

量子コンピュータ・スーパーコンピュータの組み合わせによる研究DX基盤の高度化 (TRIP)



文部科学省

～ Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms ～ 令和5年度予算額 (案) 2,306百万円 (新規)
※運営費交付金中の推計額

令和4年度第2次補正予算額 4,654百万円

背景・課題

- ◆ マテリアル分野を中心に、AI・データ駆動型研究開発が進展し始めているが、分野を横断した研究DXの進展、研究DXの基盤の高度化が課題。
- ◆ 理化学研究所は、我が国最先端の国立研究開発法人として唯一、量子、AI、バイオテクノロジー・医療等の分野の研究開発をトップレベルで牽引。

【経済財政運営と改革の基本方針2022 (令和4年6月7日閣議決定)】

特に、量子、AI、バイオものづくり、再生・細胞医療・遺伝子治療等のバイオテクノロジー・医療分野は我が国の国益に直結する科学技術分野である。このため、国が国家戦略を明示し、官民が連携して科学技術投資の抜本拡充を図り、科学技術立国を再興する。

【新しい資本主義のグランドデザイン及び実行計画 (令和4年6月7日閣議決定)】

特に、量子、AI、バイオテクノロジー・医療分野は、我が国の国益に直結する科学技術分野である。このため、国が国家戦略・国家目標を提示するため、国家戦略を策定し、官民が連携して科学技術投資の抜本拡充を図り、科学技術立国を再興する。

事業概要

- ◆ 理化学研究所の最先端研究プラットフォーム (バイオリソース、放射光施設等) をつなぐために、良質なデータを蓄積・統合するとともに、**「量子・スパコンのハイブリッドコンピューティング (量子古典ハイブリッドコンピューティング)」の導入、数理科学の融合**により、**これまでの研究DXの基盤を高度化**することで、次世代の研究DXプラットフォームを構築する。
- ◆ 新たな取組により、「未来の予測制御の科学」を分野の枠を超えて開拓し、**社会変革のエンジン**を国内・国際社会へ広く提供する。

【実施内容】

(1) 良質なデータ取得 (蓄積・統合)

世界トップレベル研究から良質なデータを取得、多様な分野のデータを蓄積・統合し、研究DXを加速するためのデータ解析基盤を構築・公開 (NIIとの連携) する。

(2) AI×数理 (予測の科学)

数理科学により、スパコン、AI、量子コンピュータをつなぎ、多様な分野における量子古典ハイブリッド計算のアルゴリズム開発を行う。

(3) 量子古典ハイブリッドコンピューティング (計算可能領域の拡張)

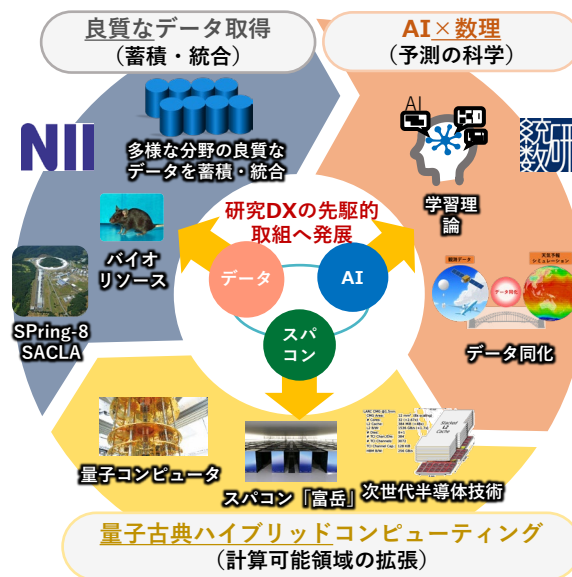
量子コンピュータとスパコンのハイブリッドコンピューティングの基盤を開発する。

(4) ユースケース

3つのプラットフォームを活用したユースケースを実施し、新たな価値を創成する。

(5) 国家的・社会的に重要な先端技術を集中的に研究できる運営体制の整備

- ・ 理研各センターの成果・知見を基に、センター横断的な研究を実施するとともに、国内外の大学・研究機関等の優れた研究者を結集する。
- ・ 技術安全保障や研究インテグリティの管理体制を強化し、高度な研究マネジメントのもとセキュアな研究環境を構築する。



【目指すべき姿】

- ◆ 「未来の予測制御の科学」を分野の枠を超えて開拓
- ◆ 社会や地球規模の課題の予測と介入による制御を実現

2023年1月12日(木)

第9回基礎研究振興部会

Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms (TRIP)

～ 研究DX加速のための量子古典Advanced Computingプラットフォームによる価値創成 ～

説明資料

○経済財政運営と改革の基本方針2022（令和4年6月7日閣議決定）

社会課題を経済成長のエンジンへと押し上げていくためには、科学技術・イノベーションの力が不可欠である。特に、**量子、AI、バイオものづくり、再生・細胞医療・遺伝子治療等のバイオテクノロジー・医療分野**は我が国の**国益に直結する科学技術分野**である。このため、国が国家戦略を明示し、官民が連携して科学技術**投資の抜本拡充**を図り、**科学技術立国を再興**する。

これら5分野*で日本が世界をリードしていく明確な決意の下、大胆かつ重点的な投資を行います。

*量子、AI、再生・細胞医療・遺伝子治療、バイオものづくり、クリーンエネルギー

○新しい資本主義のグランドデザイン及び実行計画（令和4年6月7日閣議決定）

特に、**量子、AI、バイオテクノロジー・医療分野**は、我が国の**国益に直結する科学技術分野**である。このため、国が国家戦略・国家目標を提示するため、国家戦略を策定し、官民が連携して科学**技術投資の抜本拡充**を図り、**科学技術立国を再興**する。



【新しい資本主義実現会議(R4.3.8)】



理化学研究所は、我が国最先端の国立研究開発法人として、日本で唯一、これら全ての分野の研究開発をトップレベルで牽引

今後、**オール理研としての総合力**を発揮することで、**先端的な技術分野の融合を加速**させ、**社会変革のエンジン**となっていく

第四期中長期計画後半、次期に向けて

第四期中長期計画前半の取組

- ✓ 研究開発成果の最大化、新たな分野創出、
- ✓ 国家的社会的要請、SDGs等への貢献
- ✓ データサイエンス、データ駆動研究の推進
- ✓ ヒトの理解に向けたライフサイエンス
- ✓ 世界最高水準の研究基盤の開発・整備・共用・利活用の推進

科学者自身が究めたいと願う研究が、人類の未来のために必要となる学知の創造と重なる



サイバーとフィジカルの融合によってインクルーシブとサステイナブルを両立させる社会

第四期中長期計画後半、RIKEN's Vision on the 2030 Horizonへ

「つなぐ科学」

Society5.0の実現に貢献

プラットフォームオブプラットフォームの創設

- ・ 研究DX：リアルとサイバーをしっかりとつなぐ
- ・ アドバンスドコンピューティング：量子古典融合、AIの学理
- ・ ヒトから社会へ
- ・ グローバルコモンズを支えるサイエンス

新体制（2022.4～）による理研の研究推進戦(2022.8.17)



RIKEN's Vision on the 2030 Horizon

1. 理研のミッション

国立研究開発法人として、その科学を国民そして人類全体の未来の創造へとつなぎ、国民と真摯に対話しながら、その価値を明確化し共有する。

2. 研究体制の変革とその実装

研究体制の変革をためらわず、世界最先端の研究者や技術者、最前線を行く科学技術を幅広くつなげ、理研だからこそ取り組める課題を明確化し、理研だからこそできる研究を実践する。

3. 研究の方向性

理研の強み・実績・伝統を結びあわせ、科学を更なる高みへと先導し、新たな領域を切り拓くことで、急激に変化する現実的な諸問題に対応していく。

4. 研究人材育成・国際頭脳循環

日本国内はもとより、世界の卓越した研究者たちが集い、つながることで、未来を託すに足る優れた次世代の研究者・技術者が育ち、飛躍する国際頭脳循環の場として更に発展させる。

5. 産業・社会連携

基礎から応用にまで広がる科学技術の探究を軸に産業界や社会とつながり、いま走り出すべき未来の方向を定め、新しい産業を生み出すことにも貢献し、より良い新しい社会をともに作っていく。

6. ガバナンス・経営

研究が進むべき方向性とその推進を組織的に支える体制とを結びあわせる運営の仕組みをさらに堅実で機動的なものとし、社会と世界の要請と期待に応える。

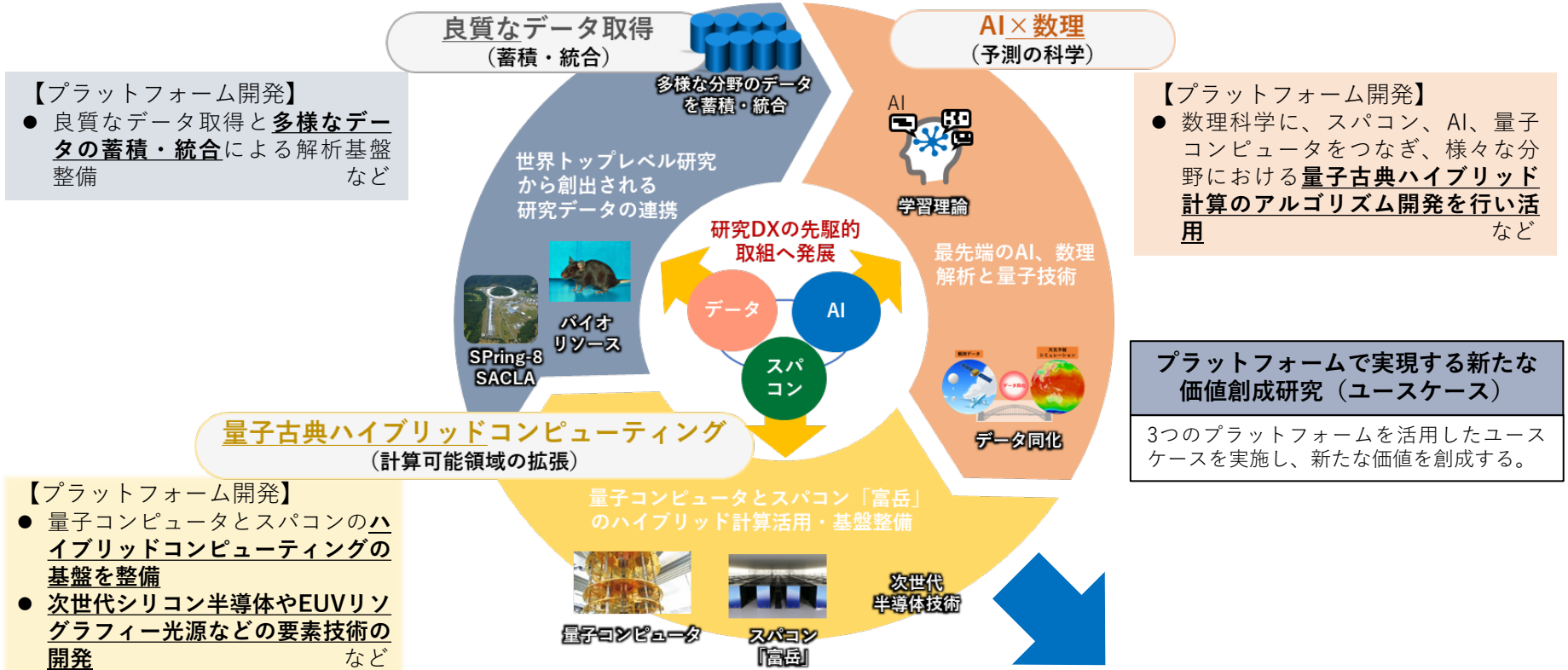
量子コンピュータ・スーパーコンピュータの組み合わせによる研究DX基盤の高度化 (TRIP)

Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms

令和5年度予算額 (案) 2,306百万円 (新規)
※運営費交付金中の推計額

令和4年度第2次補正予算額 4,654百万円

- ◆ 理研の最先端研究プラットフォーム (スパコン、放射光、バイオリソース等) をつなぐとともに、「AI×数理」、
「量子古典ハイブリッドコンピューティング」の導入により、先駆的に研究DXを加速・発展
- ◆ 「未来の予測制御の科学」を開拓し、社会変革のエンジンを国内・国際社会へ提供



国家的・社会的に重要な先端技術を集中的に研究できる運営体制の整備

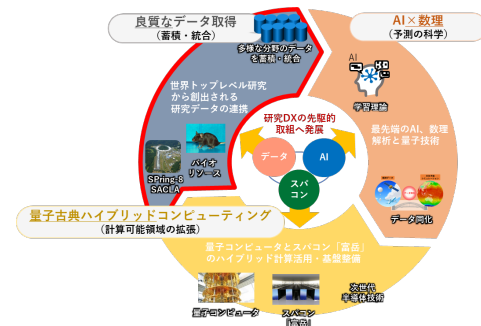
- 国内の大学・研究機関等の優れた研究者を結集 (クロアボ等)
- 技術安全保障や研究インテグリティの管理体制を強化し、セキュアな研究環境で整備
- 新たに研究DXを推進する職を設け、研究DX人材を育成

「未来の予測制御の科学」を
分野の枠を超えて開拓

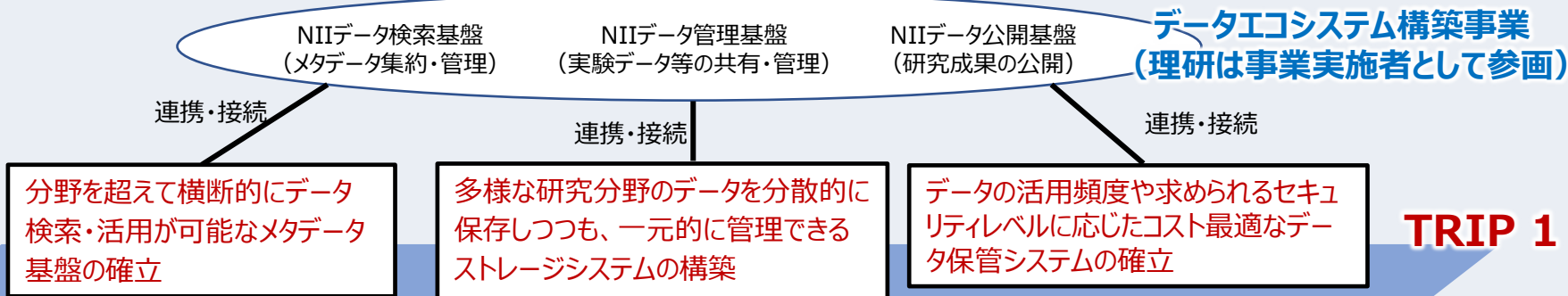
(社会や地球規模の課題の予測と介入による制御を実現)

達成目標

- ◆ 量子古典ハイブリッドコンピューティングの解析に向けた **良質なデータ取得** と多様な **データの蓄積・統合** による **解析基盤の整備**
- ◆ NIIとの連携・接続により、**取組の成果を理研外へ公開・展開**



高度化の取組



TRIP 1

【高度化】従来の活動に基づき、分野を超えたデータ利活用に向けた高度化に取り組む

- 各研究分野において、多様なデータを同一に取り扱っていくためのデータの付随情報 (メタデータ) のフォーマット等の作成
- 各研究分野において、それぞれが独立して多様な実験データを蓄積、メタデータを付与、データベース化

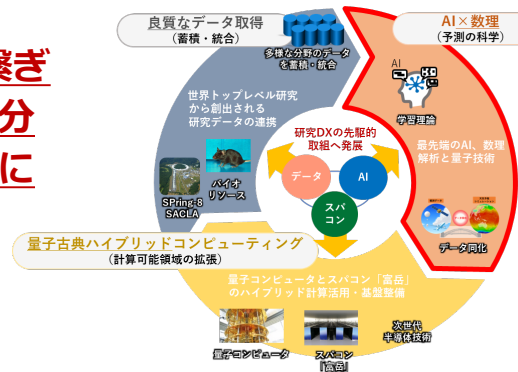
放射光、加速器など唯一無二の研究インフラ、バイオ、物理、化学分野等のトップレベル研究から創出されるデータ群



既存の理研プラットフォーム

達成目標

- ◆ AIと数理で、**良質なビッグデータと量子古典ハイブリッド計算を繋ぎ**（量子古典ハイブリッド計算に向けたアルゴリズム開発）、**様々な分野における予測精度の飛躍的向上と予測に基づく能動的制御を可能にする**、データ解析プラットフォームを構築



①量子古典ハイブリッド計算の基盤アルゴリズムの開発：

量子-古典データ変換、量子機械学習アルゴリズムなど量子古典ハイブリッド計算の基盤となるアルゴリズムを開発

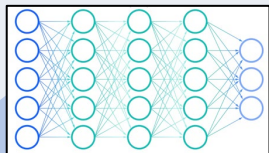
②量子物理学、量子化学、生命科学の各分野において量子計算科学のアプローチを検討：

量子物理学	量子化学	生命科学
量子多体系の状態を多項式時間で求めるアルゴリズム開発など、物理分野における量子古典ハイブリッド計算の基盤を構築	分子系のエネルギーを厳密に求めるための変分量子固有値解法アルゴリズムの開発など、化学分野における量子古典ハイブリッド計算の基盤を構築	生命科学における複雑ネットワークの解明に必要な古典分子動力学計算と量子計算の混合アルゴリズムの開発など、生命科学分野における量子古典ハイブリッド計算の基盤を構築

③ユースケースで活用される量子古典ハイブリッド計算アルゴリズム開発（※TRIPユースケースにて実施）

【高度化】従来の活動を基に、量子古典ハイブリッド計算に向けたアルゴリズムの基盤構築に向けた高度化に取り組む

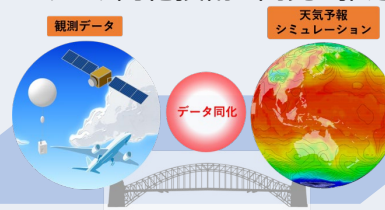
- 機械学習や最適化問題の基礎理論の研究を推進



- 最先端の数理科学に基づく異分野連携研究を推進



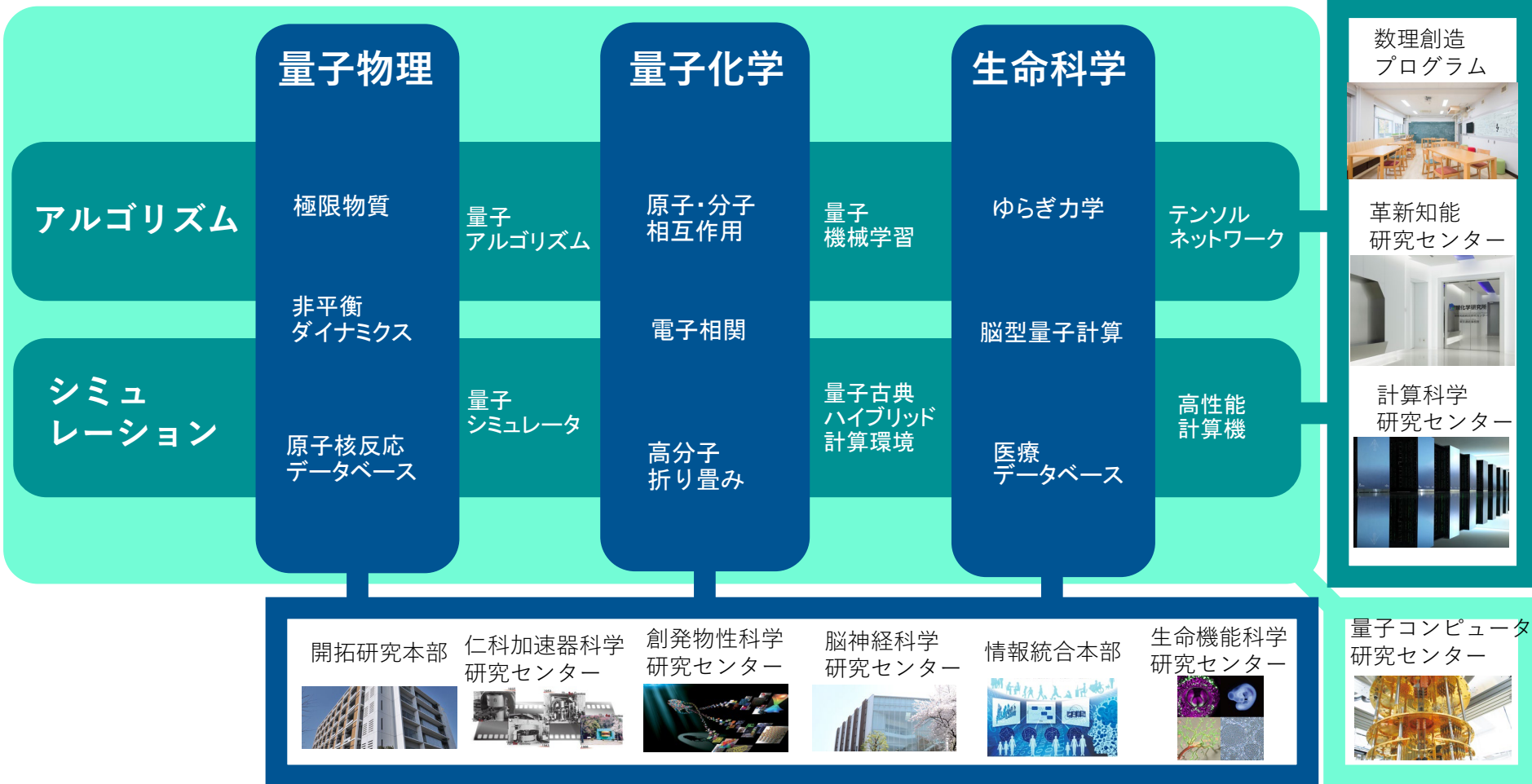
- ビッグデータとシミュレーションを繋ぐデータ同化技術の開発を推進



既存の理研プラットフォーム

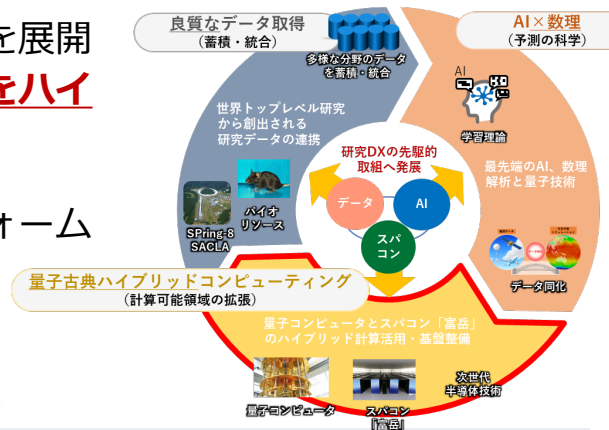
All RIKEN Quantum構想

「量子計算科学に基づく基礎科学の推進」を 目指すコンソーシアム(RIKEN Quantum)の設立準備が進行。

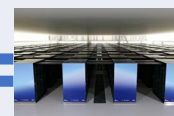


達成目標

- ◆ビッグデータの量子機械学習や複雑現象の予測と制御の科学を展開するため、**古典の弱点の組合せ爆発と量子の弱点の誤り訂正をハイブリッド化で克服するための計算基盤を構築**
- ◆人類が**計算可能な領域を飛躍的に拡張**する新たなプラットフォームを実現し、超複雑現象の解明から持続可能な社会を実現に導く



量子古典ハイブリッドコンピューティングの実現



量子古典ハイブリッドコンピューティングの基盤となるプログラミング言語、コンパイラ等の開発

量子・古典コンピュータを直結型で統合

量子古典ハイブリッドを高度化する先端半導体の要素技術（次世代シリコン半導体、EUVリソグラフィー光源など）の開発

TRIP 3

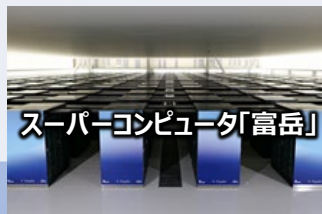
【高度化】従来の活動を基に、量子古典ハイブリッド計算に向けたハードウェアの基盤構築に向けた高度化に取り組む

- 超伝導量子コンピュータの大規模化、利用法の開発、**国産量子コンピュータの利用環境整備**



国産超伝導量子コンピュータ

- 「富岳」の共用による利用者拡大、計算資源の高度化研究を推進



スーパーコンピュータ「富岳」

- シリコン量子ビットの基盤的研究、レーザー光源の技術開発を推進



シリコン量子ビット・レーザー研究

既存の理研プラットフォーム

高度化の取組

従来の活動

量子古典ハイブリッド計算

Society5.0はデータ活用型社会
勝ち筋は**計算科学を制すること**

- スパコンによる高度な予測
- AIのための学習データ生成

→ **科学計算の需要急拡大**

創薬分子探索、機能性材料探索
医療、金融、エネルギー制御 etc.

しかし**組み合わせ爆発!**でお手上げ
スパコン、AIだけでは間に合わない

→ **量子の出番**

例：光機能分子の設計

フォトレジスト、人工光合成 など

(光照射前の状態)

→スパコンで分子中の電子同士の影響を平均化して計算できる

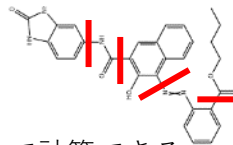
(光照射後の状態)

光で変化した状態では、分子中の電子同士の影響を全部取りこんだ
組み合わせの計算が必要。 **組み合わせ爆発、スパコンでも無理...**

→ **量子コンピュータの出番**

しかし、現在の量子コンピュータはエラーが避けられない

→量子と古典スパコンの連携により、エラーを抑えて、
組み合わせ爆発を回避する



このように・・・

古典：エラーはないが組合せ爆発に弱い
量子：エラー訂正が未達（10年以上必要）

100量子ビットの市販マシンを使える時代
両者の良いとこ取りはできないか
→量子古典ハイブリッド

最強の古典スパコン「富岳」を持ち
国産量子コンピュータを開発する
理研であれば、スパコンと量子コンピュー
タを近くで繋ぐことが可能



量子コンピュータ



スーパーコンピュータ「富岳」

量子古典ハイブリッド計算の
基本ソフトウェア群を
世界にさきがけて開発することが急務
→ **優位性確保**

幅広いTRIPの概念

良質なデータを生み出し幅広いサイエンスで利活用を促進

例：最先端のデータを生み出す研究基盤装置、設備や先端基盤技術開発

広範なデータの使い方についての新しい学理

例：数理、AI技術、インフォマティクス技術などの新しい解析手法など

取り組みを進めていくための新しいプラットフォームを創成

科学の計算領域を拡張する新たな技術

例：量子コン、次世代スパコン、そのハイブリットなどを活用した新たな研究、ネットワーク技術開発・構築

- 良質なデータを生み出し幅広いサイエンスで利活用を促進
- 広範なデータの使い方についての新しい学理を見出す
- 上記取り組みを進めていくための新しいプラットフォームを創成
- これらをもって科学の計算領域を拡張する新たな技術を進める



**「未来の予測制御の科学」を
分野の枠を超えて開拓**

(社会や地球規模の課題の予測と介入による制御を実現)