

4. 量子コンピューティング技術の生命科学研究への 応用可能性：現状と将来展望

八幡 憲明^{1,2)}

抄録：近年、量子コンピュータにまつわるニュースを目にする機会が増え、今後の我々の生活や社会、ひいては生命科学研究にもたらしうるインパクトについても盛んに議論されるようになってきた。本稿では、量子コンピュータ関連の主要キーワードについて解説を加えながら、その技術開発の現状や克服すべき課題、今後の展望について述べる。まず、汎用性があるゲート式量子コンピュータについては、誤り訂正機能を有する論理量子ビットを多数搭載するための技術開発が今後の重要課題であることに触れる。次に量子アニーリングマシンについて、用途は限定されるが商用サービスの提供が始まっており、組合せ最適化に関連する研究で活用できる可能性を示す。最後に、古典コンピュータ上で行う特定の線形演算について“量子コンピュータ並み”の計算効率で近似解が得られる量子インスパイアード計算アルゴリズムを紹介する。量子を共通キーワードとしたこれらの計算技術は、内容も開発状況も大きく異なるが、いずれも今後の生命科学研究において新しい視点をもたらす可能性を秘めており注目に値する。

日本生物学的精神医学会誌 35 (3) : 120-124, 2024

Key words : quantum computing, quantum annealer, quantum-inspired algorithm
quantum mechanics, noisy intermediate-scale quantum device, qubit, machine learning

1. 量子コンピュータの概要と ゲート式量子コンピュータ

我々が日常使用しているコンピュータ（古典コンピュータ）において、数を表現する最小単位は0または1の値を取るビット (bit) である。複数のビットを組み合わせることで任意の数は二進数として表現される (図 A)。現代のデバイスでは、半導体素子であるトランジスタの電圧の高低によってビットが実現されている。

量子現象に基づいて構築される量子コンピュータでこれに相当するのは量子ビット (qubit) である。その最大の特徴は、古典ビットの (0, 1) に対応して2つの状態 ($|0\rangle, |1\rangle$) があり、ビット値が計測 (確定) される前は、これらが重ね合わさった状態を取

れる点にある^{*1}。言い換えるなら、量子ビットは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ という2つの状態を同時に保つことができる。 N 個の量子ビットがあれば、 2^N 個の状態を同時に実現しながら計算を進めることができる (図 A)。この並列性こそ量子コンピュータにおいて高速計算が期待されるゆえんである。これまでに、超伝導やイオントラップ、光パルス、ダイヤモンド中の窒素-空孔中心 (NV センター) などのさまざまな手段により、状態の重ね合わせが可能な量子ビットを実現する方法が提案されている。

コンピュータ上で計算を行うためには、ビットの状態を操作する手段が必要となる。古典コンピュータでは、トランジスタの素子同士を結線して得られる論理ゲートによってビット操作が行われる (図 B)。量子コンピュータでこれに相当するものは量

Quantum computing's impact on life science : current state and future prospects

1) 国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 量子生命科学研究所 (〒263-8555 千葉県千葉市稲毛区穴川4-9-1) Noriaki Yahata : Institute for Quantum Life Science, National Institutes for Quantum Science and Technology. 4-9-1 Anagawa, Inage-ku, Chiba-shi, Chiba 263-8555, Japan

2) 千葉大学大学院融合理工学府 先進理化学専攻 量子生命科学コース (〒263-8522 千葉県稲毛区弥生町1-33) Noriaki Yahata : Department of Quantum Life Science, Graduate School of Science and Engineering, Chiba University. 1-33 Yayoi-cho, Inage-ku, Chiba-shi, Chiba 263-8522, Japan

【八幡 憲明 E-mail : yahata.noriaki@gmail.com】

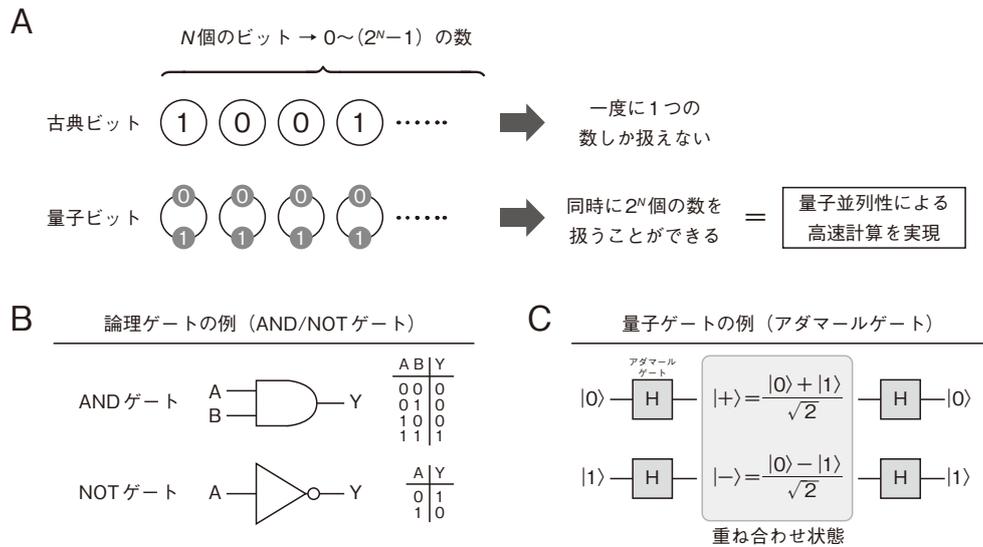


図 古典コンピュータと量子コンピュータの間での「ビット」および「ゲート」の比較
(A) 古典ビットと量子ビットの比較, (B) 古典ビットを操作する論理ゲートの例 (AND/NOTゲート), (C) 量子ビットを操作する量子ゲートの例 (アダマールゲート)。

子ゲートである。量子コンピュータに特有の例を挙げると、アダマールゲートは、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせ状態を作ったり、それを元の状態に戻したりする操作を行うものである (図 C)。量子ゲートによるビット操作は、重ね合わせの重み (脚注^{*1}における α , β) を操作し、特定の状態が起こる確率を高めたり低めたりすることに相当する。量子ゲートの実現方法は量子ビットの実装の仕方に依存するが、たとえば超伝導方式ではパルス状のマイクロ波を用いてビット操作が行われている。

量子ビットは外部環境からの影響を受けやすく、特定の状態を長時間維持することが難しい。これを「コヒーレンス時間が短い」という言い方をする。ゲート操作中にノイズが生じると計算精度が低下するため、量子ビットのエラーを訂正する「誤り訂正技術」の確立が量子コンピュータのハードウェア開発において最重要テーマの1つとなっている。誤り訂正技術の主流な方法では、エラーの生じやすい量子ビット (物理量子ビット) を多数組み合わせることで、誤り耐性をもつ量子ビット (論理量子ビット) を1つ構成するというアプローチがとられる。Google は表面符号とよばれる誤り訂正アルゴリズムによって量子ゲート操作に伴うエラーを低減することに実験的に成功した²⁾。また、東京大学他のグループは、光パルスの中で1つの物理量子ビット

から1つの論理量子ビットを効率的に生成する方法を発表した⁴⁾。いずれにせよ、2020年代は長時間情報が保持できる“長生き”の論理量子ビットを数多く構成するための技術開発に占められそうで、大規模な誤り耐性型量子コンピュータが実現されるのは2030年代以降となりそうである (参考: <https://quantumai.google/qecmilestone>)。

現在、量子コンピュータ用の計算手法 (量子アルゴリズム) の開発は、noisy intermediate-scale quantum (NISQ) とよばれる量子ビット数が数十程度 (今後~数百程度) かつ誤り耐性のない実機を用いて検討が進められている。たとえば Google は、スーパーコンピュータでも1万年かかる計算を、53量子ビットのNISQデバイスを用いて200秒で実行した¹⁾。特殊な状況設定下で行われた計算ではあるものの、古典コンピュータに対する量子超越性 (quantum supremacy) を示した点において注目に値する。我々にとってもっと身近なところでは、機械学習の分野において、 N 量子ビットによって作られる広大な 2^N 次元の状態ベクトル空間を用いた方法論の開発が検討されている。従来の手法では扱えなかった特徴量を量子ビットによって表現し、これまで学習が不良だったデータセットへ適用するような、新しい機械学習の展開がめざされている⁶⁾。そうした開発の過程で、近い将来、バイオデータへ適

*1: 量子力学において、量子ビットの状態は複素数のベクトルで表される。慣例的に、量子ビットが0である状態を $|0\rangle = (1, 0)^\dagger$, 1である状態を $|1\rangle = (0, 1)^\dagger$ で表し (\dagger は複素共役転置), その重ね合わせとなる状態は、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ となるような複素数の組 (α, β) で重み付けした $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ の形で表される。これを状態ベクトルとよぶ。この量子状態 $|\psi\rangle$ に対して計測を行った場合、量子ビット0, 1が観測される確率はそれぞれ $|\alpha|^2$, $|\beta|^2$ で与えられる。

用する試みも始まるものと思われる。

2. 量子アニーリングマシンによる組合せ最適化

ここまで述べた量子コンピュータは量子ゲート方式とよばれ、古典コンピュータと同様に汎用性を有するものである。一方、量子現象に基づいているものの、ゲート方式と異なるアーキテクチャを取り、限定された用途でのみ使用可能な量子アニーリングマシンとよばれる計算機も存在する。同マシンは、特定の数学的形式で表される最適化問題の求解に特化している。以下、そのイメージを掴むために必要な用語の解説から始める⁹⁾。

複数の離散的な説明変数を入力とする関数の値を最大化もしくは最小化（最適化）する問題を「組合せ最適化問題」という。有名なものとしてナップザック問題（重さ制限があるナップザックで運べる荷物の価値を最大化するには？）やセールスマン問題（2つの都市を結ぶ最短経路は？）などがある。一般的に、説明変数の数が増えると、検索すべき変数の組合せは指数関数的に増大するため（組合せ爆発）、通常の計算機では実時間内の最適化が困難となる。この問題の求解に特化した計算機がアニーリングマシンであり、以下の形式で表される関数の最適化を行う：

$$\text{式 (1)} \quad E(\mathbf{x}) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} Q_{ij} x_i x_j \quad (x_i = 0, 1)$$

これはもともと、統計物理学において磁性体をもつエネルギーを構成原子のスピン状態（上向きまたは下向き）によって表し、その基底状態（最低エネルギー状態）を探索するのに用いられる「イジングモデル」に起源がある。これを一般化した式 (1) においては、 N 個の説明変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ から構成される組合せ問題に即して係数 Q_{ij} を与えたうえで、関数 $E(\mathbf{x})$ が最適化されるような変数 \mathbf{x} の値を求める問題となる。式 (1) は quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) 形式とよばれる。

アニーリングマシン自体は古典コンピュータを使っても実装できる。しかし、最適化が達成されるまで \mathbf{x} の値を変えながら $E(\mathbf{x})$ を繰り返し計算する必要があるため、規模の大きい問題に対しては長い計算時間を要してしまう。そこで量子アニーリングとよばれる新たなアーキテクチャが登場する。この方式では、各変数 x_i の取り得る値 (0, 1) は量子ビットの基底状態 ($|0\rangle, |1\rangle$) に対応する。複数の量子ビットに対して（横）磁場を印加し「量子ゆらぎ」をもたらすことで、量子ビットの状態に重ね合わせが生

じ、変数 \mathbf{x} が取り得る 2^N 個のパターン（＝解の候補）を同時に表すことができる。次に、量子ゆらぎを徐々に弱めていくと、量子ビット同士の相互作用が勝るようになり、系全体として安定になるように各量子ビットの値が定まる。これが量子アニーリングマシンから得られる最適化問題の解となる。この方式によって得られる解が、常に変数 \mathbf{x} の定義域内での大域的な最適解になりうるのか、古典手法と比べて常に高速に求解できるのかといった点については、現状では明確な結論に至っておらず、今後多くの実例を通して検証する必要がある。

量子アニーリングマシンは、2011年に世界初の商用量子コンピュータとして発表されたカナダの D-Wave Systems 社による D-Wave マシンを皮切りに、Google や NEC などが開発が進められてきた。また古典的アーキテクチャに基づくアニーリングマシン、たとえば CMOS（半導体の一種）を使用するアニーラー（富士通）や、GPU を使用したアニーラー（東芝）なども発表されており、現在これらの多くは商用サービスとして利用可能である³⁾。量子ビット数は数千ビット（D-Wave）から数十万ビット（GPU ベース）におよび、交通渋滞の緩和や物流経路の最適化など、現実的な問題に対する適用もみられるようになってきた。こうした先行例に刺激され、今後は生命科学分野においても実験条件の最適化などの実施例が報告されるようになる可能性がある。

3. 量子インスパイアドアルゴリズムによる線形演算の高速化

量子コンピュータに対する社会の関心が高まったきっかけの1つは、古典コンピュータでは計算時間がかかりすぎて実施困難な桁数の大きい素因数分解が、量子コンピュータ用のアルゴリズム（Shor のアルゴリズム⁸⁾）によって計算が指数関数的に高速化され、実行可能なことが示されたことにある。近い将来、十分な数の量子ビットを有するハードウェアが完成した暁には、現在利用されている素因数分解をベースとした暗号技術が破られ安全保障問題に発展することは必至であり、これが国家間での量子コンピュータの開発競争に拍車をかけることとなった。量子コンピュータで加速が期待される演算は素因数分解にとどまらず、たとえば主成分分析や線形回帰のような我々にとってより身近なものについても、古典アルゴリズムに比して指数関数的に高速実行可能な量子アルゴリズムが発表されてきてい

る。

一方興味深いことに、比べられる側の古典アルゴリズムにおいても、ある工夫を加えることで“量子コンピュータ並み”の計算速度で近似解が得られるものが話題となっている^{5, 10)}。これは量子インスパイアドアルゴリズム (quantum-inspired algorithms) と総称される古典コンピュータ用のアルゴリズムであり、その中核となるのは、高次元のベクトル同士の内積に対する高速近似である。同アルゴリズムでは、答えへの寄与が大きいベクトル要素を優先しながらサブサンプリングし、その積和を取ることで精度のよい内積の近似値を高速に得ることを可能とする。この近似法は行列の積や分解にも拡張できる。そして、ベクトルの内積や行列の積・分解が律速段階となる主成分分析や正準相関分析、非負値行列分解、サポートベクトルマシンに対しても、近似解が入力データの次元数 D に対して $O(\log D)$ 程度の計算時間で得られることが示されている。こうした線形演算は、バイオデータの主要な振る舞いを抽出したり、神経画像に対して線形変換の補正を行ったり、種々のパラメータを用いて二値分類を行うときに顔を出し、精神医学研究に携わる我々にとっても馴染み深い。古典コンピュータによる従来手法では計算時間がかかりすぎて直接取り扱えない大容量データを解析する場面において有用とされる事例が今後見いだされるかもしれない。

おわりに

本稿では、量子コンピューティング技術の開発状況や今後の見通し、また現状でもアクセス可能な関連技術について駆け足で述べた。生命科学的研究で本格的に活用できるのは 2030 年代以降となりそうであるが、現時点から開発動向を注視し、普段行っている研究とのリンクに考えを巡らせることは有意義であると思われる。紙面の都合から、数学的な詳細を一切省いたが、関心のある読者は参考文献⁷⁾などを参照されたい。

利益相反

本稿において、開示すべき利益相反は存在しない。

文 献

- 1) Arute F, Arya K, Babbush R, et al (2019) Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574 (7779) : 505-510.
- 2) Google Quantum AI (2023) Suppressing quantum errors by scaling a surface code logical qubit. *Nature*, 614 (7949) : 676-681.
- 3) 後藤隼人 (2022) イジングマシン—量子計算にインスパイアされた組合せ最適化計算機—. *日本神経回路学会誌*, 29 (4) : 174-185.
- 4) Konno S, Asavanant W, Hanamura F, et al (2024) Logical states for fault-tolerant quantum computation with propagating light. *Science*, 383 (6680) : 289-293.
- 5) 間島慶, 小出 (間島) 真子 (2022) 量子インスパイアドアルゴリズムによる機械学習の高速化. *日本神経回路学会誌*, 29 (4) : 186-192.
- 6) 御手洗光祐 (2022) 量子特徴量と量子ニューラルネットワーク. *日本神経回路学会誌*, 29 (4) : 202-210.
- 7) 嶋田義皓 (2020) 量子コンピューティング 基本アルゴリズムから量子機械学習まで. (情報処理学会出版委員会 / 監). オーム社, 東京
- 8) Shor PW (1994) Algorithms for quantum computation : discrete logarithms and factoring. *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 124-134.
- 9) 田中宗, 山下将司, 関優也 (2022) アニーリングマシンによるブラックボックス最適化. *日本神経回路学会誌*, 29 (4) : 164-173.
- 10) Tang E (2019) A quantum-inspired classical algorithm for recommendation systems. *STOC 2019 : Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*, 217-228.

■ ABSTRACT

Quantum computing's impact on life science : current state and future prospects

Noriaki Yahata^{1,2)}

1) *Institute for Quantum Life Science, National Institutes for Quantum Science and Technology*

2) *Department of Quantum Life Science, Graduate School of Science and Engineering, Chiba University*

In recent years, quantum computing technologies have sparked significant interest in the research community, prompting enthusiastic discussions about their potential impact on biological and medical sciences. This article provides a brief overview of the current state of development, challenges, and prospects of quantum computing technologies, focusing on several key aspects. Firstly, universal gate-based quantum computers offer the ability to tackle large-scale problems at unprecedented speeds. However, the development of fault-tolerant qubits presents a significant technical challenge. Secondly, while their applications are limited, commercially available quantum annealers can address scientific problems related to combinatorial optimization. Finally, quantum-inspired computational algorithms offer approximate solutions for specific linear operations on classical computers, with computational efficiency comparable to that of quantum computers. Despite their differences in content and development status, these computational technologies, all under the common “quantum” keyword, have the potential to revolutionize life science research and warrant further investigation.

(Japanese Journal of Biological Psychiatry 35 (3) : 120–124, 2024)
