数を測定せず、**量子状態を保持した「量子データ」を直接量子機械学習へ入力し学習**を行った
  - ✓ 古典コンピューターを用いた機械学習では測定により量子状態が壊れた古典データを用いて物理系を学習
- **量子センサにより物理系の実験データを抽出**し、量子機械学習で活用
- HWはGoogleが開発した量子プロセッサ「Sycamore」を活用した



量子機械学習アルゴリズムと古典機械学習アルゴリズムの比較



量子機械学習アルゴリズムの基本的な概略図
（量子状態の2つのコピーを保存し、ベル測定により各ペアが絡み合い、それらの相関が測定される）

参考：Science「Quantum advantage in learning from experiments」（https://www.science.org/doi/10.1126/science.abn7293）、
J-STAGE「量子コンピューターを用いた機械学習」（https://www.jstage.jst.go.jp/article/oubutsu/93/1/93_19/_pdf/-char/ja）
*ゲート（gate-based）＝ 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

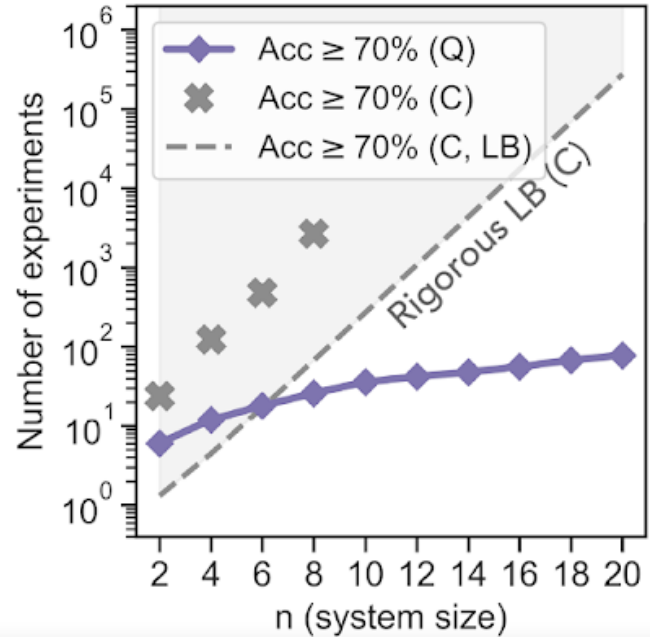
Google：量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化【2022/6】 3／3

検証

産業領域	その他
手法	AI
プロセス	インプット
技術分類	ゲート*

期待されるビジネス効果

- 機械学習により予測可能な物理系の情報（波動関数）について、**70%の予測精度を達成するために必要な実験（学習）回数の量子と古典機械学習の差はシステム規模とともに指数関数的に拡大**する
- **量子センサー、量子メモリーを量子コンピューターと組み合わせることで量子機械学習による効率化が加速される**
- **古典機械学習ではマシンパワー、リソースの観点から困難だった高い精度での物理系の性質予測が量子機械学習を活用することで進展する可能性がある**
  - ✓ ただし、現状長時間コヒーレンスを保持可能な量子メモリは開発途上であり、量子コンピューターへの接続など更なる研究・ブレークスルーが必要



量子状態の観測可能値を予測するための
量子機械学習と古典機械学習の実験的比較

- Q: 量子コンピューターのデータを“測定”せずに直接量子メモリに格納しQMLアルゴリズムで学習
- C: “測定”した量子コンピューターデータ（古典データ）を古典メモリに格納し機械学習を実行
- C, LB: 古典学習に必要な実験回数の理論上の下限値

参考：富士通株式会社「ここまできたHPC×電磁界解析」（https://www.hpci-office.jp/documents/workshop/cae-ws.240308_Kochibe.pdf）
*ゲート（gate-based） = 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。