CBI 学会 2021 年大会
「データ駆動型創薬を加速するプラットフォーム」

# 創薬研究におけるクラウド活用

Daisuke Miyamoto, Shoko Utsunomiya
Amazon Web Services Japan K.K.
2021/10/27

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 宮本 大輔

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社
技術統括本部
HPC ソリューションアーキテクト

製薬・金融・気象といった分野を中心に
AWS 上で大規模な計算を行われるお客様の技術支援を担当

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 本日の概要

- AWS のヘルスケア・ライフサイエンス領域への取り組み
- 創薬研究におけるクラウド活用の要点
- 創薬研究で用いられる AWS サービス例
    - HPC (High Performance Computing)
    - 機械学習・量子コンピューティング
- クラウド計算環境の活用事例

後ほど宇都宮よりご紹介

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Web Services の ヘルスケア・ライフサイエンス領域への取り組み

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# AWS は生活者・患者をとりまくステークホルダーのインフラをご支援

## Provider (医療機関)

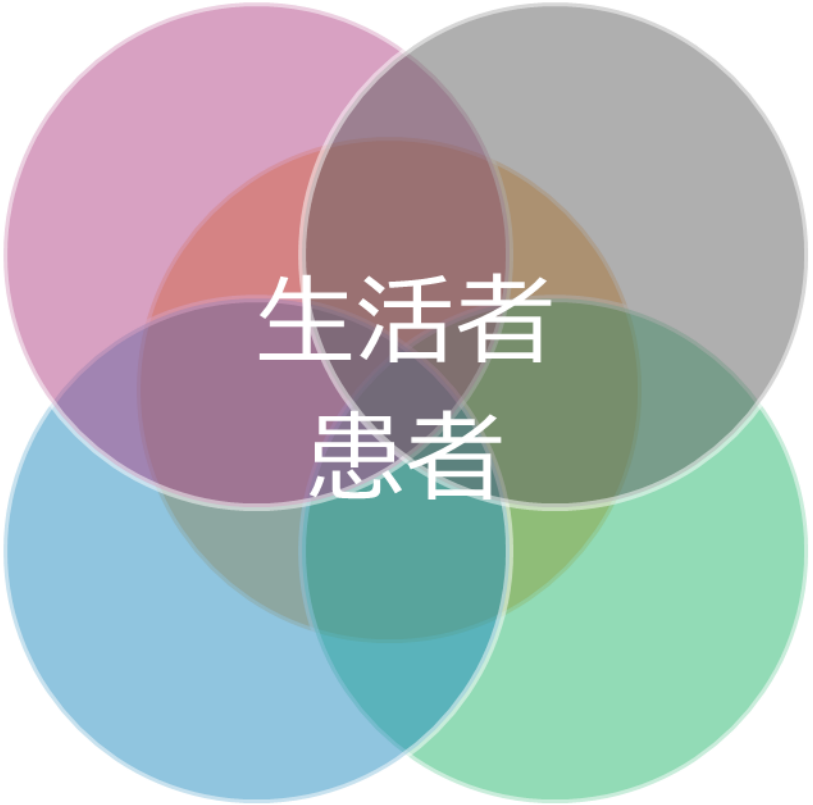
病院
クリニック
歯科
調剤薬局

介護施設・サービス
在宅支援

## Vendor (技術提供)

医薬品
健康医療機器

ISV・ソフトウェア
SI・サービス




## Payer (保険者)

健康保険組合
協会けんぽ
国保

企業 (総務担当)
～福利厚生～

(保険会社)

## Government (政府)

法規制
公衆衛生
研究者

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 国内における医療関連のお客様

(一部抜粋)

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

国立循環器病研究センター National Cerebral and Cardiovascular Center

特定機能病院 / 地方独立行政法人 大阪府立病院機構 大阪国際がんセンター

東京都済生会中央病院 TOKYO SAISEIKAI CENTRAL HOSPITAL

平成医療福祉グループ HEISEI MEDICAL WELFARE GROUP

sysmex Lighting the way with diagnostics

OMRON

Abbott

CureApp

SUSMED Sustainable Medicine

welby

LPIXEL

DeepEyeVision

GE

Allm SHAPING HEALTHCARE

京都ProMed

flixy

Media Contents Factory

MEDLEY

MICIN

Integrity Healthcare

JMDC

MDV medical.data.vision

Antaa

スギ薬局

MedPeer

KAKEHASHI

Solamichi System

MG-DX Medication Guidance Digital Transformation

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# 国内における公的研究・ゲノミクス・予防・介護関連のお客様

(一部抜粋)

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

国立循環器病研究センター National Cerebral and Cardiovascular Center

RIKEN

KEK

TAKARA BIO INC.

sysmex Lighting the way with diagnostics

Xcoo 【ténku:】

JMDC

Genesis Healthcare

Genequest

RUNNET

FiNC Technologies

ITで創るヘルスケアの未来 NDソフトウェア株式会社

D Free

Moff

wiseman

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# 国内における製薬関連のお客様

(一部抜粋)

astellas Leading Light for Life
Eisai
Otsuka
Kyowa KIRIN
sawai
SHIONOGI
Daiichi-Sankyo
Sumitomo Dainippon Pharma
すべての革新は患者さんのために
CHUGAI 中外製薬
Roche ロシュ グループ
LPIXEL
SYNTHETICGESTALT
Xcoo [ténku:]
Genequest
Agatha
EPS 株式会社EPクロア
3H clinical trial
SUSMED Sustainable Medicine
MICIN
OMRON
welby
CureApp
JMDC
FeelerSystemZ ITをもっとあなたのそばに
MDV medical.data.vision
MedPeer

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 創薬研究における
# クラウド活用の要点

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# クラウド とは？（一例）

『NIST によるクラウドコンピューティングの 定義』(IPAによる翻訳より一部)

**基本的な特徴**

- オンデマンド・セルフサービス (On-demand self-service): ユーザは、各サービスの提供者と直接やりとりすることなく、必要に応じ、自動的に、サーバーの稼働時間やネットワークストレージのようなコンピューティング能力を一方的に設定できる。
- スピーディな拡張性 (Rapid elasticity): コンピューティング能力は、伸縮自在に、場合によっては自動で割当ておよび提供が可能で、需要に応じて即座にスケールアウト／スケールインできる。ユーザにとっては、多くの場合、割当てのために利用可能な能力は無尽蔵で、いつでもどんな量でも調達可能のように見える。

IPA による翻訳: https://www.ipa.go.jp/files/000025366.pdf

クラウドの持つ
「必要なリソース」を「必要な時に」
「セルフサービス」で
確保できるという特性を研究に活用

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

単に既存環境の置き換えとして
クラウドを利用するだけではなく
課題・ボトルネックを解決する

↓

研究の本質に集中
研究を加速

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# インフラから見た創薬研究の課題

- 『多様かつ変動する計算リソース要求』
- 『計算環境の構築・維持の負担』
- 『組織内外を含む連携と再現性の担保』

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『多様かつ変動する計算リソース要求』

- **創薬研究で扱うデータの量は増え続けている**
  - *in silico* スクリーニングでの対象化合物数
  - NGS 検体数

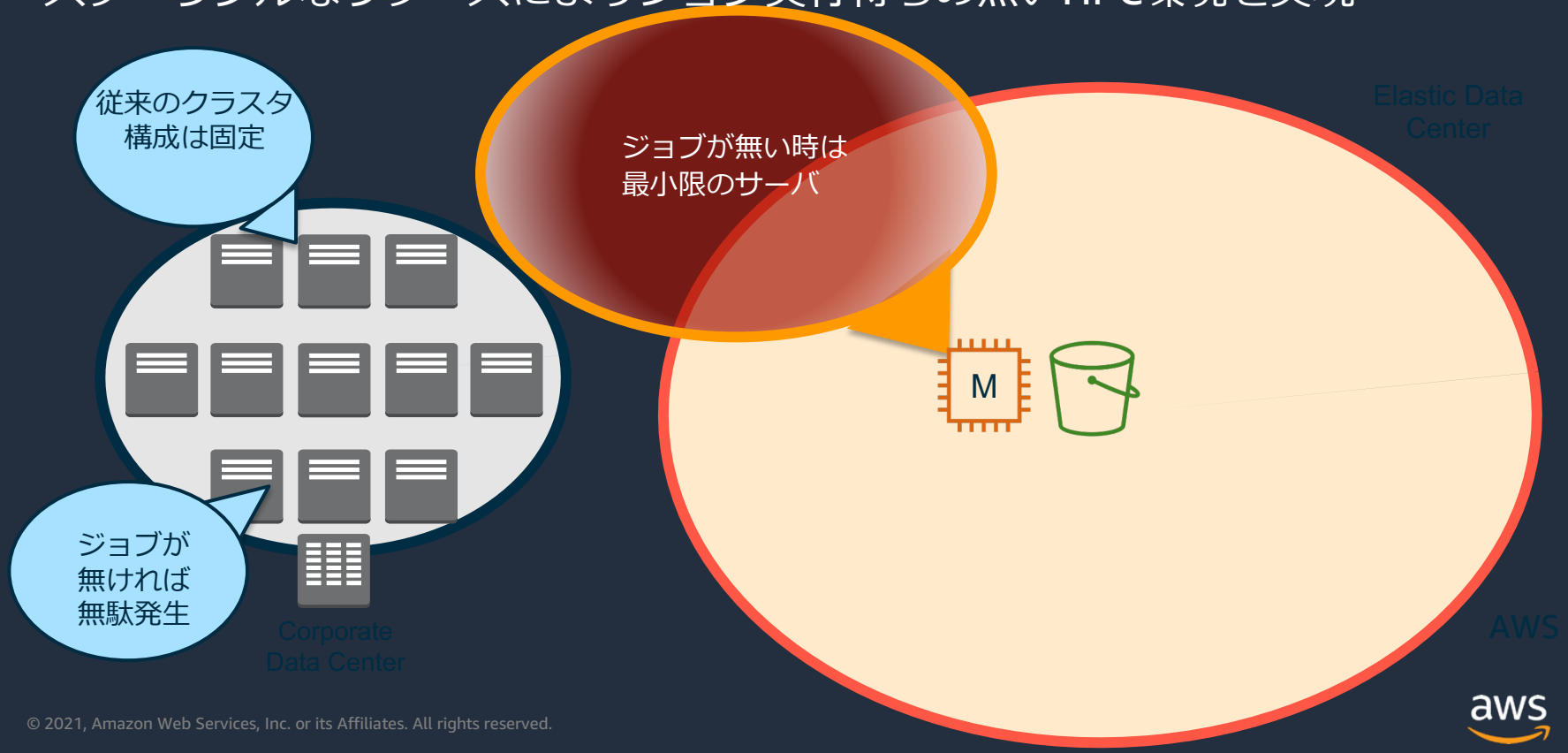
- 研究の時期によって必要な計算リソース量が大きく変動する
  - 小規模に開発・検証を行う時期、大規模に適用する時期、結果の保持だけを行う時期等

- 利用されるアプリケーションの多様化
  - 古典的な HPC と機械学習では必要な計算環境が異なる
  - メモリの量、アクセラレータの有無

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# クラウドのスケーラビリティを活用

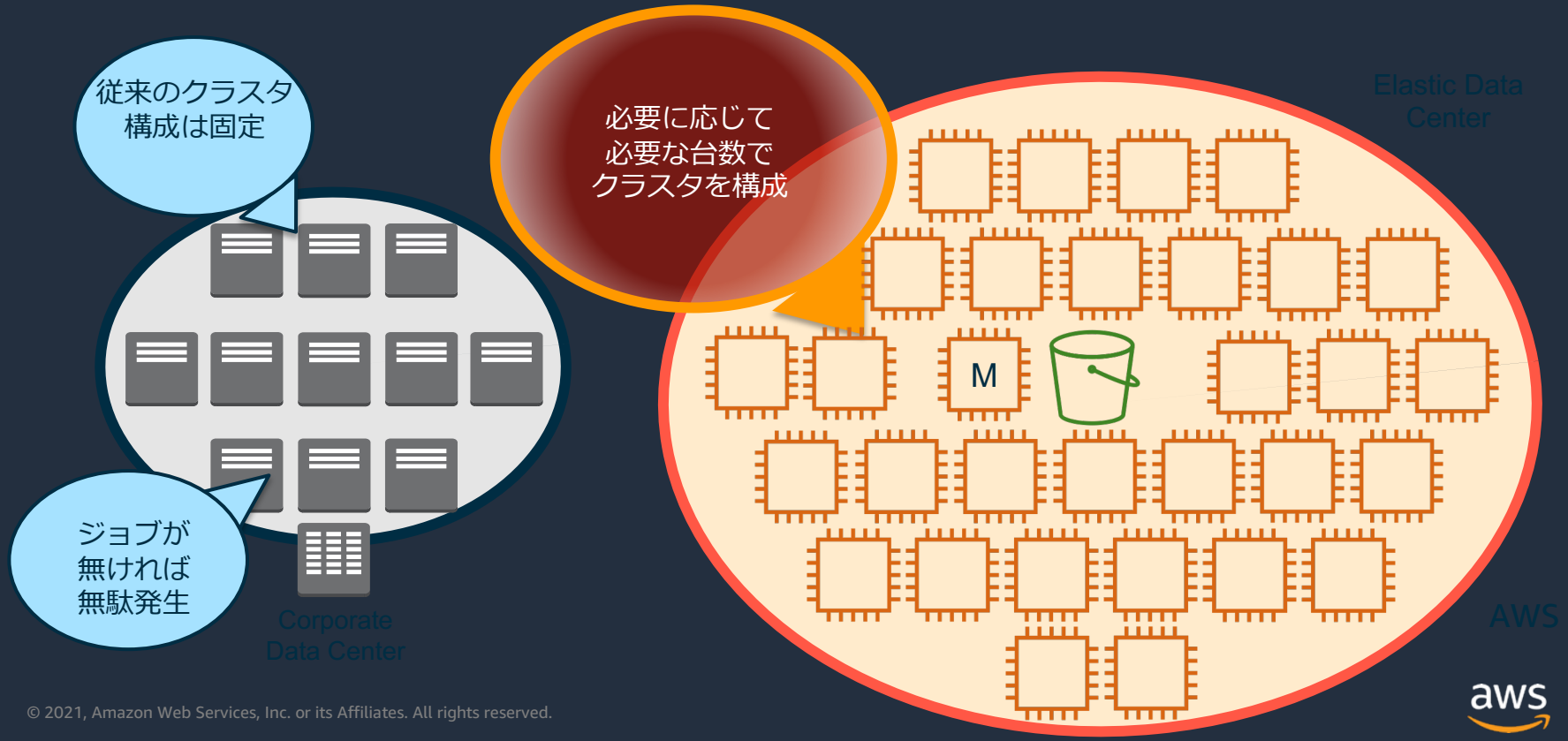
スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# クラウドのスケーラビリティを活用

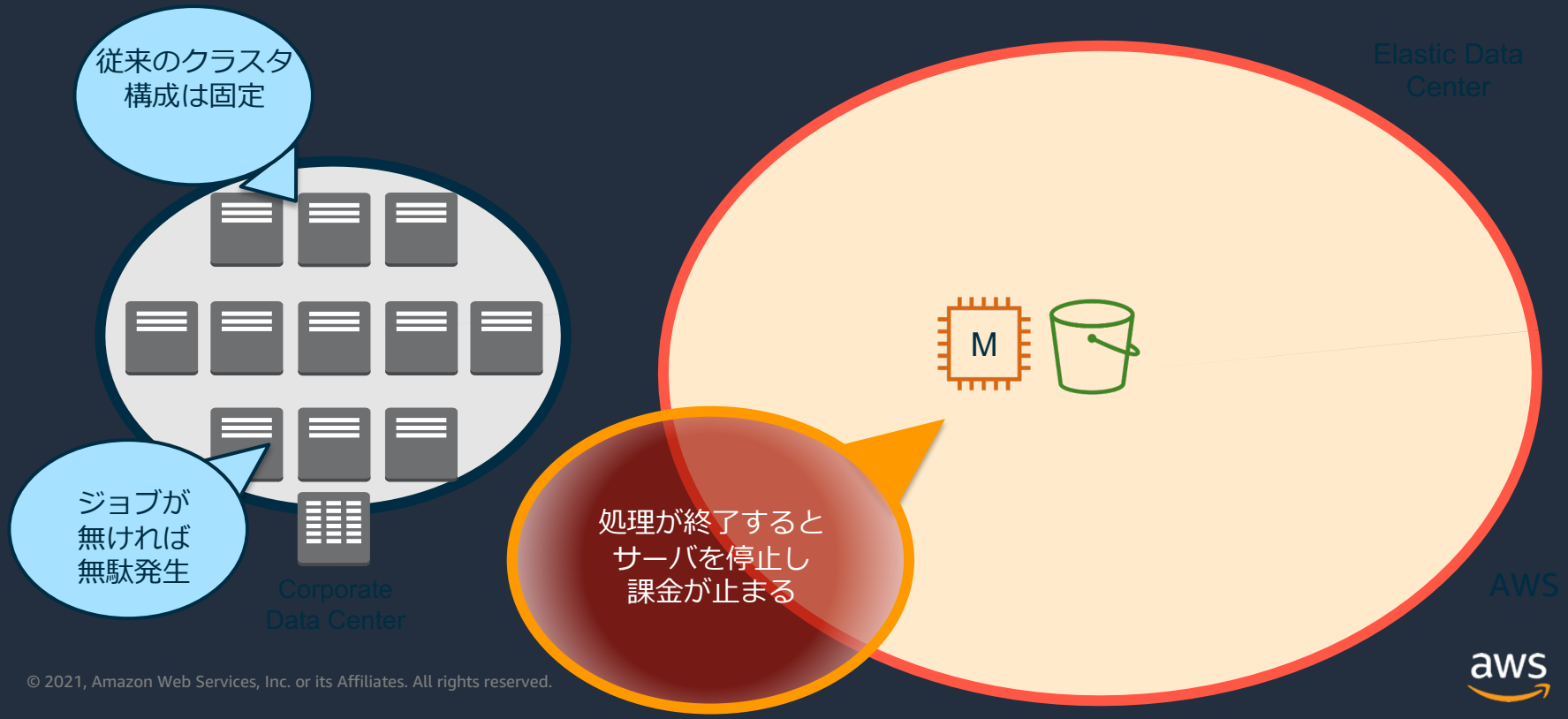
スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# クラウドのスケーラビリティを活用

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 多様な構成から目的に合ったものを選択可能

クラウドでは様々なサーバの種類（インスタンスタイプ）を提供しており
用途に合わせて柔軟に選択できる

- CPUコア数/メモリ量
- ストレージ
- アクセラレータ
- ネットワーク
- インストールするソフトウェア

CPU

| intel | AMD | arm aws |
|---|---|---|
| INTEL Xeon Scalable processors | AMD EPYC processor | AWS Graviton2 Processor |

Accelerator

| NVIDIA | XILINX | aws | AMD |
|---|---|---|---|
| A100 and T4 Tensor Core GPUs | FPGAs for custom hardware acceleration | AWS Inferentia | Radeon Pro V520 GPU |

**One size does not fit all!**

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『多様かつ変動する計算リソース要求』への対応

## クラウドのスケーラビリティ・柔軟性の活用
## 固定のインフラから可変のインフラへ

更には・・・

- ラボラトリーオートメーションのような事前に変動が読みにくいワークロードへの対応
- 量子コンピュータのような「新しい」ハードウェアへのチャレンジ

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『計算環境の構築・維持の負担』

- 管理するサーバの台数増加
  - ハードウェア管理の手間
  - 故障時対応
  - 統一的なセキュリティ対応

- 多様な「サービス」構築の労力
  - HPCクラスタの構築
  - データベース、データレイクなどのデータ分析基盤

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 計算機管理の手間を抑える

・ハードウェア保守
・ネットワーク管理/保守
・電源管理
・空調管理
・設置場所の費用/運用

計算機の規模が大きくなればなるほど
大変に、、、

**競争優位につながらない物理的管理は全てAWSにお任せ**
**他社と差別化可能な部分に集中**

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# マネージドサービスの活用と Building Block の考え方

多くのクラウド では、仮想サーバだけでなく、
ユーザーが共通に利用するような

- ストレージ
- データベース
- データレイク、データウェアハウス
- HPC クラスタ

といったサービスを提供している

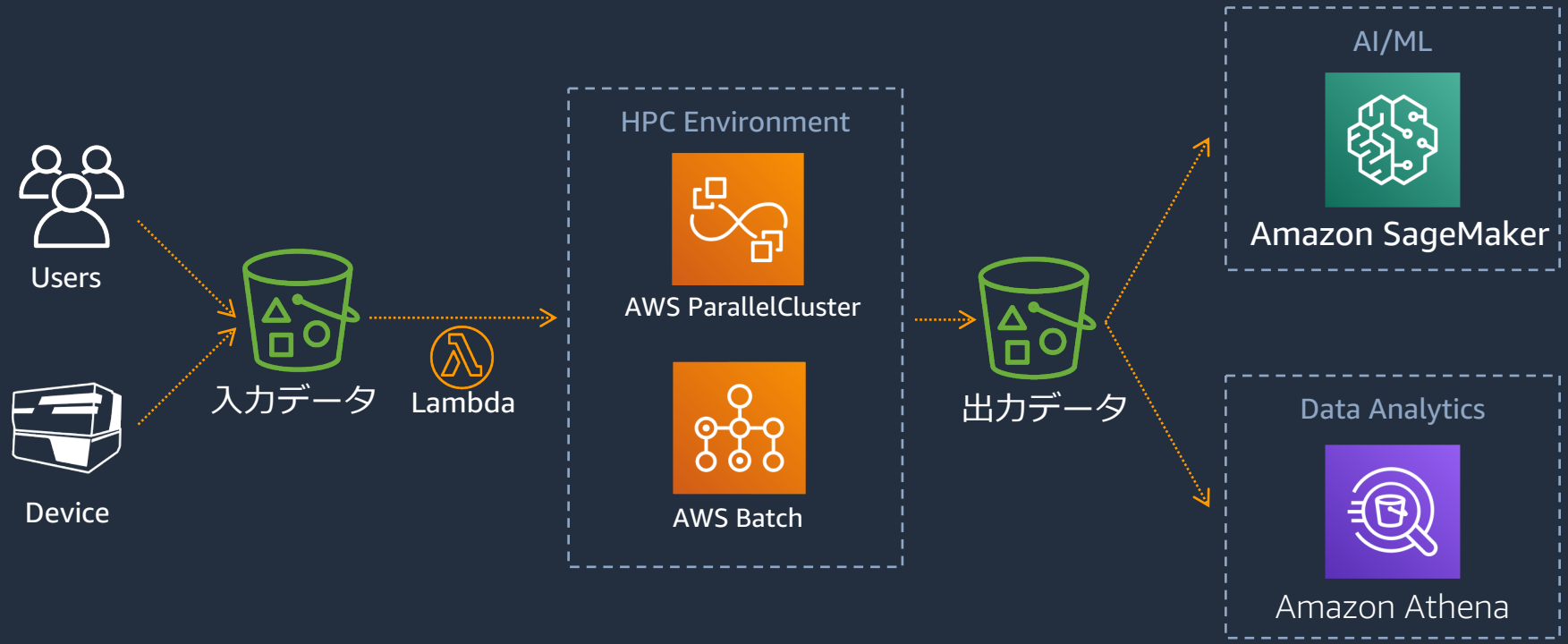
これらのサービスを適材適所で組み合わせ、やりたいことを最小の手間で実現する

→ Building Block の活用

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 例：データドリブンなHPC環境とデータ活用

データのアップロードをトリガーにHPC環境を展開し自動で処理を行う
更にS3のデータレイク化により大規模シミュレーション結果を機械学習環境で活用




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『計算環境の構築・維持の負担』への対応

## クラウドのマネージドサービス・Building Blockの活用
## 「自分たちで作る」から、「あるものを組み合わせる」へ

更には・・・

- HPCやデータ分析基盤の迅速な立ち上げ
- 研究者が、必要な時に自分ですぐに環境を手に入れられるセルフサービス化

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『組織内外を含めた連携と再現性の担保』

- 作成したプログラムが別の環境で動作しない
  - ライブラリなどの依存関係が明確ではない
  - ハードウェアが異なり結果に差が出る
  - ある日突然動かなくなる

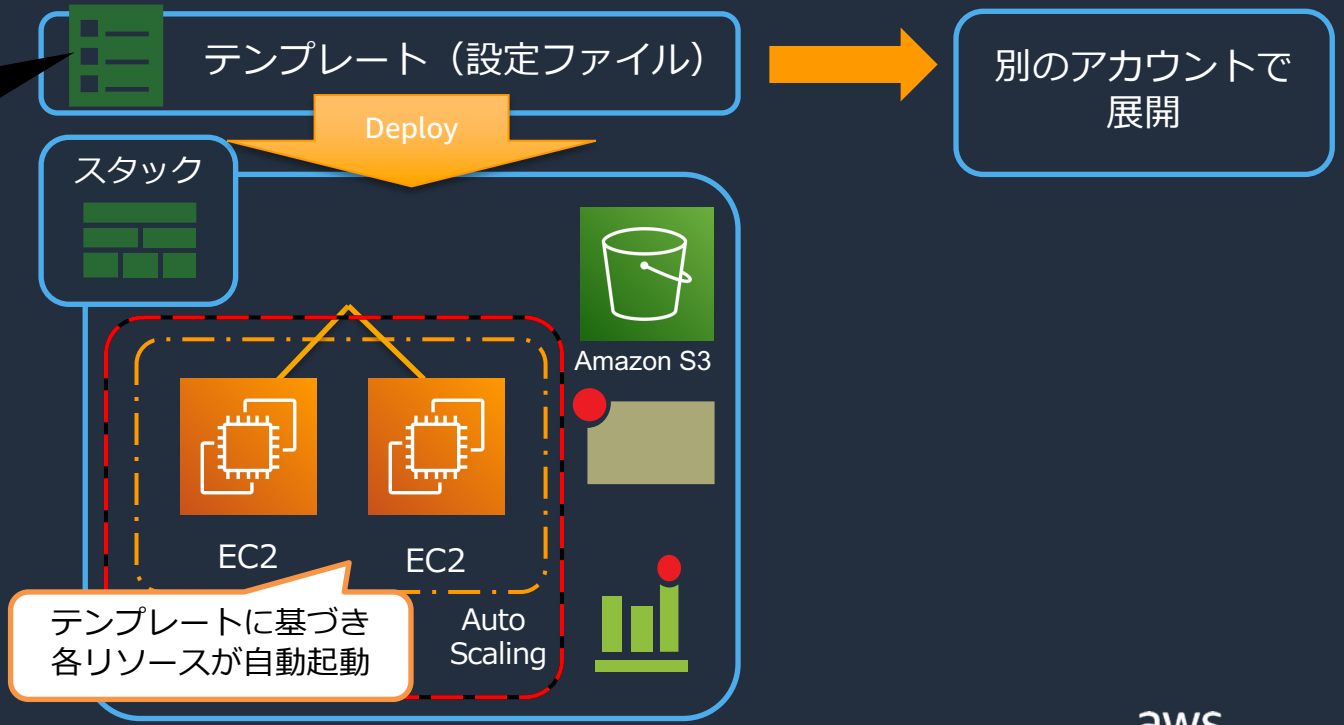
- 企業-アカデミックでの連携がしにくい
  - 企業内ネットワークに外部研究者を入れられない
  - 共同研究用のインフラをどこに設置するか

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# インフラ環境のポータビリティ

マシンのイメージ化や、Infrastructure as a Code によって
同じ環境を複製したり、別のユーザーが容易に再現可能になる

```
EC2Instance:
  Type: AWS::EC2::Instance
  Properties:
    KeyName: !Ref KeyName
    InstanceType: m5.large
    SecurityGroups:
    - !Ref Ec2SecurityGroup
    BlockDeviceMappings:
      -
        DeviceName: /dev/sdc
        VirtualName: ephemeral0
```




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 『組織内外を含めた連携と再現性の担保』への対応

## クラウドのポータビリティの活用
## 「同じ環境の共同利用」から、「再現可能な環境の複製」へ

更には・・・

- バージョン管理、コンテナ化、自動テスト、CI/CD（継続的インテグレーション・継続的デプロイ）といったモダンな開発手法の採用と様々なレイヤーでの「再現性の担保」のためにも、様々なマネージドサービスが活用可能

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# クラウド活用の課題

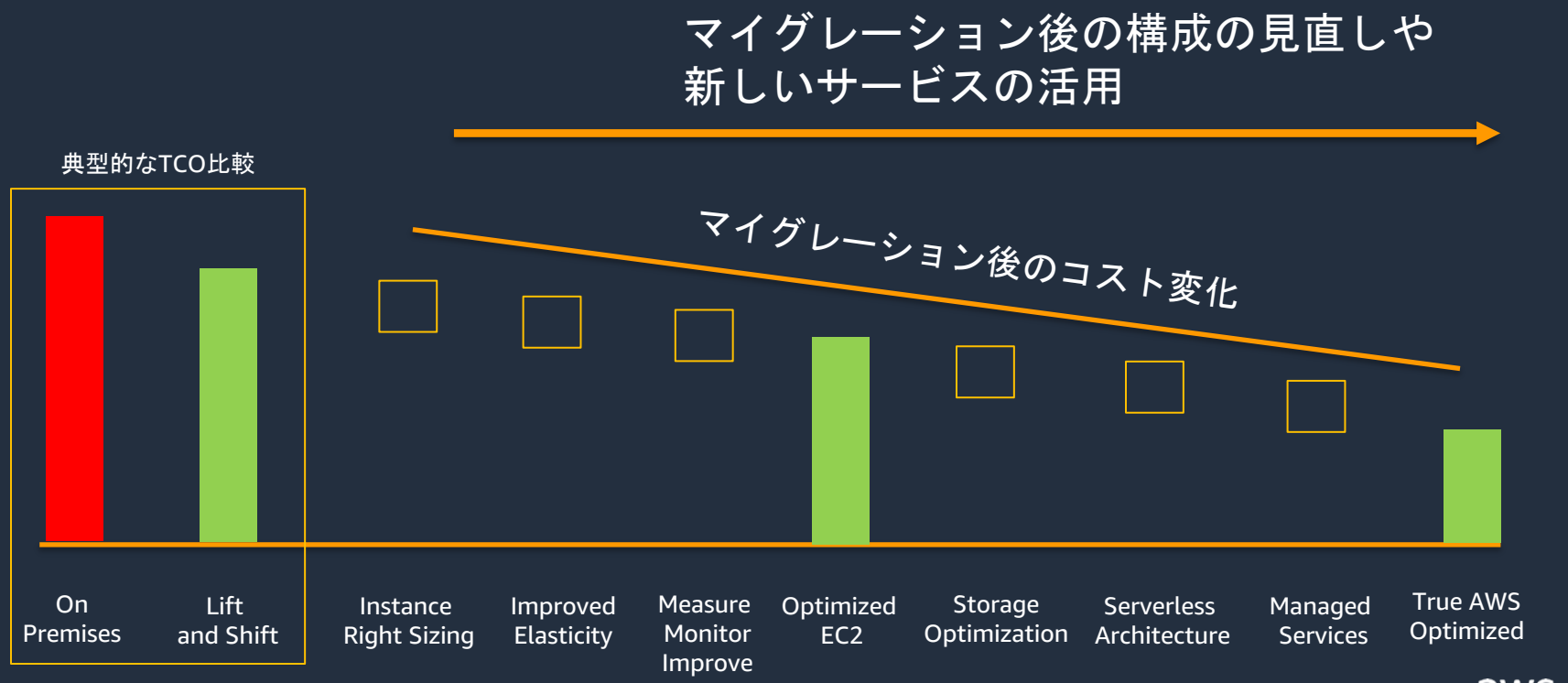
## 研究者と IT 担当の責任分界点を変えていく必要がある

セルフサービス化のためのルール策定
学習コスト
プロジェクト単位のコスト管理

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# クラウドにおける継続的な改善

クラウド活用では、最初から最適を目指すのではなく
小さな改善のサイクルを継続的に実施していくことが重要




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# インフラから見た創薬研究の課題への対応（3 + 1）

- **多様かつ変動する計算リソース要求**
  - クラウドのスケーラビリティ・柔軟性の活用により
    「固定のインフラ」から、「可変のインフラ」へ
- **計算環境の構築・維持の負担**
  - クラウドのマネージドサービス・Building Block の活用により
    「自分たちで作る」から、「あるものを組み合わせる」へ
- **組織内外を含めた連携と再現性の担保**
  - クラウドのポータビリティの活用により
    「同じ環境の共同利用」から、「再現可能な環境の複製」へ

**＋ 継続的な改善**

- 課題は各社差があり、優先順位も異なる
  ボトルネックになっている部分から少しづつ取り組んでいく

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 創薬研究で用いられる AWS サービス例

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# Amazon EC2 (Elastic Compute Cloud)

必要なときに必要な計算リソースを確保可能な仮想サーバサービス

- 数分で起動し、秒単位の従量課金（一部タイプについては1時間単位）
- 独自の仮想化基盤 Nitro System により、仮想化オーバーヘッドを極小化
- ワークロードに応じて様々なインスタンスタイプを選択可能

## 高性能計算向けインスタンスタイプの例

### 高性能 CPU の選択肢

**Intel Xeon processor**
(x86_64 arch)

**M6i インスタンス**
Ice Lake
最大時全コア 3.5 GHz 駆動
**M5zn インスタンス**
Cascade Lake
最大全コア 4.5 GHz 駆動

**AMD EPYC processor※**
(x86_64 arch)

**C5a インスタンス**
EPYC Rome
最大 3.3 GHz 駆動

**AWS Graviton Processor**
(64-bit Arm arch)

**C6g インスタンス**
64bit Arm Neoverse N1ベース
Graviton2 CPU 搭載

### アクセラレータの選択肢

**NVIDIA GPU**

**P3 インスタンス**
V100 GPU 搭載
**P4d インスタンス**
A100 GPU 搭載
**G4 インスタンス**
T4 GPU 搭載

**Xilinx FPGA**

**F1 インスタンス**
Virtex UltraScale+
VU9P 搭載

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

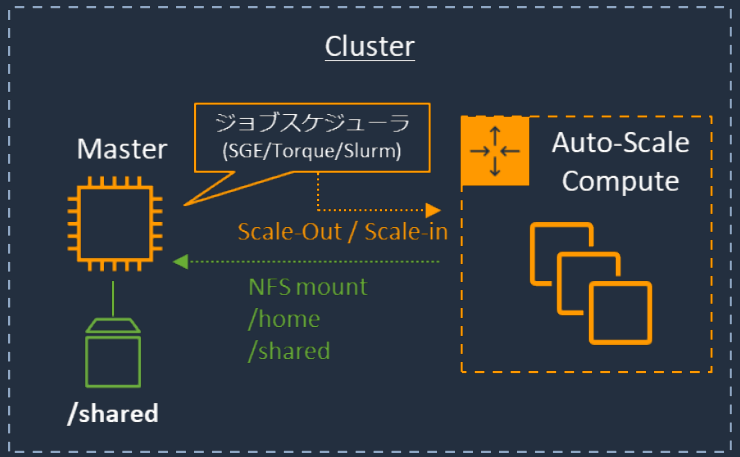
※ 第3世代 AMD EPYC Processor についてもアナウンス済み
https://aws.amazon.com/blogs/apn/aws-to-offer-third-generation-amd-epyc-based-amazon-ec2-instances/

# AWS ParallelCluster とは

ジョブ投入に応じて自動でスケールするクラスタを
AWS 上に構築可能な AWS 公式のオープンソースソフトウェア

## AWS ParallelCluster の特徴

- 既存のHPC向けジョブスケジューラと Auto-Scaling を連携した環境を作成
  **Slurm** / SGE / Torque ※に対応
- 少しのコマンド操作でクラスタ作成可能
- MPI/NCCL 環境がセットアップ済みで、すぐに利用可能
- 使用するOSやネットワーク環境、ストレージ構成などを柔軟にカスタマイズ可能
- オープンソースソースのプロジェクトであり、誰でもソースコードを入手可能
  https://github.com/aws/aws-parallelcluster

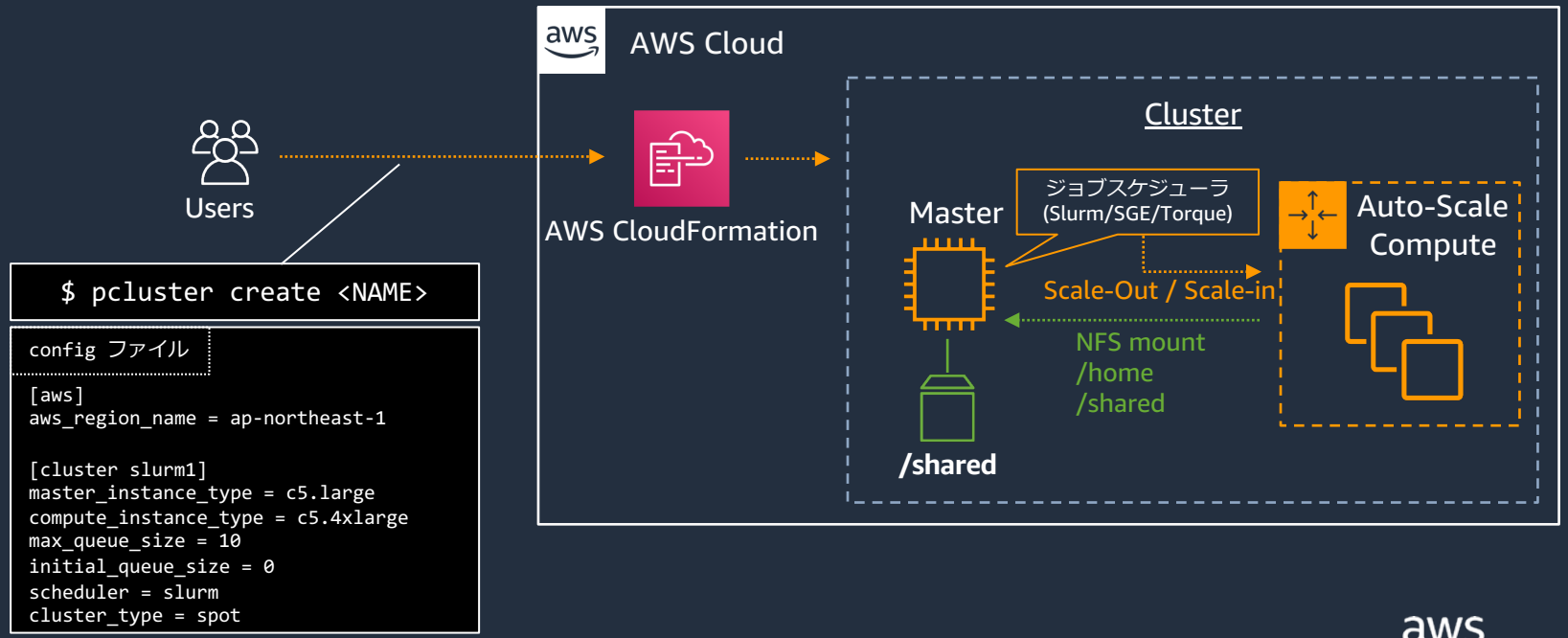



※ 将来的にSGE/Torqueについてはサポートの終了がアナウンスされており、Slurmの利用を推奨

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS ParallelCluster の利用イメージ

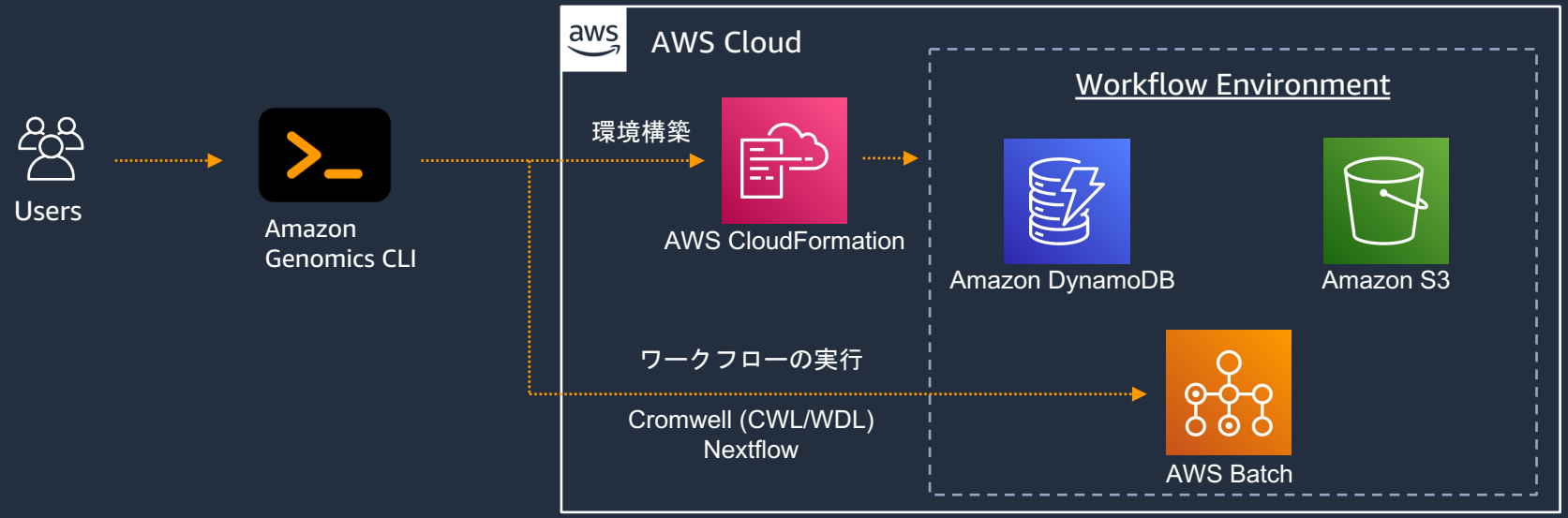
まずは自分のPC等に ParallelCluster ソフトウェアをインストール
config ファイルを記述し、pcluster create コマンドを実行することで、
ジョブ投入に応じて Auto-Scale するクラスタ環境が自動的に作成される




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Genomics CLI

ゲノム解析用のワークフロー実行環境を数コマンドでAWS 上に構築可能
Cromwell (CWL/WDL) や Nextflow に対応
オープンソースソフトウェアとして提供



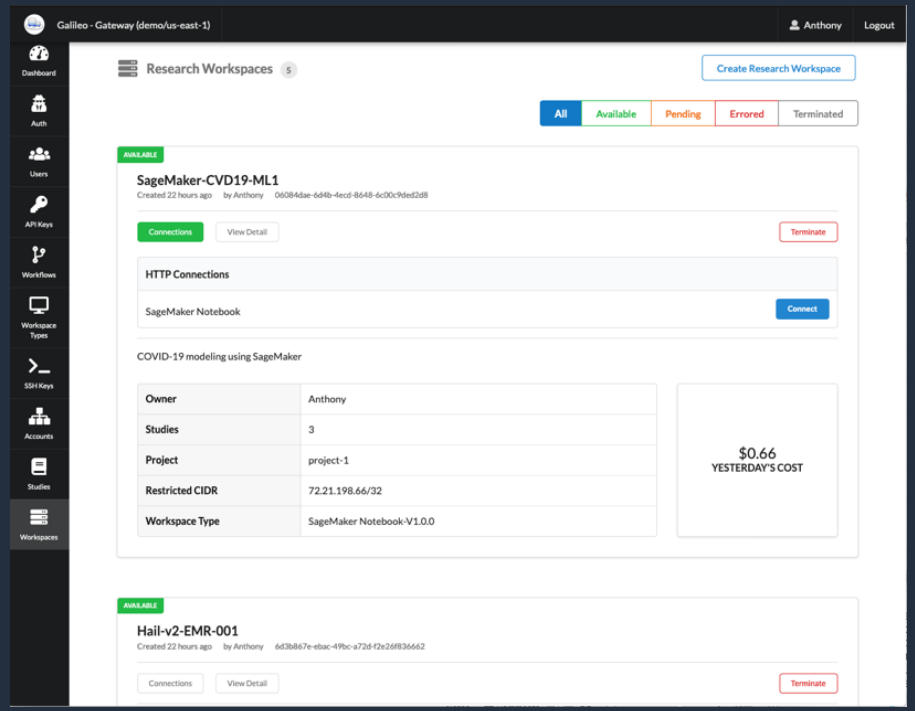

https://aws.amazon.com/genomics-cli/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Service Workbench on AWS

研究者向けのコンピューティング環境をWebポータルとして提供可能なクラウドソリューション

- ユーザーがオンデマンドで環境を構築可能
  - 許可されたAWS環境をテンプレートとしてユーザーに提供
  - AWS環境を数分で立ち上げ可能
- ユーザーによるAWSコンソール操作は不要
  - ユーザーはService Workbench on AWSが提供するWebポータルサイトからAWS環境にアクセス可能
  - Webポータルサイトを利用頂くことでクラウドの経験がないユーザーも利用しやすい
- 社内外のチーム間で安全にコラボレーション
  - Webポータルサイト経由で社外にAWS環境を提供可能
  - プロジェクト単位でコストを可視化可能




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

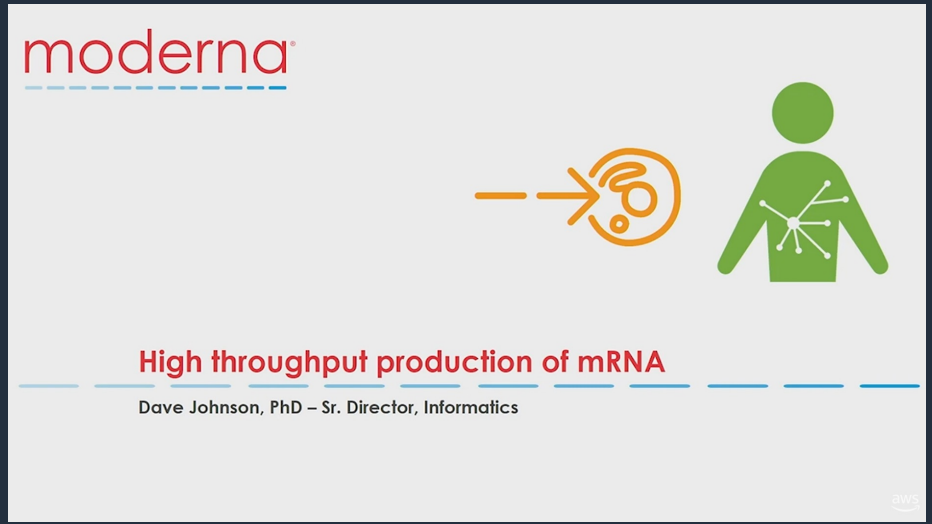
# クラウド計算環境の活用事例

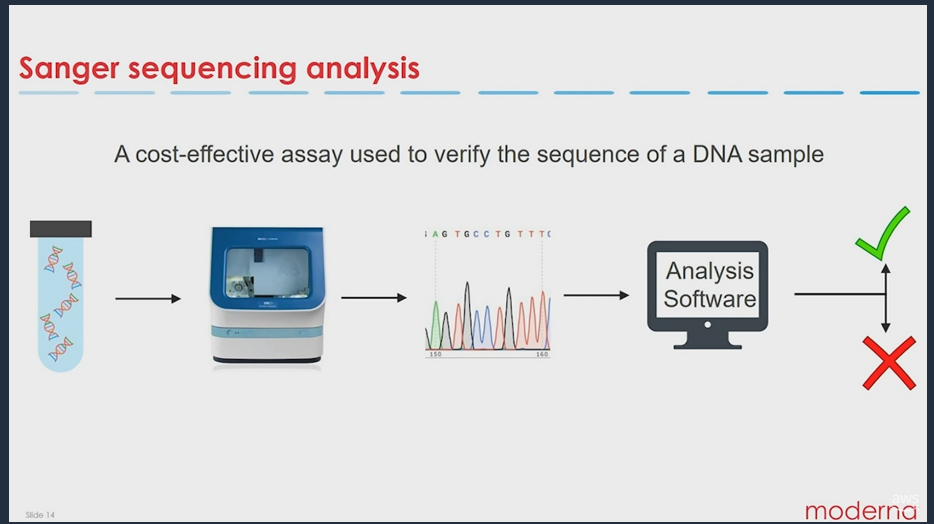
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# moderna: High throughput production of mRNA

moderna では様々な段階でサンガー法による評価を実施

解析は GUI のソフトウェアによる手動の部分が多く、一日に実施できる解析数が課題に



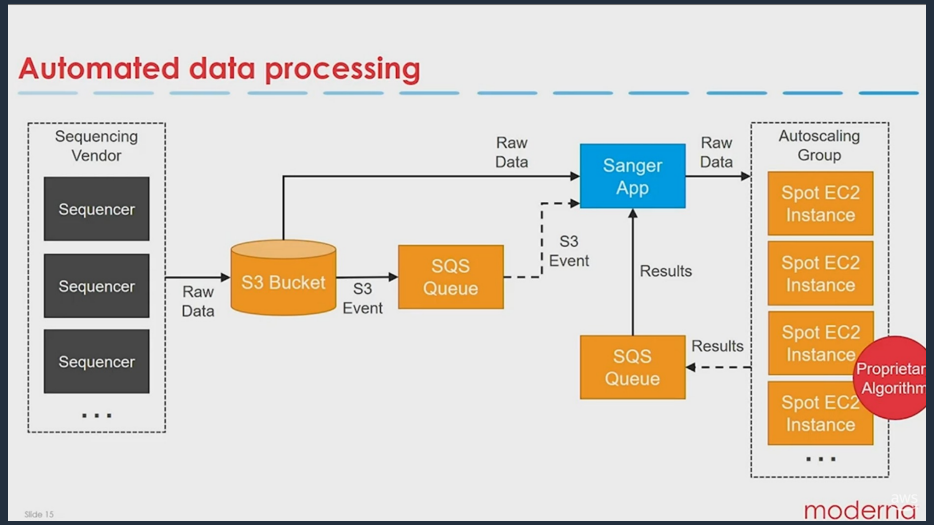

https://www.youtube.com/watch?v=cxu2cD5FBcg

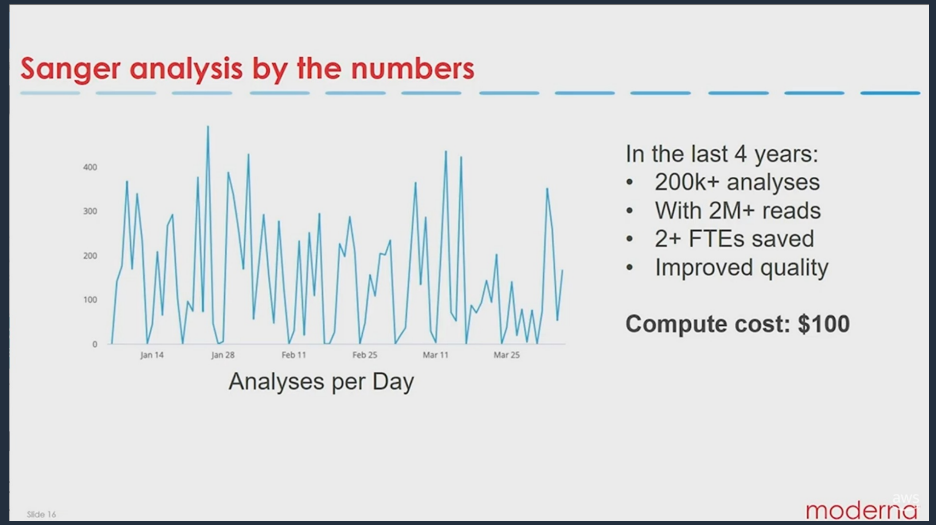
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# moderna: High Throughput production of mRNA

データ納品から評価までを自動で行うワークフローを構築

- Sequencing Vendor に S3 への書き込み権限を提供データがアップロードされると自動で queue に投入され、スケーラブルな環境で処理
- 1日当たり約400件の解析が可能になり、かつ安価なコストと品質の向上を実現



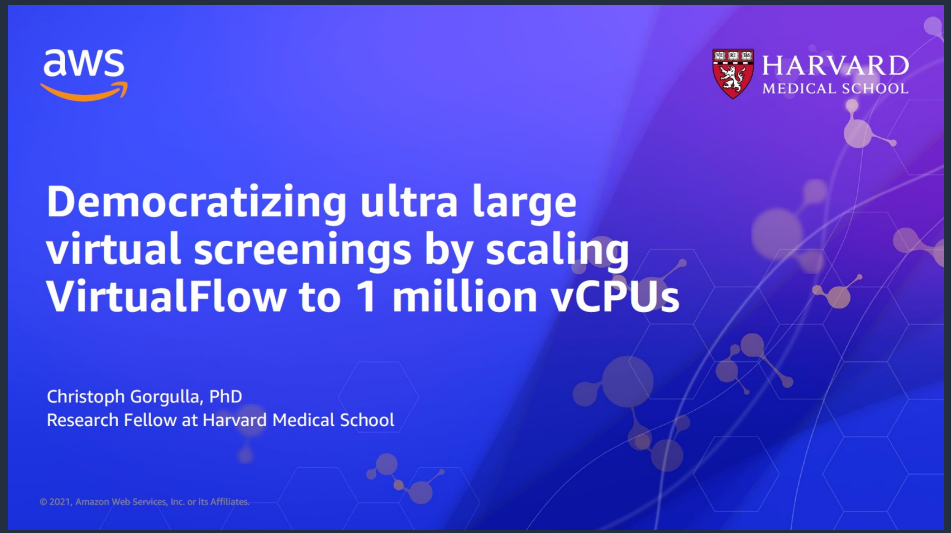



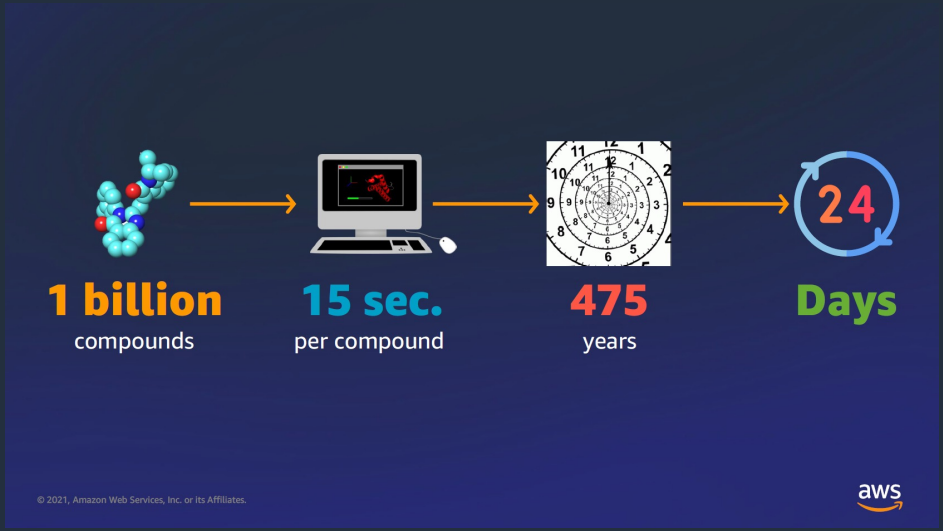

https://www.youtube.com/watch?v=cxu2cD5FBcg

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# Harvard Medical School での Ultra Large Virtual Screenings

10 億に及ぶような超大規模なドッキングシミュレーションを実施したいが、
1 化合物 15 秒で計算したとしてもそのままでは 475 年かかってしまう
実用的には数日で終わらせる必要がある



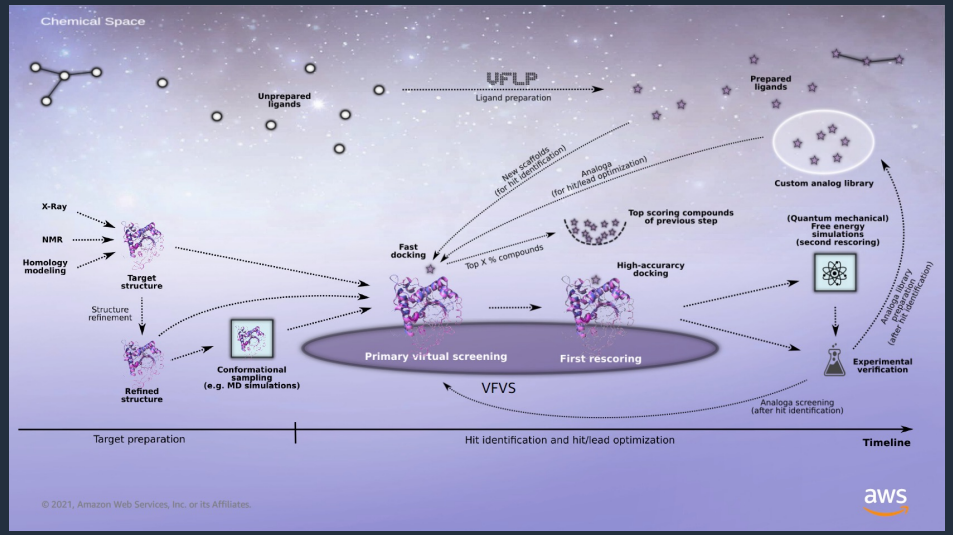




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

https://www.youtube.com/watch?v=q-Xh-qLv32o

# Harvard Medical School での Ultra Large Virtual Screenings

超大規模なドッキングシミュレーションを短時間で処理するため、
VirtualFlow というフレームワークを開発し、Slurm 等のジョブスケジューラに対応
AWS ParallelCluster を使用することで、最大 240,000 vCPU を動的に確保
1億2000万化合物のデータセットでは、7 時間で 71.9 % の処理を完了




## Initial VirtualFlow Scaling on AWS

With AWS we ran a 120M ligand dataset to evaluate scaling. This architecture scaled to 240,000 vCPUs on ParallelCluster (and could have gone higher!)

| | | | |
|---|---|---|---|
| 9,600 vCPUs | 22 hours → | 8.6% complete<br>11,677,064 ligands completed | |
| 240,000 vCPUs | 7 hours → | 71.9% complete<br>97,109,644 ligands completed | **26.3x faster than 9,600 vCPUs** (w/ 25x vCPUs) |

High Exhaustiveness setting → More compute intensive

**As we look to scale to billions of ligands, can we adopt more cloud native technologies to complete screening even faster?**

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

aws

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

https://www.youtube.com/watch?v=q-Xh-qLv32o

aws

# Harvard Medical School での Ultra Large Virtual Screenings

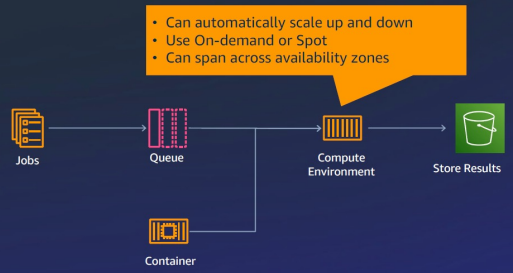
更にクラウドを有効活用するため、計算環境としてAWS Batch、ストレージとして Amazon S3 を使用したアーキテクチャに変更することで、
100万 vCPU を超えるリソースを確保し、2.2 時間で 99.9 % の処理が完了

## AWS Batch + S3 + EC2 Spot

AWS Batch

AWS Batch dynamically provisions resources, plans, schedules, and executes

No additional components to install

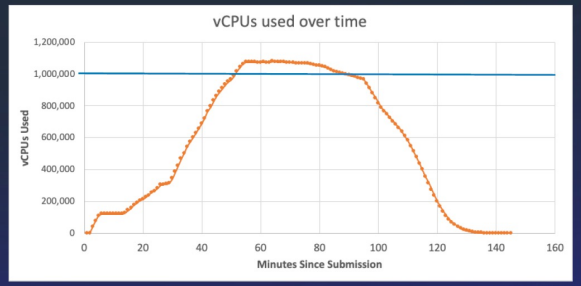



+ We were able to use Amazon S3 for both input and output storage to remove the need for a large shared filesystem

https://github.com/VirtualFlow

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

## Record-setting scale at ~1.1M vCPUs on VirtualFlow




~1.1M vCPUs → 2.2 hours → 99.9% complete
133,711,471 ligands completed

115.2x faster than 9600vCPUs (w/ 114.5x vCPUs)

High Exhaustiveness setting → More compute intensive

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

https://www.youtube.com/watch?v=q-Xh-qLv32o

# CBI 学会における AWS 関連事例（2019年・2020年）

**2019年大会**

- エーザイ株式会社 長岡 和也 様
  「エーザイの創薬研究における AWS 活用事例」
  ドッキングシミュレーションでの活用

**2020年大会**

- 大日本住友製薬株式会社 田村 明敏 様、池田 圭吾 様
  「大日本住友製薬の創薬研究における AWS 活用事例」
  機械学習による動物の行動評価の自動化・定量化
- 産業技術総合研究所 福西 快文 様
  株式会社情報数理バイオ 真下 忠彰 様
  株式会社バイオモデリングリサーチ 中村 寛則 様
  バイヘックス有限責任事業組合 若林 良徳 様
  「創薬研究におけるクラウド活用の実際 - myPresto × AWS -」

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# CBI 学会における AWS 関連事例（2021年）

## 2021年大会

- 中外製薬株式会社 荒川 晶彦 様、角崎 太郎 様、西藤 ゆかり 様
  「中外製薬の創薬研究における AWS 活用事例紹介」
  DX に関する取り組みおよび
  AWS Batch による大規模 MD シミュレーションと NGS 解析

- 高エネルギー加速器研究機構 山田 悠介 様、守屋 俊夫 様
  「構造生物学研究におけるクラウド活用の現在と展望」
  X線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡単粒子解析の実施に加え、
  自動化・IoT化に向けた展望

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# ここからは
# 機械学習・量子コンピュータの
# サービス・事例についてご紹介

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

# HPC on AWS

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates.

CBI 学会 2021 年大会
「データ駆動型創薬を加速するプラットフォーム」

# AWS における
# 機械学習と量子コンピューティング

Shoko Utsunomiya
Senior Solutions Architect
Amazon Web Services Japan G.K.

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 宇都宮聖子, Ph.D.

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社
技術統括本部 シニア機械学習ソリューションアーキテクト

2018年よりAWSにジョイン
AWS 機械学習・量子コンピュータを担当

前職は、自動車 OEM にて機械学習を用いた自動運転開発
前々職は、国立情報学研究所にて量子コンピュータの研究者

好きな AWS サービス: Amazon SageMaker, Amazon Braket

Twitter: shokout

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

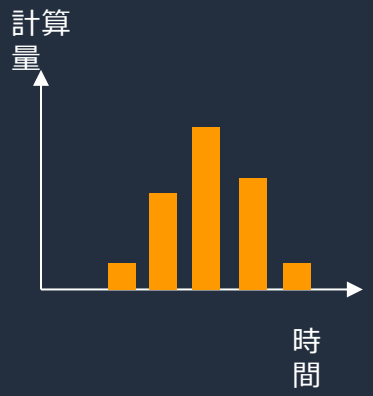
# AI 創薬の研究開発にむけた AWS の機械学習サービス

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 機械学習 R&D 環境構築における課題

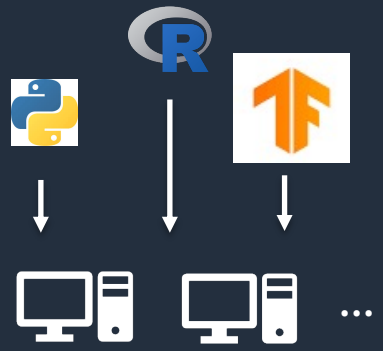
## 計算量の変化

計算リソースの調達
実験期間中のみ
大量の計算が発生




## 実験設定の手間

環境を変えるたびに
実験用設定を実施




## 実験内容の管理

実験を繰り返すうちに、
実験条件（データなど）
と結果の管理が煩雑に

## 機密データの保護

R&D で利用するデータ
の多くは機密性が高く
インターネット外に出
せない

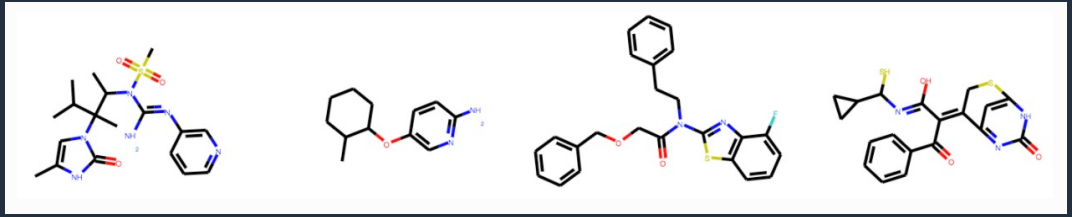
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon SageMaker - 俊敏に機械学習環境を構築

Amazon での機械学習の経験と、お客様からのフィードバックにもとづいて
機械学習の課題を解決するために開発されたマネージドサービス

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# DGL-LifeSci: Bringing Graph Neural Networks to Chemistry and Biology



- 化学、生物学領域で GNN (Graph Neural Network) を使うための OSS
  - DGL (Deep Graph Library) と PyTorch がバックエンド
  - AWS メンバーなどで開発： https://github.com/awslabs/dgl-lifesci
  - 化合物に対する最近の GNN 論文の実装なども含まれる
- データの前処理から学習、評価、可視化などの機能
- 事前学習済みのモデルを利用可能

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon SageMaker を使った AI創薬

事例：開発・学習環境

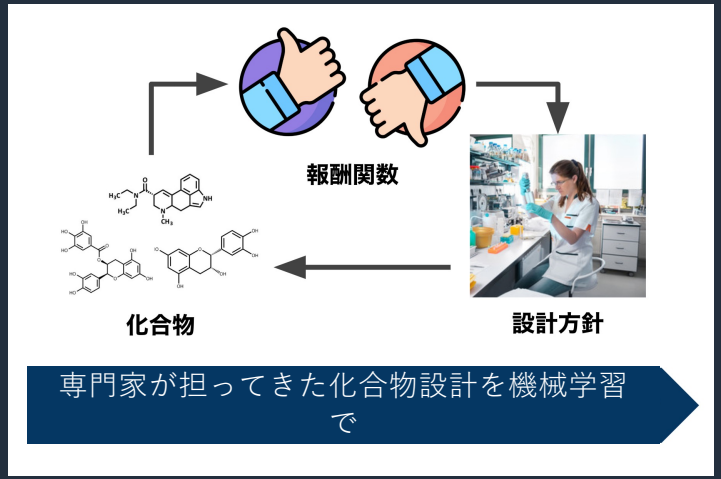
- 医薬候補となる低分子化合物の設計
- 従来は専門家の知見に基づく設計

SyntheticGestalt 社

SYNTHETICGESTALT

## Amazon SageMaker で設計環境を構築

- データ駆動の報酬関数とシミュレーション環境により、疾病原因となりうる標的タンパク質に合わせて低分子化合物を設計
- コンテナを持ち込み、PyTorchと独自開発のシミュレーション環境をそのまま Amazon SageMaker に適応



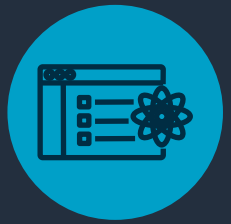

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 創薬と量子コンピューティング

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子コンピュータ どんな分野に応用できる？

## - 期待されている量子コンピュータのユースケース

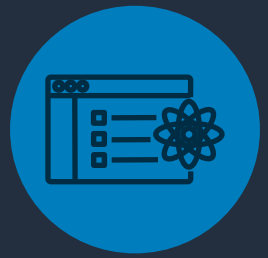


- 量子化学計算、創薬、材料化学
- 量子機械学習

- 金融（ポートフォリオ最適化、リスク計算、オプション価格決定）
- 交通系（配送計画最適化、交通経路探索）
- 最適化（レコメンデーション、人材配置）

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子コンピューティングと計算化学



| 適用が模索されているユースケース例 | |
|---|---|
| 格子タンパク質の折り畳み | 電子構造シミュレーション |
| エネルギーの基底状態計算 | バーチャルスクリーニング分子類似性 |

- 量子化学計算、量子物性探索、創薬、材料工学などの分野で量子コンピューティングの適用を模索
- 現状は限られた量子ビット数（デバイスサイズ）

  → 実用化に向けて研究段階、試行錯誤できる環境が必要
- 量子・古典ハイブリッド手法 (NISQ) を用いた新たな計算化学のパラダイム

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket

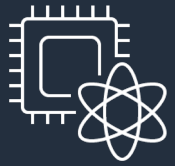
## - 全ての開発者・科学者の手に量子コンピューティングを

### 設計

マネージド開発環境

### テスト

ハイパフォーマンスな
回路シミュレータ



### 実行

セキュア・オンデマンドな
量子ハードウェアで
ハイブリッド計算

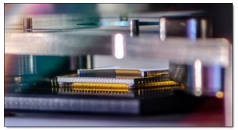
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子デバイス (QPU)

- ゲートベース量子コンピュータ
  - Rigetti : 超伝導量子ビット (The Rigetti Aspen-8)
    - 32量子ビット、結合は部分的
  - IonQ : イオントラップ量子ビット (IonQ linear trap)
    - 11量子ビット、全結合が特徴

- 量子アニーリング
  - D-Wave : 超伝導量子ビット
    - DW_2000Q_6 (2048量子ビット)
    - DW_Advantage (5760量子ビット)

デバイスの開発・構築実行は非常に高度な技術を必要とする上、運用も高コスト。クラウドベースのオンデマンドに適している。



https://aws.amazon.com/braket/hardware-providers/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket Python SDK

- Amazon Braket SDK を通じてデバイスに依存しない回路設計
  - 量子回路計算 (Rigetti, IonQ)
  - 量子アニーリング(D-Wave)
- タスクの実行、読み出し
- デバイスタイプの選択
  - QPU（IonQ, Rigetti, D-Wave）
  - 量子回路シミュレータ（local simulator, state vector simulator, density matrix simulator, tensor network simulator）

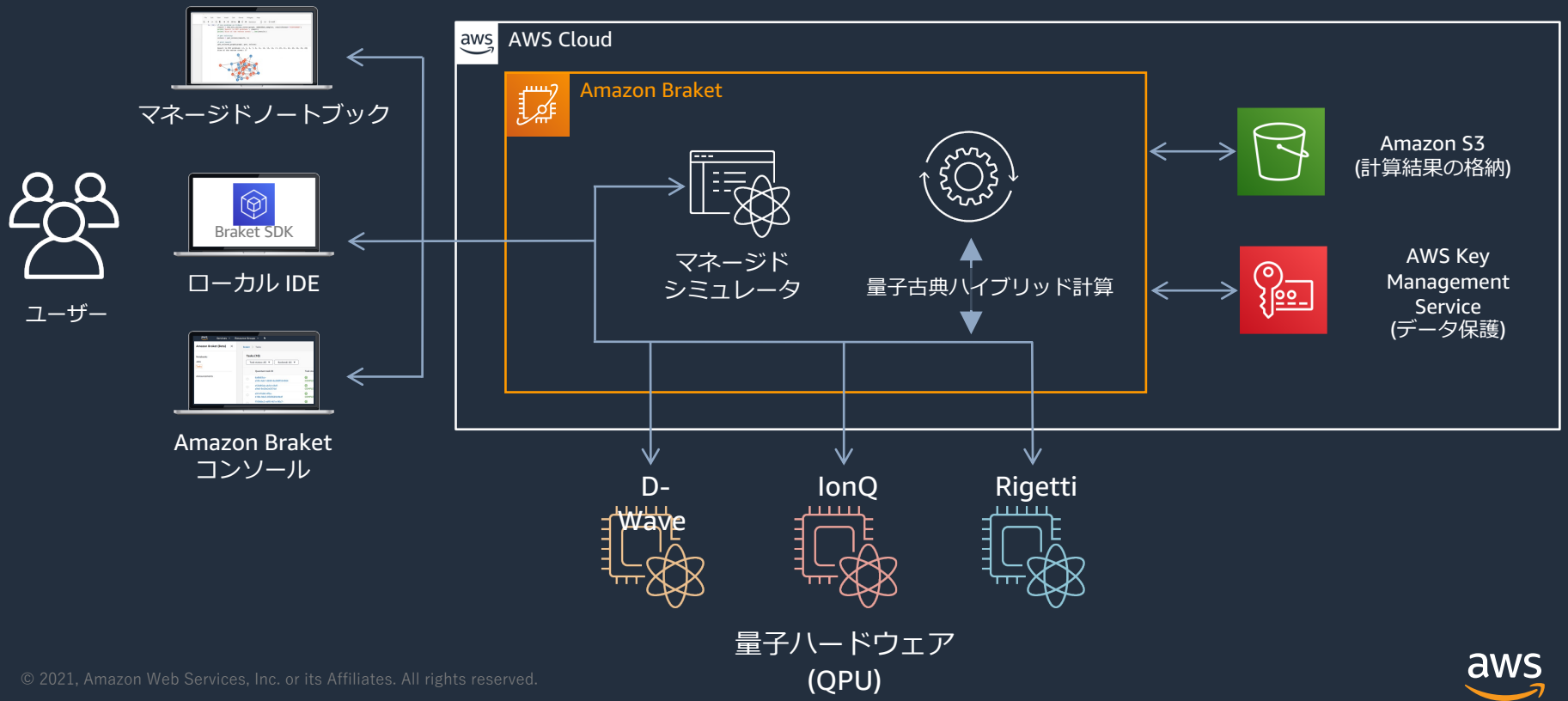
```
'ZZ']

In [3]: bell = Circuit().h(0).cnot(0, 1)
        print(bell)
        print(f"\nserialized_circuit: {bell.to_ir().json()}")

T  : |0|1|

q0 : -H-C-
        |
q1 : ---X-

T  : |0|1|

serialized_circuit: {"instructions": [{"target": 0, "type": "h"}, {"control": 0
"cnot"}]}

In [4]: result = simulator.run(bell, s3_destination_folder).result()
        print(f"measurement_counts: {result.measurement_counts}")
        print(f"measurement_probabilities: {result.measurement_probabilities}")

        data = [".join([str(bit) for bit in shot]) for shot in result.measurements]
        plot = plt.hist(data)

measurement_counts: Counter({'00': 50, '11': 50})
measurement_probabilities: {'00': 0.5, '11': 0.5}
```

```
In [5]: # QFT example. Encode a circuit with phase frequency of 2. Run QFT and get back
```

https://aws.amazon.com/braket/hardware-providers/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket アーキテクチャ




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# まとめ

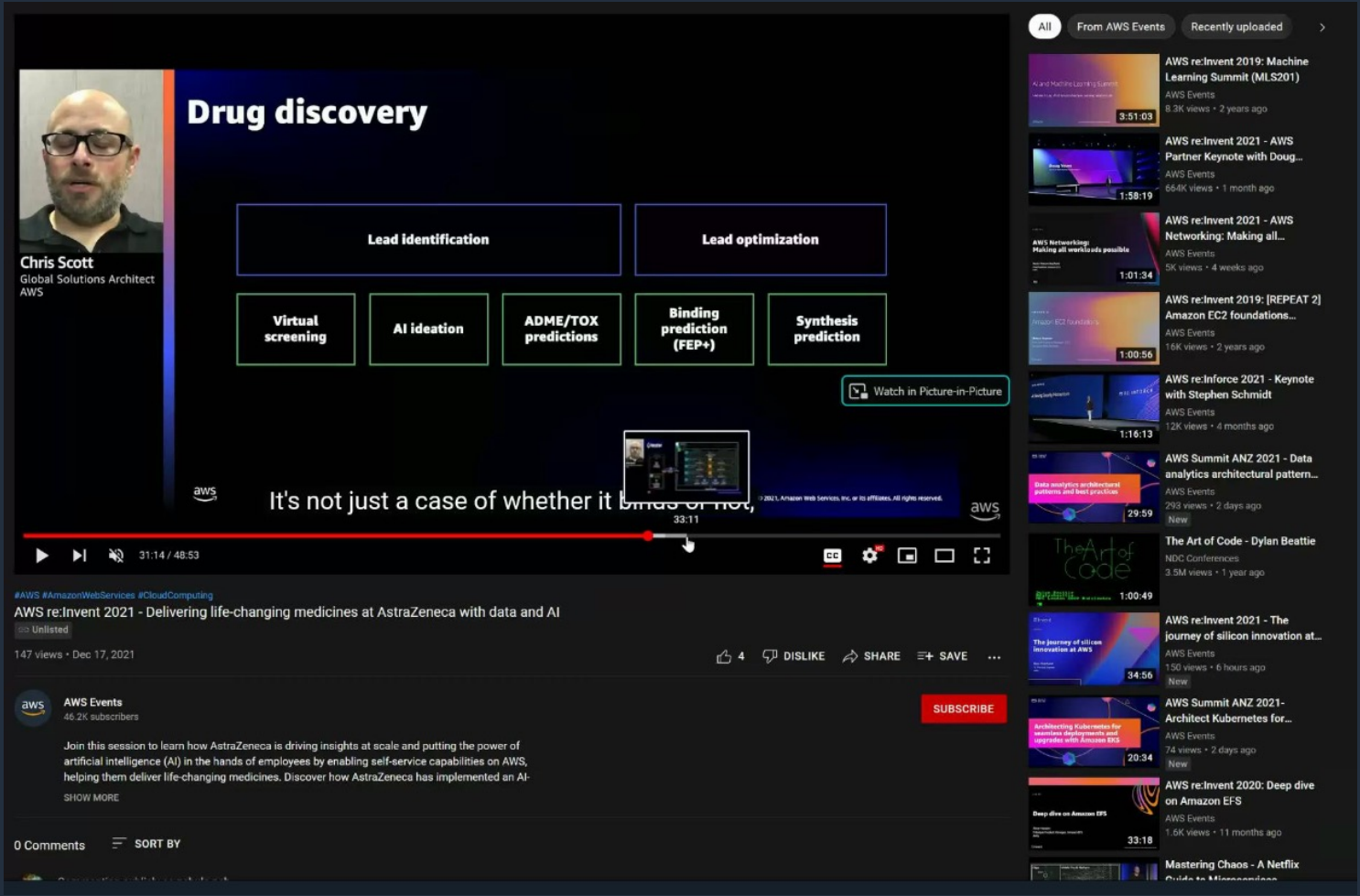
- ヘルスケアライフサイエンス領域におけるAWS 活用領域
  - 製薬・公的研究・ゲノミクス・予防・介護
- 研究加速のためのクラウド活用観点
  - スケーラビリティと柔軟性
  - マネージドサービスの組み合わせ
  - 再現可能なインフラ
- 研究を促進するAWSサービス
  - HPC・データ分析・機械学習・量子コンピューティング
- 国内外でのAWS活用事例
  - moderna のワークフロー自動化、Harvard Medical School の Ultra-scale virtual screening、CBI学会でのご登壇事例

**研究を加速できるインフラの在り方を**
**一緒につくっていきましょう**

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# ご清聴いただき
# ありがとうございました

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 大規模化が難しい理由

- 量子ビットの操作が完全ではない（エラーが有る）
  - 量子ビットのエラーレートにばらつきがある
  - 量子ゲートの欠陥がある

- 量子ビットの寿命時間（コヒーレンス時間）が有限（計算時間に比べて十分長い必要がある）

→ 誤り訂正が必要

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 創薬研究におけるクラウド活用

近年の創薬開発では、薬剤のモダリティの増加に伴い、計算機シミュレーションなど多種多様で大規模なコンピューティング環境に大きな期待が寄せられている。また、研究機器の多様化や高度化により、大規模なデータ管理や国内外での共同研究への需要も増加している。このような状況の中で、必要な時に必要な量の計算リソースを確保することができるクラウドコンピューティングを用いた大規模計算基盤活用が注目を集めている。クラウド上では、HPC (High Performance Computing)・量子コンピュータ・データ分析・機械学習・ネットワーク・セキュリティ等の目的に特化した様々な機能が提供されており、企業・アカデミアをまたいだ大規模な共創環境をスムーズに構築することができる。本講演では、このような創薬研究におけるクラウド活用の例として、Amazon Web Services (AWS) における、HPC と 量子コンピュータへの取り組みを中心に紹介する。

**AWS における HPC**

HPC 領域では、大規模なバーチャルスクリーニングや、ゲノム解析、クライオ電子顕微鏡による単粒子解析といった幅広い分野で AWS の活用が行われている。AWS では、多様な CPUの選択肢に加え、GPU や FPGA についても従量課金で利用できるため、目的のアプリケーションに適したクラスタを必要に応じて作成することが可能なだけでなく、AWS ParallelCluster やAWS Batch といったサービスにより、HPC クラスタ環境の構築も迅速かつ柔軟に行えるため、多様なユースケースに対応することが可能になっている。本セッションでは、これらの HPC 関連サービスの概要に加え、実際に製薬企業や研究機関でどのように活用されているか、国内外での事例を交えて紹介する。

**AWS における量子コンピュータ**

創薬研究における新たなアプローチとして、量子コンピュータの活用が注目されている。AWS では、量子コンピュータのフルマネージドサービスである、Amazon Braket を提供しており、AWS アカウント持っていれば誰でもIonQ, Rigetti, D-Wave といった量子コンピュータや量子回路シミュレータにアクセスできる環境が整っている。量子コンピュータの研究開発はこれまで、ハードウエアやアルゴリズムの開発において、学術的にも工業的にも非常に高度な技術と知見を要求されるため、限られた研究組織でしか取り組むことができなかったが、クラウドを経由した一般向けの量子技術提供が進み、より多くの研究者や開発者が量子コンピュータ研究に参入できる時代に突入している。本セッションでは、創薬に関わる量子化学計算や量子機械学習など最近の量子コンピュータ研究開発の潮流と Amazon Braket で実現できることについて紹介する。

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

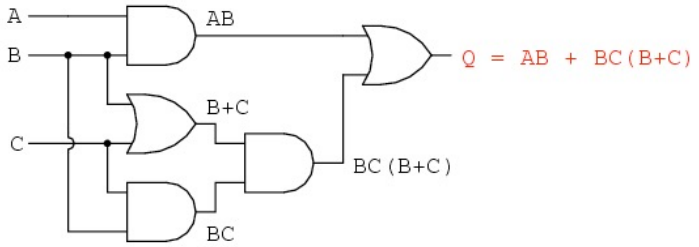
## AWS における量子コンピュータ

創薬研究における新たなアプローチとして、量子コンピュータの活用が注目されている。AWS では、量子コンピュータのフルマネージドサービスである、Amazon Braket を提供しており、AWS アカウント持っていれば誰でもIonQ, Rigetti, D-Wave といった量子コンピュータや量子回路シミュレータにアクセスできる環境が整っている。量子コンピュータの研究開発はこれまで、ハードウエアやアルゴリズムの開発において、学術的にも工業的にも非常に高度な技術と知見を要求されるため、限られた研究組織でしか取り組むことができなかったが、クラウドを経由した一般向けの量子技術提供が進み、より多くの研究者や開発者が量子コンピュータ研究に参入できる時代に突入している。本セッションでは、創薬に関わる量子化学計算や量子機械学習など最近の量子コンピュータ研究開発の潮流と Amazon Braket で実現できることについて紹介する。

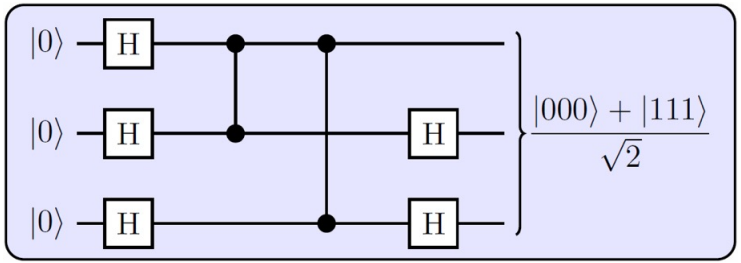
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 古典回路と量子回路

- 量子コンピューティングの基本操作 = 量子ゲート操作
- 操作可能な量子系を計算に用いる




**ブール回路**

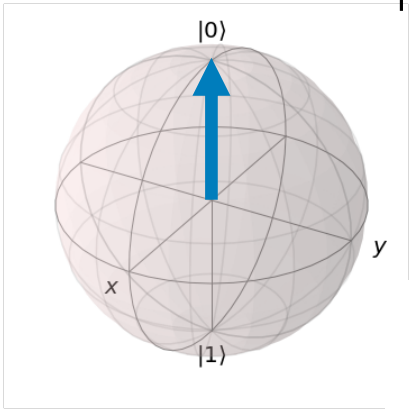



**量子回路**

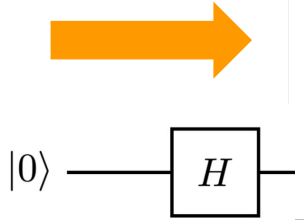
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

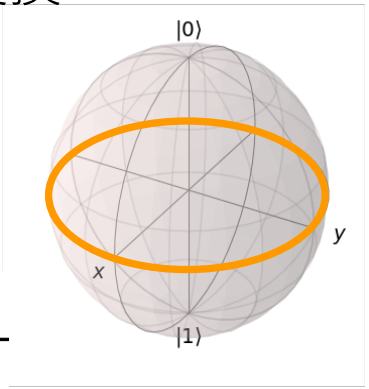
# 量子的な重ね合わせ

Hadamard 変換



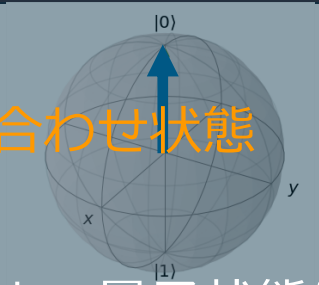

$\mathcal{H}$



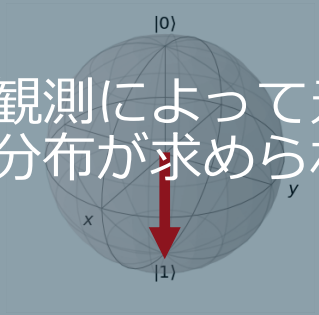

$$|\psi\rangle = |0\rangle$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right)$$




線形重ね合わせ状態

観測するまで量子状態は複数の状態にまたがっている



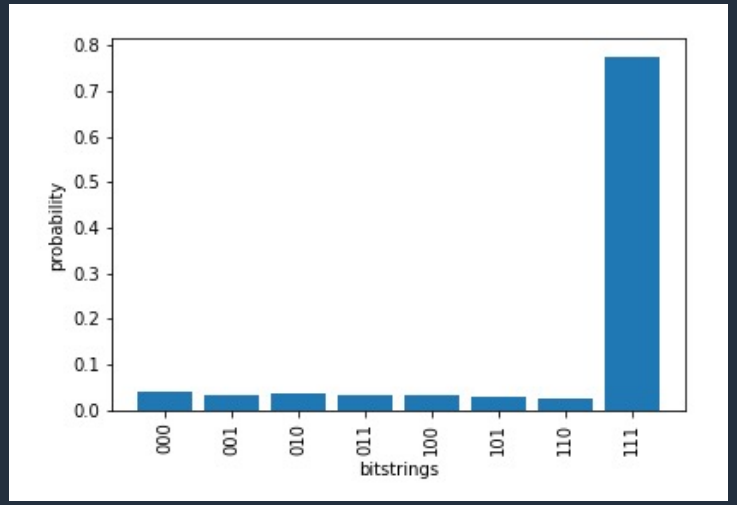

複数回の観測によって元の状態の確率分布が求められる

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Grover Algorithm with SV1 (1000 shots) on Amazon Braket

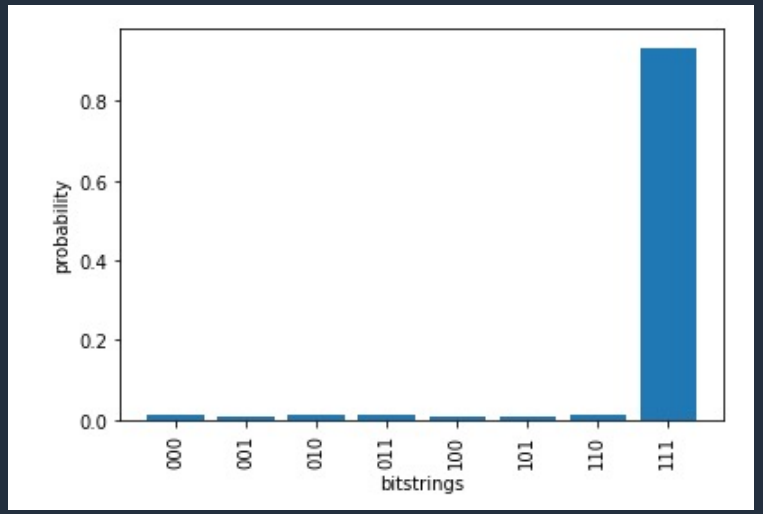
８通りの中から３量子ビットを使って正解を探す

n_rep 1




76.7%

n_rep 2



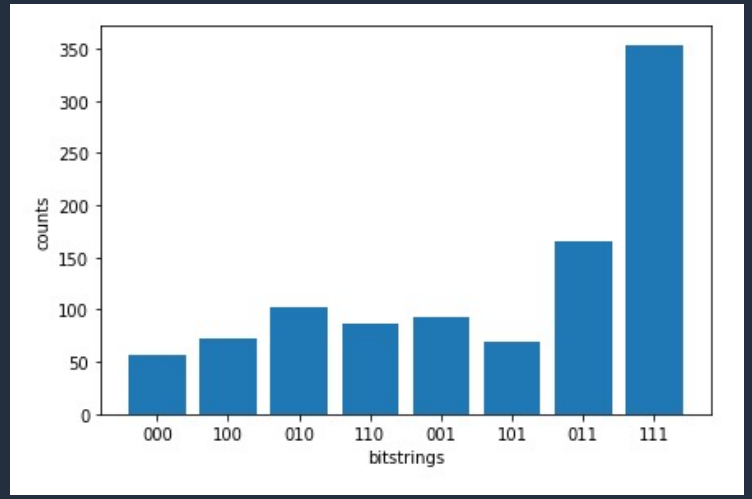

93.4%

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Grover Algorithm with IonQ (1000 shots) on Amazon Braket

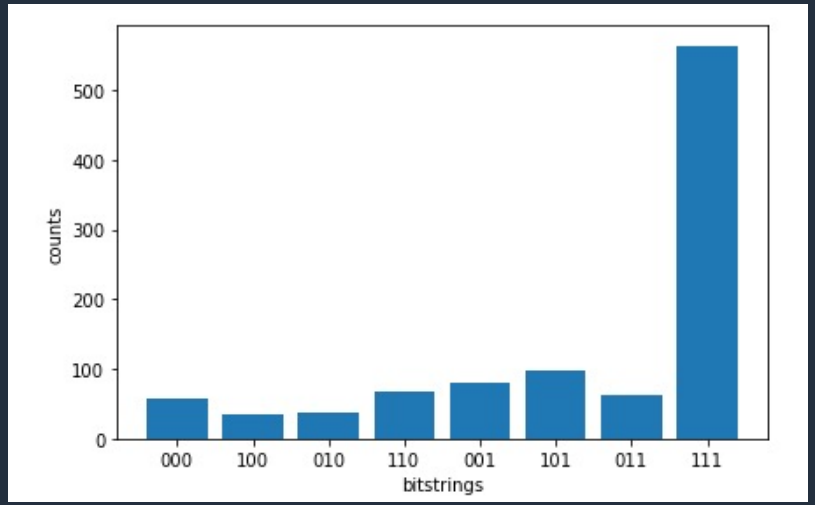
８通りの中から３量子ビットを使って正解を探す

n_rep 1




35.4%

n_rep 2

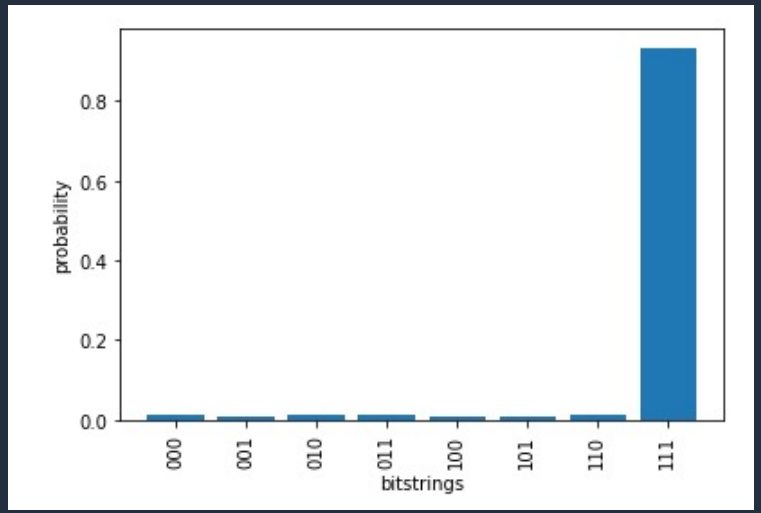


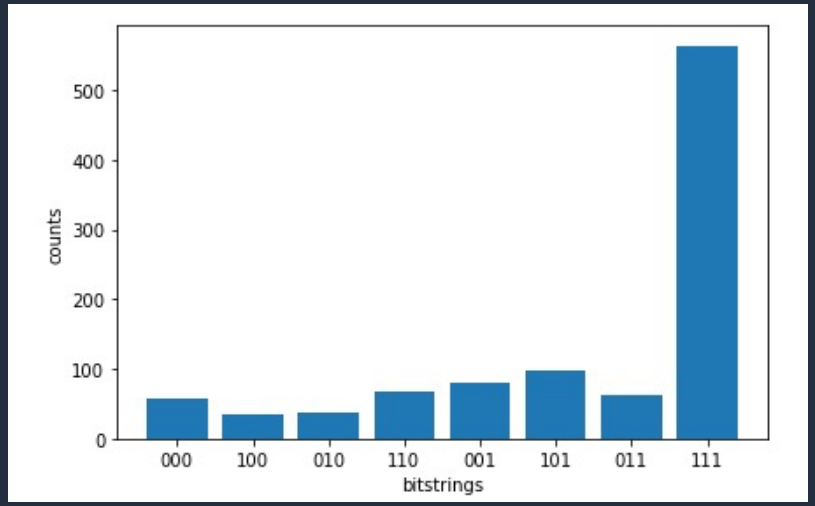

56.4%

実用的なより大規模サイズの問題ではエラーの影響が大きくなる

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子デバイスのエラー

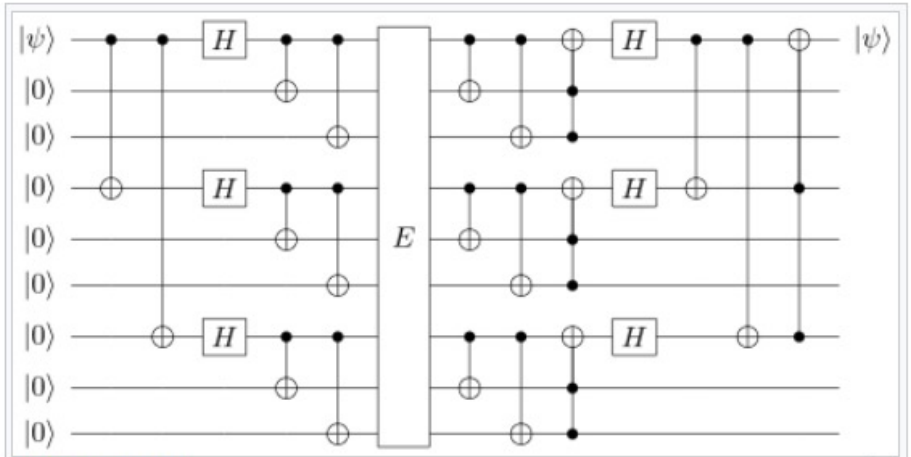



© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子誤り訂正とは

Shor’s 9 qubit code [‘95]



Quantum circuit of the Shor code

- ９量子ビットで１ロジカル量子ビットをエンコード
- 符号・位相の両者のエラーを訂正できる

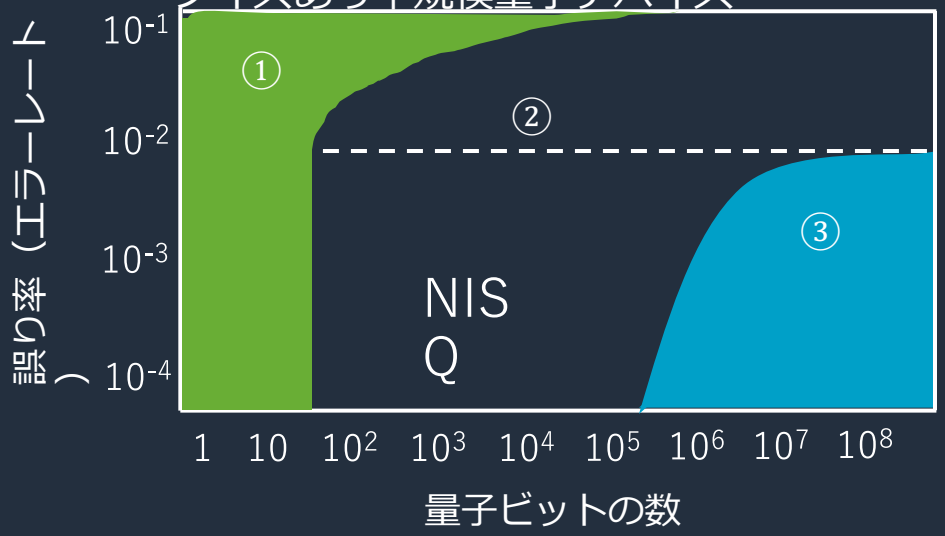
$$|0_S\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle) \otimes (|000\rangle + |111\rangle) \otimes (|000\rangle + |111\rangle)$$

$$|1_S\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}(|000\rangle - |111\rangle) \otimes (|000\rangle - |111\rangle) \otimes (|000\rangle - |111\rangle)$$

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# NISQ : Noisy Intermediate-Scale Quantum

- ノイズあり中規模量子デバイス -




1: 古典計算機でシミュレーション可能
2: Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)
3: エラー訂正を前提としたコンピュータ

## ① < 50 量子ビット:

古典計算機でシミュレーション可能

## ② NISQ

有望なアプリケーション実現が期待される

いますぐ量子コンピュータを使って開発はじめよう！

## ③ > 100k 量子ビット:

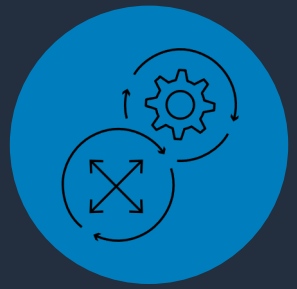
誤り訂正前提で量子コンピューティング

しかし大規模化開発には時間がかかる

re:Invent 2019 (CMP213-R) から抜粋
https://www.youtube.com/watch?v=BV9TZWuAwyk

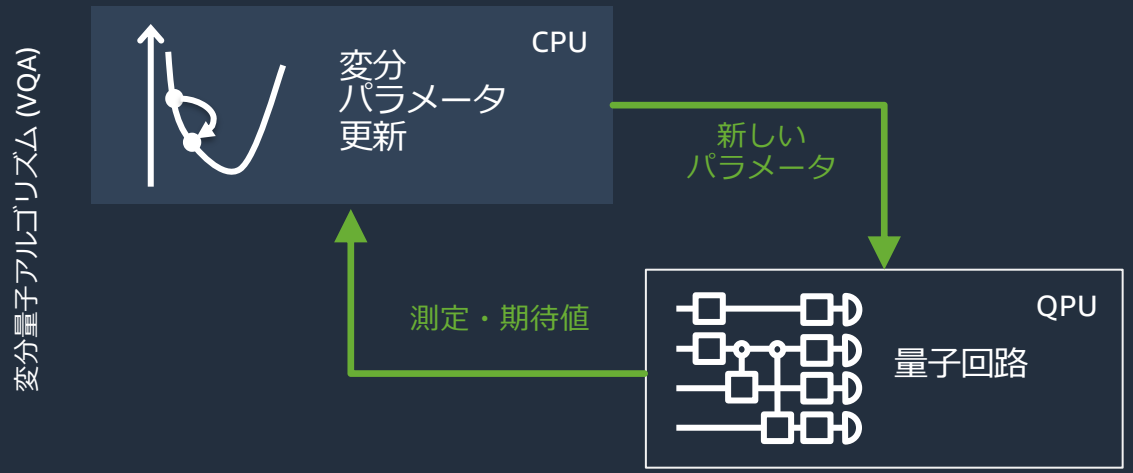
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# NISQ デバイスでの量子・古典ハイブリッドアルゴリズム



Hybrid algorithms

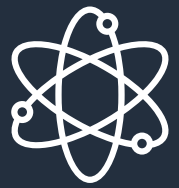
- Noisy Intermediate Scale Quantum (NISQ)
- ハイブリッドアルゴリズムは少ない量子ビットと浅い回路を利用
- 量子コンピュータをコプロセッサとして利用する
  変分量子アルゴリズム (Variational Quantum Algorithm: VQA)




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS における量子コンピューティングの取り組み全体像

## AWS Center for Quantum Computing



Push the Boundaries

アルゴリズムと
ハードウェアの研究

## Amazon Braket

Democratize Quantum Computing

アプリケーション探索と
実験を容易にするサービス

## Amazon Quantum Solutions Lab

Provide Expert Guidance

実践的・学際的な
サポートとコラボレーション

© 2020, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS Center for Quantum Computing

- カリフォルニア工科大学（Caltech）に隣接する AWS の量子研究センター
- 世界をリードする量子コンピューティングの研究者とエンジニアを集めて、量子コンピューティングのハードウェアとソフトウェアの開発を加速します

## Quantum Computing in the NISQ era and beyond

John Preskill

Institute for Quantum Information and Matter and Walter Burke Institute for Theoretical Physics, California Institute of Technology, Pasadena CA 91125, USA

30 July 2018

Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) technology will be available in the near future. Quantum computers with 50-100 qubits may be able to perform tasks which surpass the capabilities of today's classical digital computers, but noise in quantum gates will limit the size of quantum circuits that can be executed reliably. NISQ devices will be useful tools for exploring many-body quantum physics, and may have other useful applications, but the 100-qubit quantum computer will not change the world right away — we should regard it as a significant step toward the more powerful quantum technologies of the future. Quantum technologists should continue to strive for more accurate quantum gates and, eventually, fully fault-tolerant quantum computing.

https://arxiv.org/pdf/1801.00862.pdf

## Building a fault-tolerant quantum computer using concatenated cat codes

Christopher Chamberland,[1,2] Kyungjoo Noh,[1] Patricio Arrangoiz-Arriola,[1,*] Earl T. Campbell,[1,*] Connor T. Hann,[1,3,*] Joseph Iverson,[1,*] Harald Putterman,[1,*] Thomas C. Bohdanowicz,[1,2] Steven T. Flammia,[1] Andrew Keller,[1] Gil Refael,[1,2] John Preskill,[1,2] Liang Jiang,[1,4] Amir H. Safavi-Naeini,[1,5] Oskar Painter,[1,2] and Fernando G.S.L. Brandão[1,2]

[1]*AWS Center for Quantum Computing, Pasadena, CA 91125, USA*
[2]*IQIM, California Institute of Technology, Pasadena, CA 91125, USA*
[3]*Department of Physics, Yale University, New Haven, CT 06511, USA*
[4]*Pritzker School of Molecular Engineering, The University of Chicago, Illinois 60637, USA*
[5]*Department of Applied Physics and Ginzton Laboratory, Stanford University, Stanford, CA 94305, USA*

nt-ph] 7 Dec 2020

We present a comprehensive architectural analysis for a fault-tolerant quantum computer based on cat codes concatenated with outer quantum error-correcting codes. For the physical hardware, we propose a system of acoustic resonators coupled to superconducting circuits with a two-dimensional layout. Using estimated near-term physical parameters for electro-acoustic systems, we perform a detailed error analysis of measurements and gates, including CNOT and Toffoli gates. Having built a realistic noise model, we numerically simulate quantum error correction when the outer code is either a repetition code or a thin rectangular surface code. Our next step toward universal fault-tolerant quantum computation is a protocol for fault-tolerant Toffoli magic state preparation that significantly improves upon the fidelity of physical Toffoli gates at very low qubit cost. To achieve even lower overheads, we devise a new magic-state distillation protocol for Toffoli states. Combining these results together, we obtain realistic full-resource estimates of the physical error rates and overheads needed to run useful fault-tolerant quantum algorithms. We find that with around 1,000 superconducting circuit components, one could construct a fault-tolerant quantum computer that can run circuits which are intractable for classical supercomputers. Hardware with 32,000 superconducting circuit components, in turn, could simulate the Hubbard model in a regime beyond the reach of classical computing.

https://arxiv.org/pdf/2012.04108.pdf

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS Center for Quantum Computing (CQC)

Caltech キャンパスに隣接

Oskar Painter,
Fernando G.S.L. Brandão,
John Preskill らが

ハードウエア、アルゴリズムの両面から
AWSにおける
量子コンピュータの基礎研究をリード

© 2020, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket

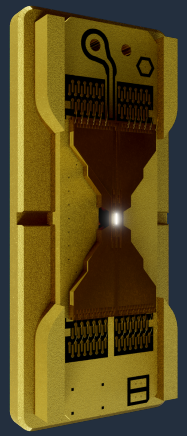
フルマネージド型の量子コンピューティングサービス

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

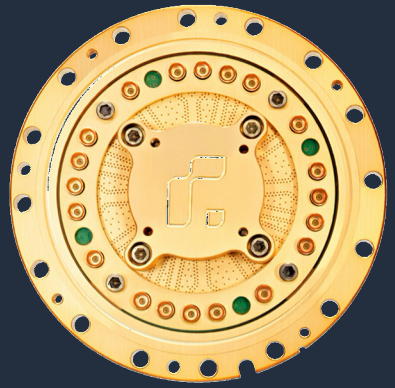
# Amazon Braket は異なる計算技術への安全かつオンデマンドなアクセスを提供

D-Wave

IONQ



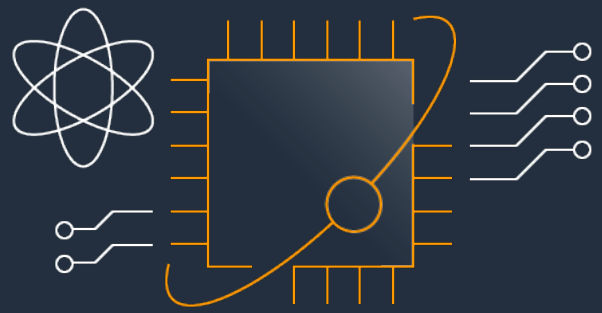
rigetti



© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# 量子コンピュータの敷居の高さ



量子コンピュータごとに
断片化した開発者ツール

量子ハードウェアは
貴重な計算資源

ハードごとに個別契約が必要
アクセスが難しい

量子コンピュータのシミュレーションは
専門知識を有する上に
計算リソースが必要

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

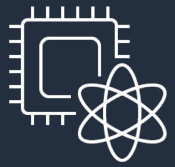
# Amazon Braket は全ての開発者・科学者の手に量子コンピューティングを

## 設計

マネージド開発環境

## テスト

ハイパフォーマンスな
回路シミュレータ



## 実行

セキュア・オンデマンドな
量子ハードウェアで
ハイブリッド計算

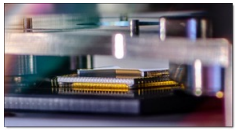
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子デバイス (QPU)

- ゲートベース量子コンピュータ
  - Rigetti : 超伝導量子ビット (The Rigetti Aspen-8)
    - 32量子ビット、結合は部分的
  - IonQ : イオントラップ量子ビット (IonQ linear trap)
    - 11量子ビット、全結合が特徴

- 量子アニーリング
  - D-Wave : 超伝導量子ビット
    - DW_2000Q_6 (2048量子ビット)
    - DW_Advantage (5760量子ビット)

デバイスの開発・構築実行は非常に高度な技術を必要とする上、運用も高コスト。クラウドベースのオンデマンドに適している。



https://aws.amazon.com/braket/hardware-providers/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket からアクセス可能な QPU とシミュレータ

**Quantum Processing Units (QPUs)**

| | Qubits | Status | Region | Next available |
|---|---|---|---|---|
| D-Wave — Advantage_system1.1<br>Quantum Annealer based on superconducting qubits | 5760 | ONLINE | us-west-2 | AVAILABLE NOW |
| D-Wave — DW_2000Q_6<br>Quantum Annealer based on superconducting qubits | 2048 | ONLINE | us-west-2 | AVAILABLE NOW |
| IonQ<br>Universal gate-model QPU based on trapped ions | 11 | ONLINE | us-east-1 | 05:45:55 |
| Rigetti — Aspen-8<br>Universal gate-model QPU based on superconducting qubits | 31 | RETIRED | us-west-1 | UNAVAILABLE |
| Rigetti — Aspen-9<br>Universal gate-model QPU based on superconducting qubits | 32 | ONLINE | us-west-1 | 07:45:55 |

**Simulators**

| | Qubits | Status | Region | Next available |
|---|---|---|---|---|
| Amazon Web Services — SV1<br>Amazon Braket state vector simulator | 34 | ONLINE | us-east-1, us-west-1, us-west-2 | AVAILABLE NOW |
| Amazon Web Services — TN1<br>Amazon Braket tensor network simulator | 50 | ONLINE | us-east-1, us-west-2 | AVAILABLE NOW |
| Amazon Web Services — DM1<br>Amazon Braket density matrix simulator | 17 | ONLINE | us-east-1, us-west-1, us-west-2 | AVAILABLE NOW |

QPU: IonQ: 11 Qubits, Universal gate model, イオントラップ
Rigetti: 31 Qubits, Universal gate model, 超伝導
D-Wave: 5760 & 2048 Qubits, 量子アニーリング

シミュレータ
SV1: 34 量子ビット，DM1: 17 量子ビット
TN1: 50 量子ビット

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS が提供する 量子コンピュータの範囲

**Quantum Computing**

**Amazon Braket**

## ユニバーサルゲートモデル

- Rigetti (超伝導) - 32 量子ビット
- IonQ (イオントラップ) – 11 量子ビット
  - Fully-connected

## 古典シミュレータ

- Local Simulator – 25 量子ビット
- SV1 - 34 量子ビット, DM1 – 17 量子ビット, TN1 - 50 量子ビット

## 量子アニーリング

- D-Wave 2000 (超伝導) 2048 量子ビット
- D-Wave Advantage (超伝導) 5760 量子ビット

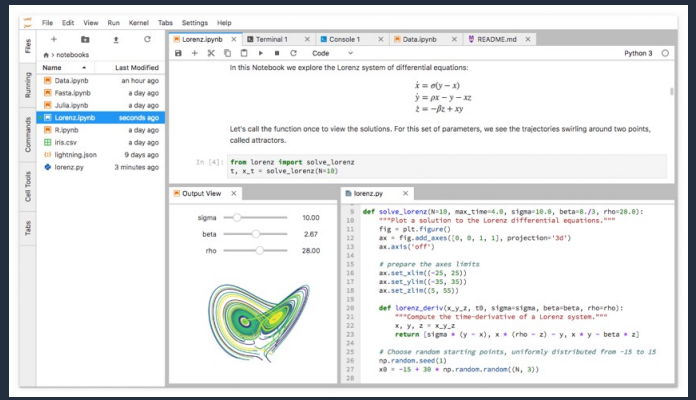
## イジングシミュレータ

- QUBO solver (Meta-Analytics) –30,000 ノード
- SBM (Toshiba) – 10,000 ノード

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 開発はマネージド Jupyter Lab 環境 を提供

## 設計 ~ テスト ~ 本番環境実行




- 完全に管理されたマネージドな開発環境
- アルゴリズムの構築とテスト ～ 本番環境実行
- 事前構築された開発環境（サンプルノートブック）
- シミュレーション用に計算リソースを自動割り当て
- 量子回路計算とハイブリッドジョブ

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket Python SDK

- Amazon Braket SDK を通じてデバイスに依存しない回路設計
  - 量子回路計算 (Rigetti, IonQ)
  - 量子アニーリング(D-Wave)
- デバイスタイプをシミュレータ（Local, SV1, DM1, TN1）、実機（ゲート・アニーリング）からそれぞれ実行可能
- タスクの実行、読み出し

```
'ZZ']

In [3]: bell = Circuit().h(0).cnot(0, 1)
        print(bell)
        print(f"\nserialized_circuit: {bell.to_ir().json()}")

T  : |0|1|

q0 : -H-C-
        |
q1 : ---X-

T  : |0|1|

serialized_circuit: {"instructions": [{"target": 0, "type": "h"}, {"control": 0
"cnot"}]}

In [4]: result = simulator.run(bell, s3_destination_folder).result()
        print(f"measurement_counts: {result.measurement_counts}")
        print(f"measurement_probabilities: {result.measurement_probabilities}")

        data = ["".join([str(bit) for bit in shot]) for shot in result.measurements]
        plot = plt.hist(data)

measurement_counts: Counter({'00': 50, '11': 50})
measurement_probabilities: {'00': 0.5, '11': 0.5}
```

```
In [5]: # QFT example. Encode a circuit with phase frequency of 2. Run QFT and get back
```

https://aws.amazon.com/braket/hardware-providers/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# デバイスタイプ切り替えで簡単にQPUにアクセスできる

```
import boto3
from braket.circuits import Circuit
from braket.aws import AwsDevice

aws_account_id = boto3.client("sts").get_caller_identity()["Account"]

device = AwsDevice("arn:aws:braket:::device/qpu/rigetti/Aspen-8")
s3_folder = (f"amazon-braket-output-{aws_account_id}", "RIGETTI")

bell = Circuit().h(0).cnot(0, 1)
task = device.run(bell, s3_folder)
print(task.result().measurement_counts)
```

**IonQ** "arn:aws:braket:::device/qpu/ionq/ionQdevice"

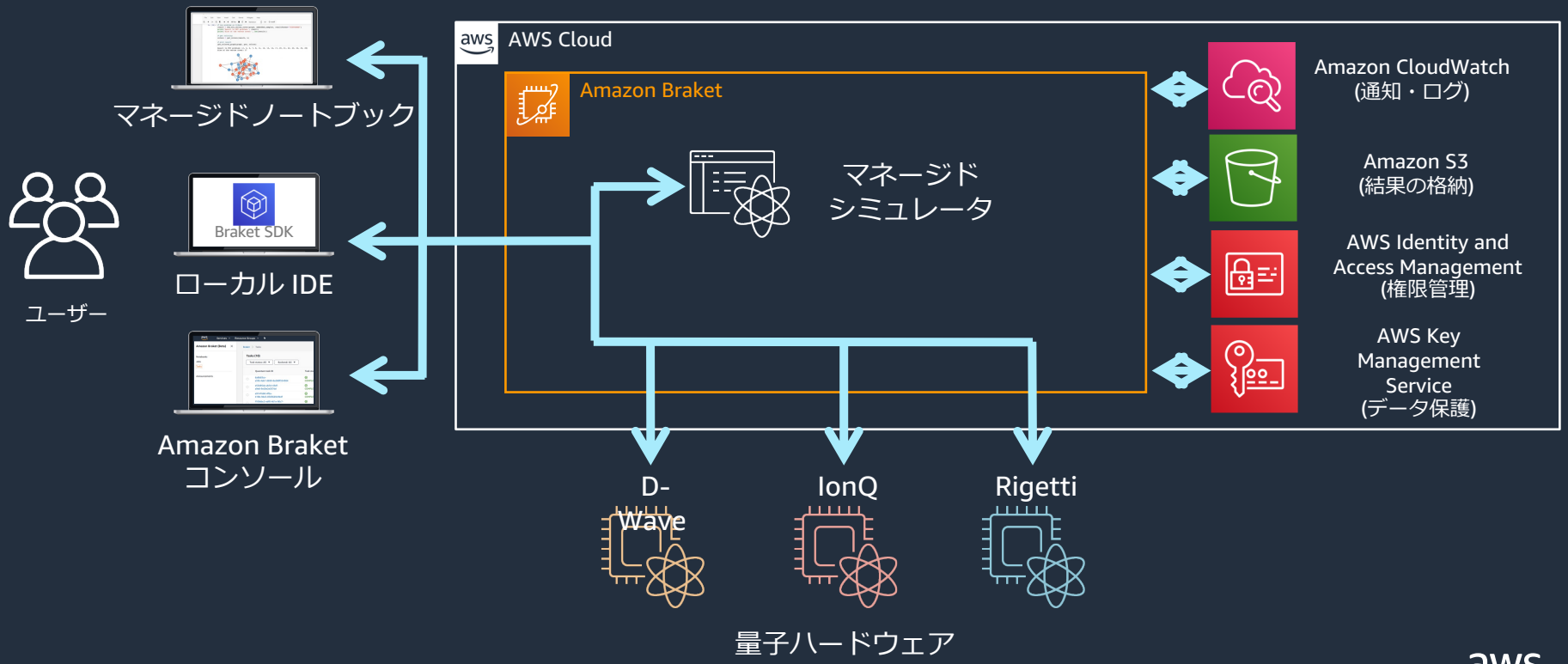
**Rigetti** "arn:aws:braket:::device/qpu/rigetti/Aspen-8"

**D-Wave** (See the next section in this document for more information about using D-Wave.)

- **D-Wave 2000Q_6** "arn:aws:braket:::device/qpu/d-wave/DW_2000Q_6"
- **D-Wave Advantage_system1** "arn:aws:braket:::device/qpu/d-wave/Advantage_system1"

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket のアーキテクチャ図




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# QPUの特徴

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# QPU 利用可能な量子マシンの時間に注意

Amazon Braket > Devices

## Quantum Processing Units (QPUs)

### D-Wave — Advantage_system1.1

Quantum Annealer based on superconducting qubits

| Qubits | Status |
|---|---|
| 5760 | ONLINE |
| **Region** | **Next available** |
| us-west-2 | AVAILABLE NOW |

### D-Wave — DW_2000Q_6

Quantum Annealer based on superconducting qubits

| Qubits | Status |
|---|---|
| 2048 | ONLINE |
| **Region** | **Next available** |
| us-west-2 | AVAILABLE NOW |

### IonQ

Universal gate-model QPU based on trapped ions

| Qubits | Status |
|---|---|
| 11 | ONLINE |
| **Region** | **Next available** |
| us-east-1 | AVAILABLE NOW |

### Rigetti — Aspen-8

Universal gate-model QPU based on superconducting qubits

| Qubits | Status |
|---|---|
| 31 | RETIRED |
| **Region** | **Next available** |
| us-west-1 | UNAVAILABLE |

### Rigetti — Aspen-9

Universal gate-model QPU based on superconducting qubits

| Qubits | Status |
|---|---|
| 32 | ONLINE |
| **Region** | **Next available** |
| us-west-1 | 01:25:15 |

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Rigetti

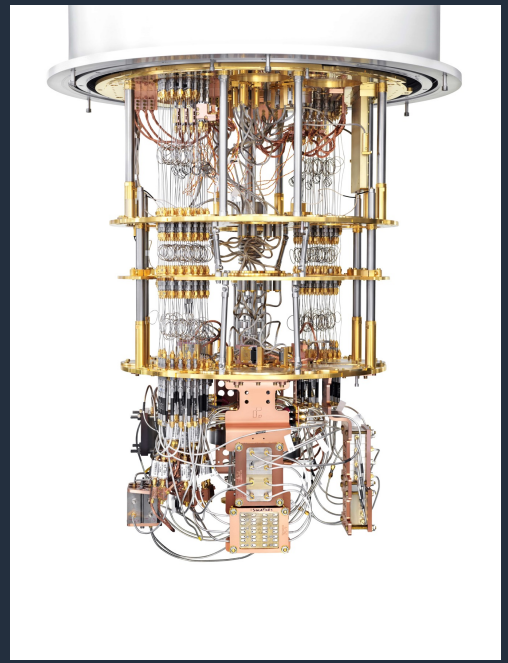
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Rigetti Computing 汎用ゲート型超伝導量子ビット

- 超伝導量子ビットに基づく汎用ゲートモデルの量子マシン
- Aspenシリーズチップ:
  - 固定量子周波数と可変超伝導量子ビットによる構成による精度、スケール、速度の強力な組み合わせ
  - 8角形グラフ接続で量子ビット接続性は3倍
  - 最近傍でない隣接量子ビットを自動的にリンク

The Rigetti 16Q Aspen-4

Rigetti Aspen シリーズチップ:
スケーラブルな回路トポロジ。 base-8でラベル付けされたグラフ構造の量子ビット間接続



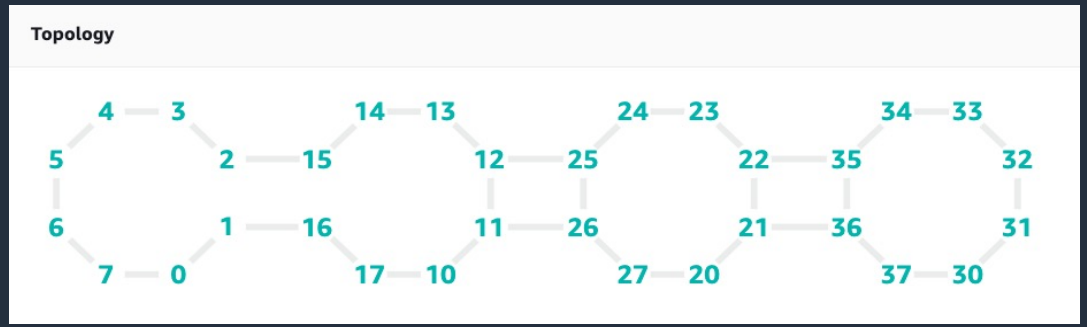
https://aws.amazon.com/braket/hardware-providers/rigetti

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Rigetti チップ構成

## Aspen-8

## Aspen-9




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Rigetti Chip Calibration

**Calibration**

Qubit specs | Edge specs | JSON

Last updated: Sep 21, 2021 04:28 (UTC)

Qubit

| Qubit | T1 (µs) Info | T2 (µs) Info | Fidelity (RB) (%) Info | Fidelity (simultaneous RB) (%) Info | Readout fidelity (%) Info | Active reset fidelity (%) Info |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 27.661 | 12.521 | 99.900 ± 0.009 | 99.556 ± 0.034 | 96.800 | 99.850 |
| 1 | 35.419 | 10.563 | 97.817 ± 0.120 | 97.338 ± 0.349 | 89.600 | 98.450 |
| 2 | 24.699 | 4.462 | 99.759 ± 0.021 | 99.641 ± 0.020 | 94.800 | 99.750 |
| 3 | 35.644 | 35.104 | 99.944 ± 0.006 | 98.936 ± 0.226 | 95.300 | 99.350 |

**Calibration**

Qubit specs | Edge specs | JSON

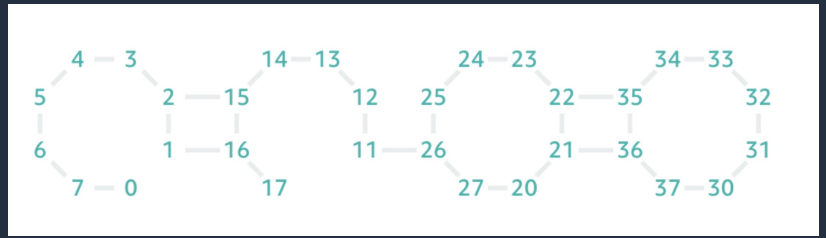
Last updated: Sep 21, 2021 04:28 (UTC)

Qubit

| Edge (Qubit pair) | C-Phase gate fidelity (%) Info | XY gate fidelity (%) Info | CZ gate fidelity (%) Info |
|---|---|---|---|
| 0-1 | 1.000 ± 99.000 | 81.771 ± 1.416 | 87.471 ± 0.789 |
| 0-7 | 87.255 ± 0.790 | 89.446 ± 0.584 | 95.549 ± 0.634 |
| 1-16 | 87.940 ± 0.854 | 67.320 ± 2.466 | 81.128 ± 1.339 |
| 10-11 | 95.691 ± 0.862 | 88.401 ± 0.516 | 90.099 ± 0.580 |
| 10-17 | 98.026 ± 0.440 | 94.946 ± 0.660 | 97.585 ± 0.485 |

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子ビット の マニュアル割当 ができるようになりました




Rigetti Aspen-8 のトポロジー

- Rigetti Aspen8 において量子ビットを指定したゲート操作が可能に
- より高精度な量子操作を明示的にコントロール

```
# create a random state with neighboring qubits
circuit = Circuit()
circuit.rz(0,np.pi/2).cnot(1,2).x(3)
print(circuit)
rigetti_task = device.run(circuit, s3_folder, shots=100, disable_qubit_rewiring=True)
```

タスク実行時に引数で指定

https://github.com/aws/amazon-braket-examples/blob/main/braket_features/Allocating_Qubits_on_QPU_Devices.ipynb

https://aws.amazon.com/jp/about-aws/whats-new/2020/11/amazon-braket-supports-manual-qubit-allocation/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Set Verbatim Compilation

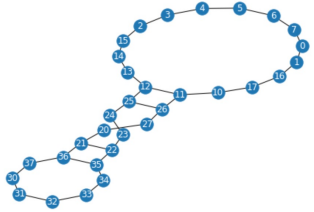
Rigetti QPU 利用時に、
指定した量子回路を勝手に
(効率的なものに) 変換せず
Error mitigation やベンチマーク
が可能

**Programming verbatim circuits onto the device topology**

As we have mentioned above, to build circuits with multi-qubit gates, you need to take into consideration the connectivity graph of the device. When a circuit contains a verbatim box, automatic qubit rewiring has to be disables, and you have manually allocate the qubits on the device that you want to use for your circuit. You can access the connectivity graph on the device detail page in the Amazon Braket Console, or by using the code below.

In [10]:
```
# access and visualize the device topology
print(rigetti.properties.paradigm.connectivity.connectivityGraph)
nx.draw_kamada_kawai(rigetti.topology_graph, with_labels=True, font_color="white")
```

```
{'0': ['1', '7'], '1': ['0', '16'], '10': ['11', '17'], '11': ['10', '12', '26'], '12': ['11', '13', '25'], '13': ['1
2', '14'], '14': ['13', '15'], '15': ['14', '2'], '16': ['1', '17'], '17': ['10', '16'], '2': ['15', '3'], '20': ['2
1', '27'], '21': ['20', '22', '36'], '22': ['21', '23', '35'], '23': ['22', '24'], '24': ['23', '25'], '25': ['12',
'24', '26'], '26': ['11', '25', '27'], '27': ['20', '26'], '3': ['2', '4'], '30': ['31', '37'], '31': ['30', '32'],
'32': ['31', '33'], '33': ['32', '34'], '34': ['33', '35'], '35': ['22', '34', '36'], '36': ['21', '35', '37'], '37':
['30', '36'], '4': ['3', '5'], '5': ['4', '6'], '6': ['5', '7'], '7': ['0', '6']}
```



From the connectivity graph, you can see that qubits 11, 10, and 17 are connected in a line, and with the code in the next cell you can access their respective 2-qubit gate fidelities to make sure you have selected a high-quality qubit subset.

In [11]:
```
print(rigetti.properties.provider.specs["2Q"]["10-11"])
print(rigetti.properties.provider.specs["2Q"]["10-17"])
```

```
{'fCPHASE': 0.9370584109675574, 'fCPHASE_std_err': 0.00795074764345174, 'fCZ': 0.9299243089381443, 'fCZ_std_err': 0.0
1482561327735092 8, 'fXY': 0.9745254923082562, 'fXY_std_err': 0.008192514619096408}
{'fCPHASE': 0.9814191643655765, 'fCPHASE_std_err': 0.003640156618078282, 'fCZ': 0.9901793460716128, 'fCZ_std_err': 0.
002845237063339863, 'fXY': 0.9619550297476629, 'fXY_std_err': 0.005187344784704715}
```

**Note:** At the time when you run this notebook the fidelity numbers may be different as QPU devices are periodically recalibrated

After selecting the qubits and validating their gate fidelities, you can now construct a cirucit and run it.

In [12]:
```
circ = Circuit().xy(10,11,pi/4).xy(10,17,pi/2).rx(10,pi).xy(10,11,pi/4)
verbatim_circ = Circuit().add_verbatim_box(circ)
print(verbatim_circ)
```

```
T   : |      0      |    1    |    2    |    3    |    4    |    5    |

q10 : -StartVerbatim-XY(0.785)-XY(1.57)-Rx(3.14)-XY(0.785)-EndVerbatim-
      |             |         |         |         |         |
q11 : -|-------------XY(0.785)-|---------------------XY(0.785)-|-----------
      |             |         |         |         |         |
q17 : -*************-----------XY(1.57)-----------------------***********-

T   : |      0      |    1    |    2    |    3    |    4    |    5    |
```

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# IonQ

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# IonQ が日本時間の 10pm – 11am まで使えるようになりました

06/10/2021

**IonQ extends availability window to 02:00 AM UTC - June 10, 2021**

IonQ is extending its availability window on Amazon Braket effective immediately. IonQ will now be generally available from 13:00 - 02:00 UTC instead of its current availability of 13:00 - 21:00 UTC, affording Amazon Braket customers around the globe more flexibility on when they can access the device. Refer to the IonQ device page for more information.

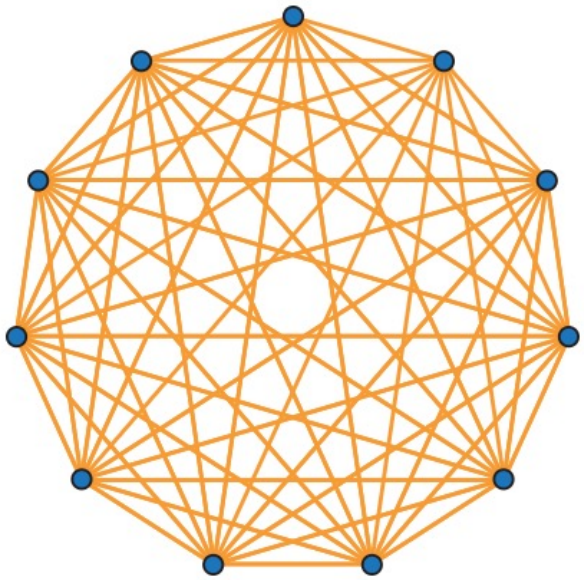
| | | |
|---|---|---|
| Hardware provider<br>IonQ | Region<br>us-east-1 | Location<br>Maryland, USA |
| Availability<br>Weekdays, 13:00:00 - 02:00:00 UTC | Next available<br>05:42:29 | Cost<br>$0.30 / task + $0.01 / shot |
| Device ARN<br>arn:aws:braket:::device/qpu/ionq/ionQdevice | Status<br>ONLINE | Qubits<br>11 |

22:00 – 11:00 IST

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# IonQ トポロジーとキャリブレーション

**Topology**



**Calibration**

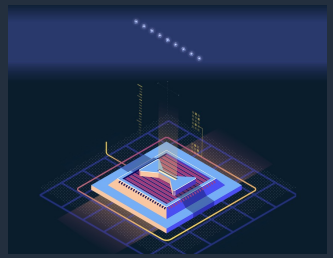
Last updated: Aug 07, 2020 12:47 (UTC)


```
{
  "braketSchemaHeader": {
    "name": "braket.device_schema.ionq.ionq_provider_properties",
    "version": "1"
  },
  "fidelity": {
    "1Q": {
      "mean": 0.99717
    },
    "2Q": {
      "mean": 0.9696
    },
    "spam": {
      "mean": 0.9961
    }
  },
  "timing": {
    "T1": 10000,
    "T2": 0.2,
    "1Q": 0.000011,
    "2Q": 0.00021,
    "readout": 0.000175,
    "reset": 0.000035
  }
}
```


11 量子ビット 全結合（レーザー光によるオンデマンドな結合）

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# イオントラップを用いた IonQ の特徴



## Ion Trap

- 量子ビット：イオン化された Yb+ (イッテルビウム) 原子
- 100本程度の電極により正確にデザインされた、 *linear Ion Trap*（線形イオントラップ）技術を使い、イオンを捕獲する
- 電磁場によって3次元空間にトラップすることにより、環境ノイズや緩和に強くなる
- $10^{-11}$ Torr の真空チャンバで動作

## Gate Configuration

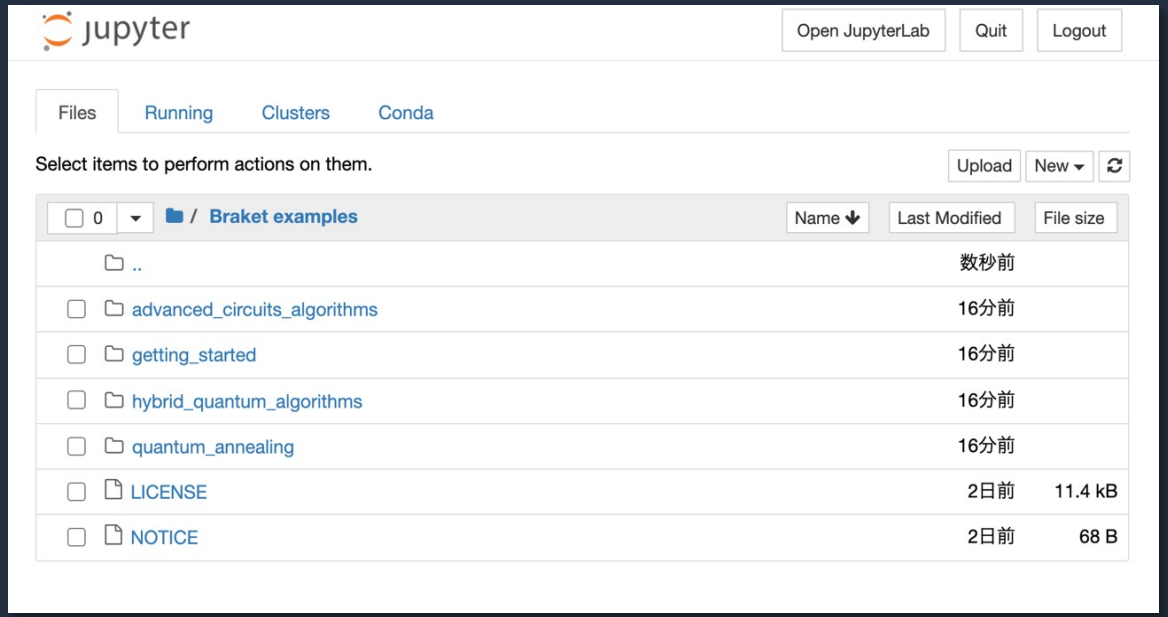
- レーザー照射によるオンデマンドな結合（物理的な結合を伴わない）を形成することによって全結合が可能に
- 同一チップに量子ビットトラップを再構成可能
    - 最大79量子ビットイオンチェーン、任意の全結合は11量子ビットまで
- 共鳴光の照射により状態を読み出し

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

https://ionq.com/technology

aws

# Braket examples: サンプルノートブック




Amazon Braket ではすぐに QPU を試すことができる、
サンプルノートブックを提供しています

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子回路シミュレータについて

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# フルマネージドなゲート量子計算シミュレータ

```python
import boto3
from braket.aws import AwsDevice
from braket.circuits import Circuit

aws_account_id = boto3.client("sts").get_caller_identity()["Account"]

device = AwsDevice("arn:aws:braket:::device/quantum-simulator/amazon/sv1")
s3_folder = (f"amazon-braket-output-{aws_account_id}", "folder-name")

bell = Circuit().h(0).cnot(0, 1)
task = device.run(bell, s3_folder, shots=100)
print(task.result().measurement_counts)
```

## Universal Quantum gate based computing simulator:

- Local simulator:
  - 25量子ビットまでのクイックなプロトタイピングに最適
- SV1: 量子計算の状態ベクトルシミュレータ
- TN1: テンソルネットワークシミュレータ
- DM1: 密度行列シミュレータ

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子ゲートモデルのマネージドシミュレータ

- SV1（状態ベクトルシミュレータ）
  - 34量子ビットまで
  - 高密度など任意の回路をシミュレート可能
  - Square Circuit (深さ34)の場合 1~2 時間の計算時間
  - デフォルトで35並列タスク（最大50並列）まで実行可能
- TN1（テンソルネットワークシミュレータ）
  - 50量子ビットまで
  - 回路の深さ100以下
  - スパース回路、ローカルゲートを備えた回路、QFT回路などに最適
  - 最大実行時間は6時間
- DM1（密度演算シミュレータ）
  - ノイズコントロール可能
  - 最大17量子ビットまで
  - デフォルトで35並列タスク（最大50並列）まで実行可能
  - 最大実行時間は6時間

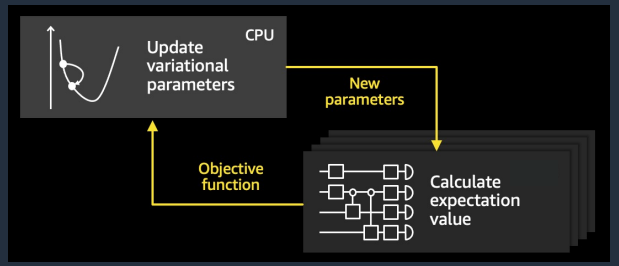
https://docs.aws.amazon.com/braket/latest/developerguide/braket-devices.html

https://docs.aws.amazon.com/braket/latest/developerguide/braket-result-types.html

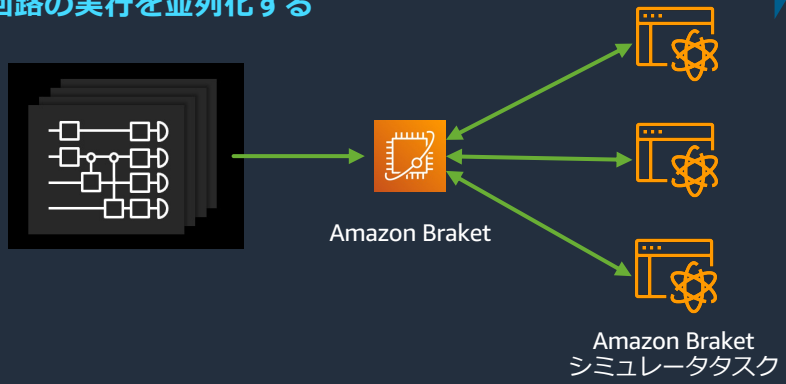
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 10倍の高速化を実現する Amazon Braket シミュレータ

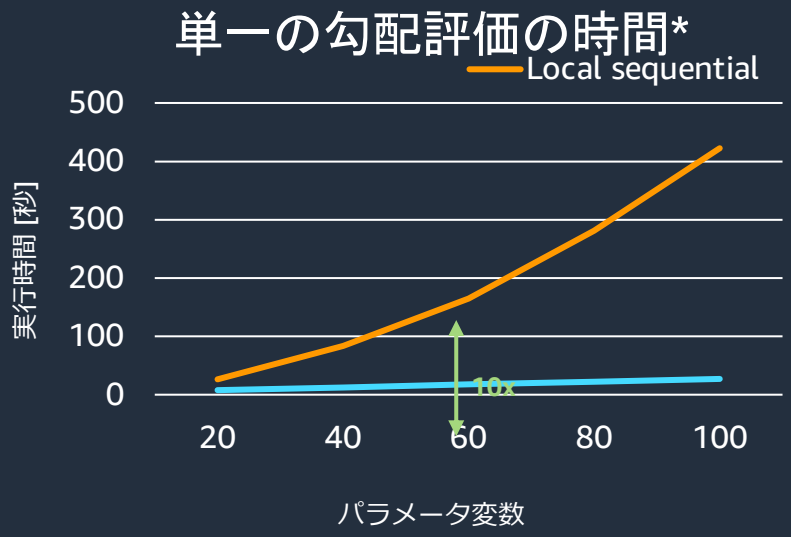
**変分アルゴリズムでは、すべてのステップで多くの回路実行が必要**




**Amazon Braket シミュレータで回路の実行を並列化する**




**トレーニング時間を10倍短縮し、アルゴリズムの研究とチューニングを加速**



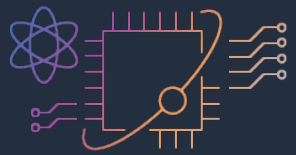

ローカルシミュレータ: m5.12xlarge EC2 インスタンス + PennyLane SV1: 30までの並行タスク

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# PennyLane が Amazon Braket で利用可能に

ニューラルネットワークのように
量子回路を学習

PENNY
LANE



## 機械学習ツールを量子コンピューティングに

- 量子微分プログラミングが利用可能に
- ML で親しみのある PyTorch や TensorFlow が利用可能
- 量子古典ハイブリッド計算を実装

## ハイパフォーマンスな計算の実装が簡単に

- Amazon Braket で事前に定義されたノートブックやチュートリアルでいますぐに始められる
- 化学、最適化、機械学習等のアプリケーションライブラリにアクセス
- Amazon Braket を使って10倍も高速な学習

https://aws.amazon.com/jp/about-aws/whats-new/2020/12/amazon-braket-now-supports-pennylane/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# PennyLane on Amazon Braket

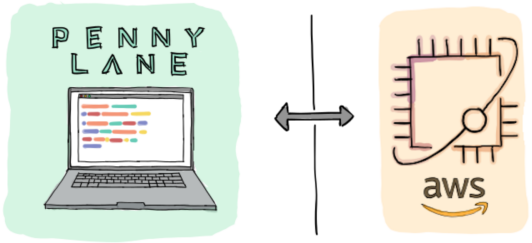
0_Getting_started

amazon-braket-examples-test.notebook.us-west-2.sagemaker.aws/notebooks/amazon-braket-examples/examples/pennylane/0_Getting_started.ipynb

jupyter 0_Getting_started (unsaved changes)

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

## Combining PennyLane with Amazon Braket




### Setup

In [1]:
```
import pennylane as qml
from pennylane import numpy as np
```

In [2]:
```
wires = 2  # Number of qubits
dev = qml.device("braket.local.qubit", wires=wires)
```

### Defining a circuit

In [3]:
```
@qml.qnode(dev)
def circuit(params):
    qml.RX(params[0], wires=0)
    qml.RY(params[1], wires=1)
    qml.CNOT(wires=[0, 1])
    return qml.expval(qml.PauliZ(1))
```

The `qml.qnode(dev)` decorator binds the circuit to the local Braket device. Now, every time that `circuit()` is called, the quantum computation defined in the function above will be executed with Braket.

```
qml.RX(param[0],
       wires=0)
```

パラメータ付け
された量子回路を定義

勾配を計算し、
パラメータ更新

以上を簡単に
実装することが可能

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 10000 ノード以上のイジングモデルをAWS上で扱うには ~ AWS marketplace

aws marketplace

Categories | Delivery Methods | Solutions | Migration Mapping Assistant | Your Saved List | Partners | Sell in AWS Marketplace | Amazon Web Services Hor

## QUBO Solver

By: Meta-Analytics  Latest Version: 1

State of the art QUBO solver.

Linux/Unix  0 AWS reviews

Continue to Subscribe

Save to List

Overview | Pricing | Usage | Support | Reviews

### Product Overview

Optimize solutions in finance, resource planning as well as create a bridge to quantum computing.

| | |
|---|---|
| Version | 1 |
| By | Meta-Analytics |
| Categories | High Performance Computing |
| Operating System | Linux |
| Delivery Methods | Container |
| Supported Amazon Services | Amazon ECS |

#### Highlights

- State of the art performance
- Process over 30,000 variables
- Create a bridge to Quantum Computing

### Pricing Information

Use this tool to estimate the software and infrastructure costs based on your configuration choices. Your usage and costs might be different from this estimate. They will be reflected on your monthly AWS billing reports.

The table shows current software pricing. Additional taxes or fees may apply.

QUBO Solver

| Unit type | Cost/unit |
|---|---|
| Per Solver API second | $0.015 |

Infrastructure price

Either Amazon EC2 or AWS Fargate is required. For detailed infrastructure costs, please refer to Amazon EC2 and Amazon Fargate pricing.

QUBO Solver (Meta-Analytics)

aws marketplace

Categories | Delivery Methods | Solutions | Migration Mapping Assistant | Your Saved List | Partners | Sell in AWS Marketplace | Amazon Web Services Home

## Simulated Bifurcation Machine

TOSHIBA

By: Toshiba Digital Solutions Corporation  Latest Version: 1.2.2

Simulated Bifurcation Machine (SBM) comes with a set of solvers which enables users to quickly obtain good approximate solutions for large combinatorial optimization problems expressed as

Show more

Linux/Unix  0 AWS reviews

Continue to Subscribe

Save to List

Typical Total Price

$3.06/hr

Total pricing per instance for services hosted on p3.2xlarge in US East (N. Virginia). View Details

Overview | Pricing | Usage | Support | Reviews

### Product Overview

Simulated Bifurcation Machine (SBM) comes with a set of solvers which enables users to quickly obtain good approximate solutions for large combinatorial optimization problems expressed as ISING, MAXCUT and MAXSAT problems.

Diverse technological challenges facing society today - logistics optimization, financial portfolio optimization, and molecular modeling in drug discovery, to name a few - typically involve solving "combinatorial optimization problems," which entails finding the best solution out of an astronomical number of combinatorial patterns. As this requires a huge amount of calculation, previous technologies have been inadequate in increasing the size of the problems that can be tackled and in reducing the amount of time required to find a solution.

By successfully implementing a novel optimization algorithm proposed by Toshiba (Goto et al. (2019)), SBM has made it possible to obtain good approximate solutions to these complex, large-scale problems quickly, without requiring dedicated hardware.

SBM version 1.2.2 Release Note:
Added two new parameters ("C" and "dt") to deal with various problems. For details, refer to the Simulated Bifurcation Machine (SBM) User Manual.

SBM version 1.2.2 includes:
- nVIDIA CUDA Driver (Linux x86_64) Version 418.39
- Node.js version 10.17.0

| | |
|---|---|
| Version | 1.2.2 |
| By | Toshiba Digital Solutions Corporation |
| Categories | High Performance Computing |
| Operating System | Linux/Unix, Amazon Linux Amazon Linux release 2 (Karoo) |
| Delivery Methods | Amazon Machine Image |

#### Highlights

- Quickly obtains good approximate solutions for large optimization problems (ISING, MAXCUT and MAXSAT).
- Solves ISING problems up to a size of 10,000 spins in this free edition.
- Easy to use. Complicated parameter setting is not required.

Simulated Bifurcation Machine (Toshiba Digital Solutions Corporation )

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 料金

## 量子コンピュータ (QPU)

| Hardware Provider | QPU family | Per-task price | Per-shot price |
|---|---|---|---|
| D-Wave | 2000Q, Advantage | $0.30000 | $0.00019 |
| IonQ | IonQ device | $0.30000 | $0.01000 |
| Rigetti | Aspen-8 | $0.30000 | $0.00035 |

## 量子回路シミュレータ

- Amazon Braket simulator :
  - SV1 simulator $ 0.075 / min ($ 4.5 / hr)
  - DM1 simulator $ 0.075 / min ($ 4.5 / hr)
  - TN1 simulator $ 0.275 / min ($ 16.5 / hr)
- Braket SDK 実行のための Amazon SageMaker notebook 実行は別途課金

※ 1000ショットオーダーでのQPUの繰り返し計算を実行する場合は料金に注意、シミュレータでテスト ～ 本番実行

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 料金について

## 料金例 1 : Amazon Braket マネージドシミュレーターSV1 を利用して回路をシミュレートする場合

- 30量子ビットを使用する量子回路を設計し、 シミュレーションの実行には69分（1.15時間）かかった場合。
  5.175ドル = 1時間あたり4.50ドル x 1.15
  （SV1の実行にかかる時間単位、最小15秒単位の秒課金となります）

## 料金例 2 : D-Wave2000Q 量子コンピューターで量子アニーリング問題を実行する場合

- アニーリング問題の2,000の結果サンプルが含まれていた場合のタスクの実行コスト
  0.68ドル = タスクあたりの料金 0.30ドル + (ショットあたりの価格は0.00019ドル x 2000ショット)

## 料金例 3 : Rigetti Aspen-8 量子コンピューターで量子アルゴリズムを実行する場合

- 回路設計の10,000回の繰り返しショットが含まれている場合のタスクの実行コスト
  3.80ドル = タスクあたりの料金 0.30ドル + (ショットあたりの価格は0.00035ドル x 10,000ショット)

マネージドシミュレーターとRigettiデバイスに許可されるショットの最大数は100,000。 DwaveおよびIonQデバイスの場合は10,000。

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 参考資料

- Amazon Braket documentation
  - https://docs.aws.amazon.com/braket/latest/developerguide/what-is-braket.html
- Amazon Braket Python SDK - Read the Docs
  - https://amazon-braket-sdk-python.readthedocs.io/en/latest/
- Boto3 SDK
  - https://boto3.amazonaws.com/v1/documentation/api/latest/reference/services/braket.html
- GitHub – Python Braket SDK
  - https://github.com/aws/amazon-braket-sdk-python
- GitHub – Amazon Braket Examples
  - https://github.com/aws/amazon-braket-examples

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Braket お客様事例

MS&AD Aioi Nissay Dowa USA

## Aioi Nissay Dowa USA:

あいおいニッセイ同和損害保険株式会社の子会社、フルサービスの保険会社

MS＆ AD インシュアランスは、世界で5番目に大きな保険会社であり、28か国でトヨタの保険商品を提供

リスク評価のための新しく革新的な製品の開発に注力しており、保険業界向けの量子コンピューティングアプリケーションの調査を開始しました。量子コンピューティングの長期的な使用の可能性を認識している分野の1つは、自動車のテレマティクスによって生成された膨大な量のデータの処理です。

「自動運転車のテレマティクスからのデータ量は、自動運転技術が普及するにつれて指数関数的に増加すると予想されます。Amazon Braket でシミュレーターを利用開始後、量子コンピュータにアクセスするのは簡単だったため、テレマティクス分析のための PoC を進めました。最初にドライバースコアを計算する量子ニューラルネットワークを作成し、次に IonQ 量子コンピュータを使用して Amazon Braket で実行しました。テストが成功するたびに、キュービットの数を増やしてさらに実験しました。 Amazon Braket で学んだこれらの方法と概念は継続して適用可能であり、予想される車両データの増加に備えてビジネスを準備するのに役立ちます。」

イノベーション責任者 Michael Fischer氏

量子機械学習のテレマティクス応用に関する Aioi Insurance Services USA 様の事例ブログ
https://aws.amazon.com/blogs/quantum-computing/aioi-using-quantum-machine-learning-with-amazon-braket-to-create-a-binary-classifier/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

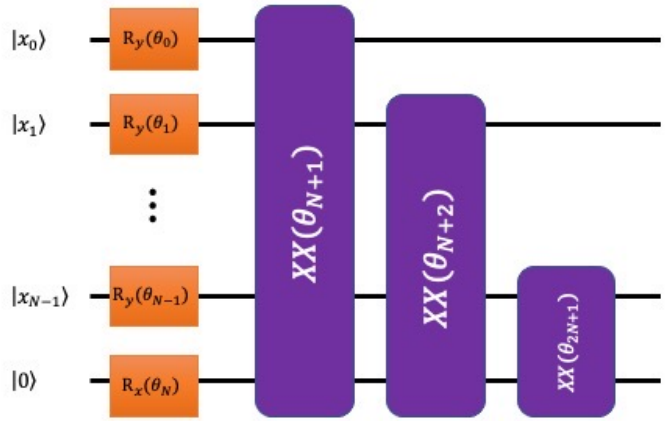
aws

# Using Quantum Machine Learning with Amazon Braket to Create a Binary Classifier

MS&AD Aioi Nissay Dowa USA

https://aws.amazon.com/blogs/quantum-computing/aioi-using-quantum-machine-learning-with-amazon-braket-to-create-a-binary-classifier/

Aioi Insurance Services USA は Amazon Braket を利用し、
Quantum Neural Network (QNN) [E. Farhi and H. Neven (2018)] の
二値 (safe/fail) 分 用。




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates

aws

# Amazon Braket お客様事例

VOLKSWAGEN GROUP

## Volkswagen Group :

乗用車の世界最大の生産者の1つでありヨーロッパ最大の自動車メーカー

「フォルクスワーゲンでは、企業環境における量子コンピューティングの有意義な使用法について深く理解したいと考えています。 重要なのは、さまざまな量子コンピューターでのアルゴリズムのテストと継続的な開発です。」

「Amazon Braket は、標準化されたプログラミングインターフェイスを介して、さまざまなサービスプロバイダーの量子コンピューターに対応して使用できます。これにより開発作業を加速し、量子アルゴリズムを改善が可能になります。Amazon Braket は、量子コンピューティングのメリットを社会や業界にさらに迅速に提供できると確信しています。」

フォルクスワーゲングループ
先端技術およびIT戦略担当ディレクター Florian Neukart 氏

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# Amazon Braket お客様事例

FCAT FIDELITY CENTER for APPLIED TECHNOLOGY

## フィデリティ応用技術センター (FCAT):

「Amazon Braket ではハードウェアに依存しないソフトウェアを開発できるため、新しい量子システムが Amazon Braket で利用可能になった際に、簡単に新しいデバイス開発に着手できます。」

「FCAT は AWS の Quantum Solutions Lab と協力して、金融業界向けのクラウドベースの量子コンピュータの概念実証を作成しました。これは、革新的なソリューションを迅速に提供できるようにするための幅広い取り組みの一環です。急速に進化するお客様のニーズを満たすのに役立っています。」

フィデリティ応用技術センター（FCAT）
エマージング・テクノロジーの責任者 Adam Schouela 氏

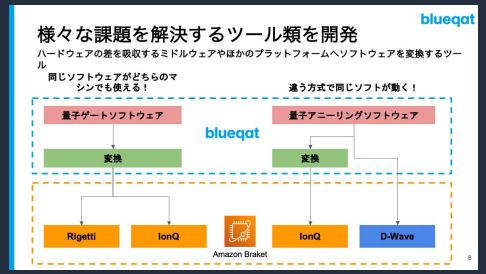
© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# Amazon Braket 日本でのお客様事例

- blueqat cloud から Amazon Braket に接続可能

- blueqat の Amazon Braket ユーザー事例
  - 旭化成
    - シミュレータを活用した量子化学計算、D-Waveの量子アニーリングを用いた業務効率化、 IonQ を用いた量子機械学習で物性の予測モデルを実行するマテリアルズインフォマティクスへの応用
  - 凸版印刷
    - ビジネス用途での D-Wave による物流の計算、研究開発用途では量子機械学習の基礎学習で利用
  - コーセー
    - 原料や処方をデータ化し、狙った特性を計算で導き出す機械学習や最適化に適用




https://monoist.atmarkit.co.jp/mn/articles/2105/19/news050_2.html

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 企業・大学における Amazon Braket の活用事例

VOLKSWAGEN GROUP

*“For the first time, Amazon Braket makes it possible to address and use quantum computers of different service providers via a standardized programming interface.”*

- Florian Neukart, Director of Advanced Technologies and IT Strategy, Volkswagen Group of America

FCAT FIDELITY CENTER for APPLIED TECHNOLOGY

*“(With Amazon Braket) we’re able to research the strengths of different quantum backends, build hybrid classical-to-quantum, and quantum-to-quantum workflows.”*

- Adam Schouela, Head of Emerging Technology at the Fidelity Center for Applied Technology

UNIVERSITY OF WATERLOO | IQC Institute for Quantum Computing

*“A quantum computing service, like Amazon Braket, that offers ready access to multiple hardware devices enables quantum readiness and agility.”*

- Michele Mosca, Full Professor at the University of Waterloo

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

aws

# Demo

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# お客様の量子プロジェクトご支援体制

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS Quantum Solutions Labs

- AWS の Professional Service による有料コンサルティング
- お客様のニーズに合わせ、量子コンピューティングの専門家が、顧客のビジネスにとって最も有望な近い将来の量子コンピューティングソリューションを調査、発見します

専門家のガイダンスを提供する

実用的で学際的なサポートと

コラボレーション

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Amazon Quantum Solutions Lab (QSL)

Amazon の量子コンピューティング専門家と
お客様をつなぐコラボレーションおよび研究プログラム

Collaboration

Education

Solutions

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# “Combinatorial Optimization with Physics-Inspired Graph Neural Networks”

**Combinatorial Optimization with Physics-Inspired Graph Neural Networks**

Martin J. A. Schuetz,[1,2,3] J. Kyle Brubaker,[2] and Helmut G. Katzgraber[1,2,3]

[1] *Amazon Quantum Solutions Lab, Seattle, Washington 98170, USA*
[2] *AWS Intelligent and Advanced Compute Technologies, Professional Services, Seattle, Washington 98170, USA*
[3] *AWS Center for Quantum Computing, Pasadena, CA 91125, USA*

(Dated: July 5, 2021)

We demonstrate how graph neural networks can be used to solve combinatorial optimization problems. Our approach is broadly applicable to canonical NP-hard problems in the form of quadratic unconstrained binary optimization problems, such as maximum cut, minimum vertex cover, maximum independent set, as well as Ising spin glasses and higher-order generalizations thereof in the form of polynomial unconstrained binary optimization problems. We apply a relaxation strategy to the problem Hamiltonian to generate a differentiable loss function with which we train the graph neural network and apply a simple projection to integer variables once the unsupervised training process has completed. We showcase our approach with numerical results for the canonical maximum cut and maximum independent set problems. We find that the graph neural network optimizer performs on par or outperforms existing solvers, with the ability to scale beyond the state of the art to problems with millions of variables.

arXiv:2107.01188 **[cs.LG]**

グラフニューラルネットワークを利用した
組合せ最適化問題ソルバー

- 問題のハミルトニアンを緩和することで
  微分可能なロスト定義、
  グラフニューラルネットワークを学習
- 数百万変数に対応し、
  既存手法と同等かそれ以上の性能

© 2020, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子アプリケーション開発の AWS パートナー

Amazon Braket 上でお客様のアプリケーション開発を支援する
非常に厳選されたテクノロジーコンサルティングパートナー

- 計算化学、機械学習、最適化など、さまざまな専門分野を持つ企業と提携

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

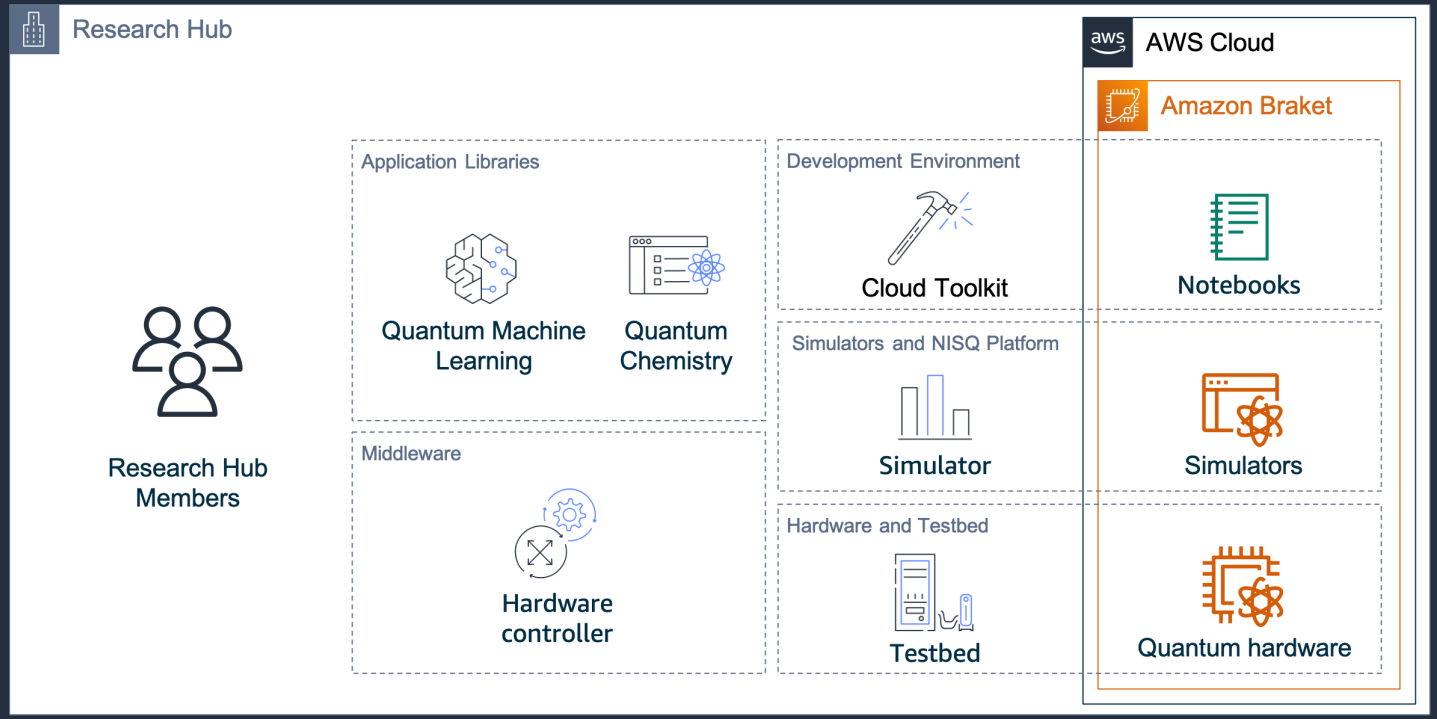
# AWS Quantum Computing Blog

https://aws.amazon.com/blogs/quantum-computing/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# AWS supporting the Quantum Software Research Hub led by Osaka University (9月21日 Braket ワークショップ)

https://aws.amazon.com/blogs/quantum-computing/aws-supporting-the-quantum-software-research-hub-led-by-osaka-university-in-japan/




© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子コンピュータ研究用 AWS クレジットも提供しています

https://aws.amazon.com/braket/quantum-computing-research/

## Research quantum algorithms and test quantum computers

Experiment on a variety of quantum computers and use AWS Credits to speed up academic research

Request research credits

FEATURED

**Free AWS Training**

Advance your career with AWS Cloud Practitioner Essentials—a free, six-hour, foundational course.

Learn more »

Quantum computing is an interdisciplinary area of research combining quantum physics and computer science. Research in quantum computing studies the physical limits of information processing and is breaking new ground in fundamental physics. This research leads to advances in many fields of science and industry, such as chemistry, optimization, and molecular simulation.

The Amazon Braket quantum computing service enables researchers at universities and

**1 free hour of simulation time**

per month for a year with the AWS Free Tier

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Thank you!

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# Media

量子アプリ開発環境のblueqat cloud、Amazon Braket経由で量子コンピュータ実機を使いやすく
IT Leaders, Tuesday, May 18, 2021
https://it.impress.co.jp/articles/-/21503

「NISQ」による量子コンピュータ応用、「Amazon Braket」がハードルを下げる
MONOist, May, 19, 2021
https://monoist.atmarkit.co.jp/mn/articles/2105/19/news050.html

AWSの量子コンピューターサービスで成果、機械学習の新しい開発環境も
Nikkei X TECH, May, 19, 2021
https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/column/18/00001/05597/

あいおいニッセイ米子会社、量子機械学習をIonQの量子コンピューターで検証
Nikkei X TECH, May, 18, 2021
https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/news/18/10382/

複数の量子コンピュータをAWSで使える Amazon Braketの現在地は
IT media Enterprise, May, 25, 2021
https://www.itmedia.co.jp/enterprise/articles/2105/25/news096.html

量子コンピューティングのハードルを下げる「Amazon Braket」の可能性
ASCII x AI, May 26, 2021
https://ascii.jp/elem/000/004/056/4056472/

ソフトバンクVFが出資する量子コンピューター企業、IonQは何がすごい？
Nikkei X TECH, June, 11, 2021
https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/column/18/00692/061000057/

最強の理系人材「量子エリート」争奪戦が激化！“夢の計算機”を巡る企業勢力図
Diamond online, June 14, 2021
https://diamond.jp/articles/-/273722

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子機械学習

量子コンピュータを用いた変分アルゴリズムと機械学習
https://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2019/09/74-09seriesAIphys1.pdf

Quantum Machine Learning Algorithms: Read the Fine Print, Scott Aaronson
https://scottaaronson.com/papers/qml.pdf

**Quantum support vector machine for big data classification**
Patrick Rebentrost, Masoud Mohseni, Seth Lloyd
https://arxiv.org/abs/1307.0471

Quantum Data Fitting
Nathan Wiebe, Daniel Braun, Seth Lloyd
https://arxiv.org/abs/1204.5242

Prediction by linear regression on a quantum computer
Maria Schuld, Ilya Sinayskiy, Francesco Petruccione
https://arxiv.org/abs/1601.07823

https://www.slideshare.net/KenjiKubo1/quantum-ml-algorithm

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 共創の場形成支援プログラム政策重点分野（量子技術分野）「量子ソフトウェア研究拠点」に参画

ニュース＆トピックス　　すべての方

**共創の場形成支援プログラム政策重点分野（量子技術分野）「量子ソフトウェア研究拠点」に採択されました**

2020年12月24日(木)

このたび、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）の共創の場形成支援プログラム（COI-NEXT）本格型・政策重点分野（量子技術分野）に、大阪大学を代表機関として１６参画機関と共同で応募していた「量子ソフトウェア研究拠点」が採択されました。

プロジェクトリーダー：

北川 勝浩（大阪大学先導的学際研究機構 量子情報・量子生命研究センター センター長）

副プロジェクトリーダー：

粟島 亨（同センター 産学共創教授 着任予定、豊田通商株式会社）

松岡 智代（同センター 産学共創准教授 着任予定、株式会社QunaSys COO）

参画機関：

豊田通商株式会社、株式会社 QunaSys、Amazon Web Services、株式会社イーツリーズ・ジャパン、伊藤忠テクノソリューションズ株式会社、AGC株式会社、株式会社エヌエフホールディングス、ＪＸ石油開発株式会社、ソニー株式会社、DIC株式会社、東ソー株式会社、株式会社日立製作所、株式会社富士通研究所、株式会社ブリヂストン、他

https://www.osaka-u.ac.jp/ja/news/topics/2020/12/83dsz6

**量子ソフトウェア勉強会前半 勉強会メニュー　基礎編（座学中心）**

| # | タイトル | カテゴリ | 講師（敬称略） |
|---|---|---|---|
| 1 | 量子コンピュータの現状と展望 (6/4 (金)) | 講義 | 藤井啓祐・野口裕信 |
| | | 懇親会 | 野口裕信 |
| 2 | 量子計算の基礎 (6/25 (金)) | 講義 | 藤井啓祐 |
| | | ハンズオン | |
| 3 | 量子アルゴリズムの基礎 (7/9 (金)) | 講義 | 御手洗光祐 |
| | | ハンズオン | |
| 4 | 量子コンピュータの物理的実現方式 (7/30 (金)) | 講義 | 小川和久・大平龍太郎・藤田高史、松浦孝弥（東大） |
| 5 | 量子機械学習の基礎 (8/6 (金)) | 講義 | 御手洗光祐 |
| | | ハンズオン | |
| 6 | 量子コンピュータとビジネス (8月後半を予定) | 講義 | 町田尚子・藤田維明 |
| | | イベント | TBA |
| 7 | 量子コンピュータと量子化学計算の基礎 (9/3 (金)) | 講義 | 水上渉 |
| | | ハンズオン | 水上渉・吉田悠一郎 |
| 8 | Amazon Braket を用いた実機・シミュレータでの開発 (9/21 (火)) | 講義 | 宇都宮聖子・針原佳貴（アマゾン ウェブ サービス ジャパン） |
| | | ハンズオン | |
| 9 | 量子アルゴリズム各論 (10/7 (木)) | 講義 | 藤井啓祐・高比良宗一 |
| 10 | 量子コンピュータと金融実務計算 (10/15 (金)) | 講義 | 宮本幸一 |
| | | ハンズオン | |

いずれも１４：００－１８：００開催。後半のグループワークもまもなく決定。

http://qiqb.osaka-u.ac.jp/news20210601/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# ML@Loft #8 「量子コンピュータ × 機械学習」

【開催報告】https://aws.amazon.com/jp/blogs/startup/event-report-ml-at-loft-8/

- 量子コンピュータの第一線の研究開発の方々によるLTとパネルディスカッション
- 130名を超える方々にご参加いただきました！

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.

# 量子コンピュータ勉強会コミュニティ @AWS Loft

https://ml-loft.connpass.com/

https://pre-nielsen-chuang-qc.connpass.com/

© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its Affiliates. All rights reserved.