

2023年5月25日（木）

第10回基礎研究振興部会

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
説明資料

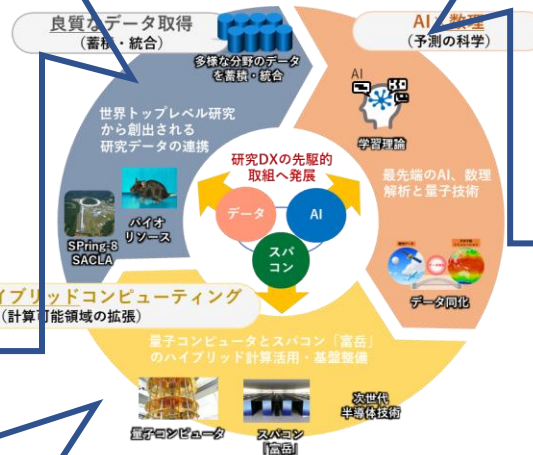
現在までの進捗状況 (まとめ)

良質なデータ取得

- メタデータ基盤の確立に向けて、生命科学分野のデータ共有システムに加えて、物理分野、化学分野のデータ共有に向けた準備を開始。
- 多様な研究分野のデータを分散的に保存するためのストレージシステムの構築、ネットワーク増強に着手。

AI数理

- 理研内の量子計算科学に関係する研究者を結集し、RIKEN Quantumを構築し、量子物理、量子化学、生物学を推進し、量子古典ハイブリッドコンピューティングに向けたアルゴリズム研究体制を構築。



量子古典ハイブリッドコンピューティング

- 量子HPC連携部門を設置し、量子古典ハイブリッドコンピューティングに向け、ソフトウェア、シミュレーション、プラットフォーム構築に向けた体制を構築。
- 2023年3月より、超伝導量子コンピュータの運用を開始。

ユースケース

- ユースケースとして、
 - ・元素変換 (核変換) の予測と制御
 - ・多電子集団における新機能発現機構の解明
 - ・グリーンデジタルトランスフォーメーションを決定。

TRIP事業本部運営体制

理化学研究所ではこの4月に最先端研究プラットフォーム連携（TRIP）事業本部を設置。

TRIP事業本部では、TRIPを最先端研究をリードするプラットフォーム群をつなぎ新たな知の領域を作り出すプロジェクトと捉え、本格的に開始するTRIPの実行フェーズにおいて、各研究センター等がつながり推進していく、新たな知の領域を作り出す研究プロジェクトの企画・調整を行う。

本部長

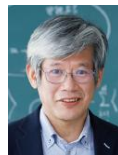


宮園 浩平

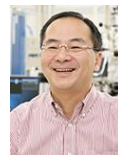
副本部長



吉田 稔



初田 哲男



川崎 雅司

本部長室
TRIP事業推進室

ユースケース

(担当：宮園本部長)

元素変換

RNC



木村 正明
室長

グリーンDX

CSRS



白須 賢
副センター長

BRC



市橋 泰範
TL

CEMS



有田 亮太郎
TL

多電子集団

TRIP1

(担当：吉田副本部長)

データ蓄積統合

DX人材育成・活用

R-IH



小林 紀郎
副部門長

情報基盤整備

R-IH



黒川 原佳
部長

CPR



大浪 修一
TL

TRIP2

(担当：初田副本部長)

RIKEN Quantum

人工知能

iTHEMS



初田 哲男
PD

AIP



上田 修功
副センター長

TRIP3

(担当：川崎副本部長)

量子HPC連携

先端半導体
要素技術

R-CCS



佐藤 三久
副センター長/
部門長

RQC



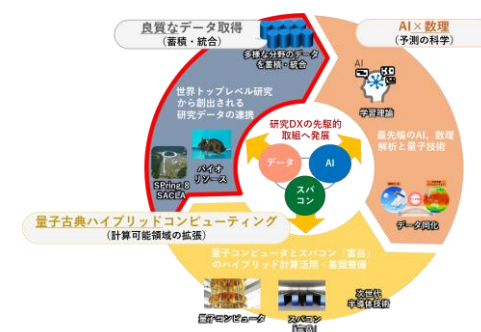
萬 伸一
副センター長

RAP



高橋 栄治
主任研究員

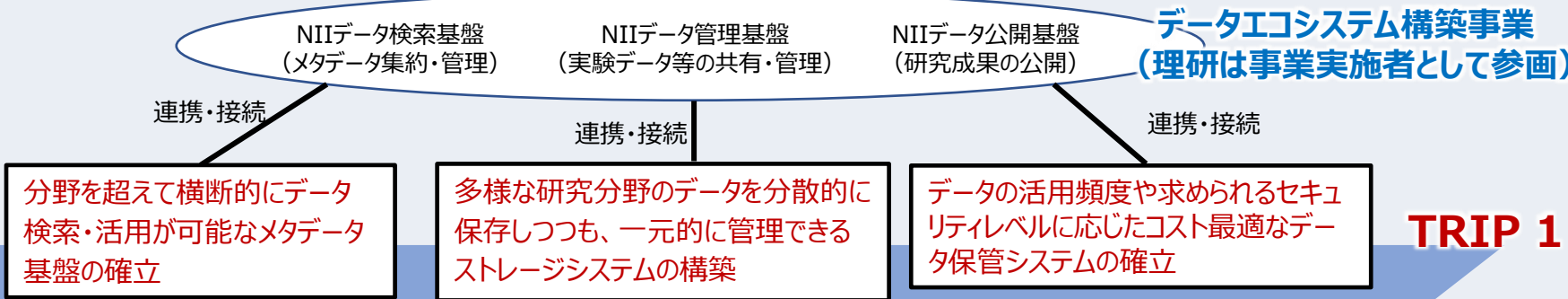
* 写真は各施策を担当する責任研究者



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



【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

R5年度実施内容

①分野を超えて横断的にデータ検索・活用が可能なメタデータ基盤の確立

- 物理学データ共有開発、工学データ共有開発のための体制整備を行う。
- メタデータベースにおいて生命科学分野でのデータや機能充実を図る。

②多様な研究分野のデータを分散的に保存しつつも、一元的に管理できるストレージシステムの構築

- データ安定保存のためのストレージシステム導入するとともに、多様な研究分野のデータの分散管理と利活用のためにネットワーク高度利用技術ユニットを設置する。
- 高速ネットワーク環境の整備を行い、大量データ転送などのテストを開始する。

③データの活用頻度や求められるセキュリティレベルに応じたコスト最適なデータ保管システムの確立

- 個人情報を含む研究データのためのデータ保管システムの構築を図るとともに、システムのプロトタイプ
の運用評価を実施。

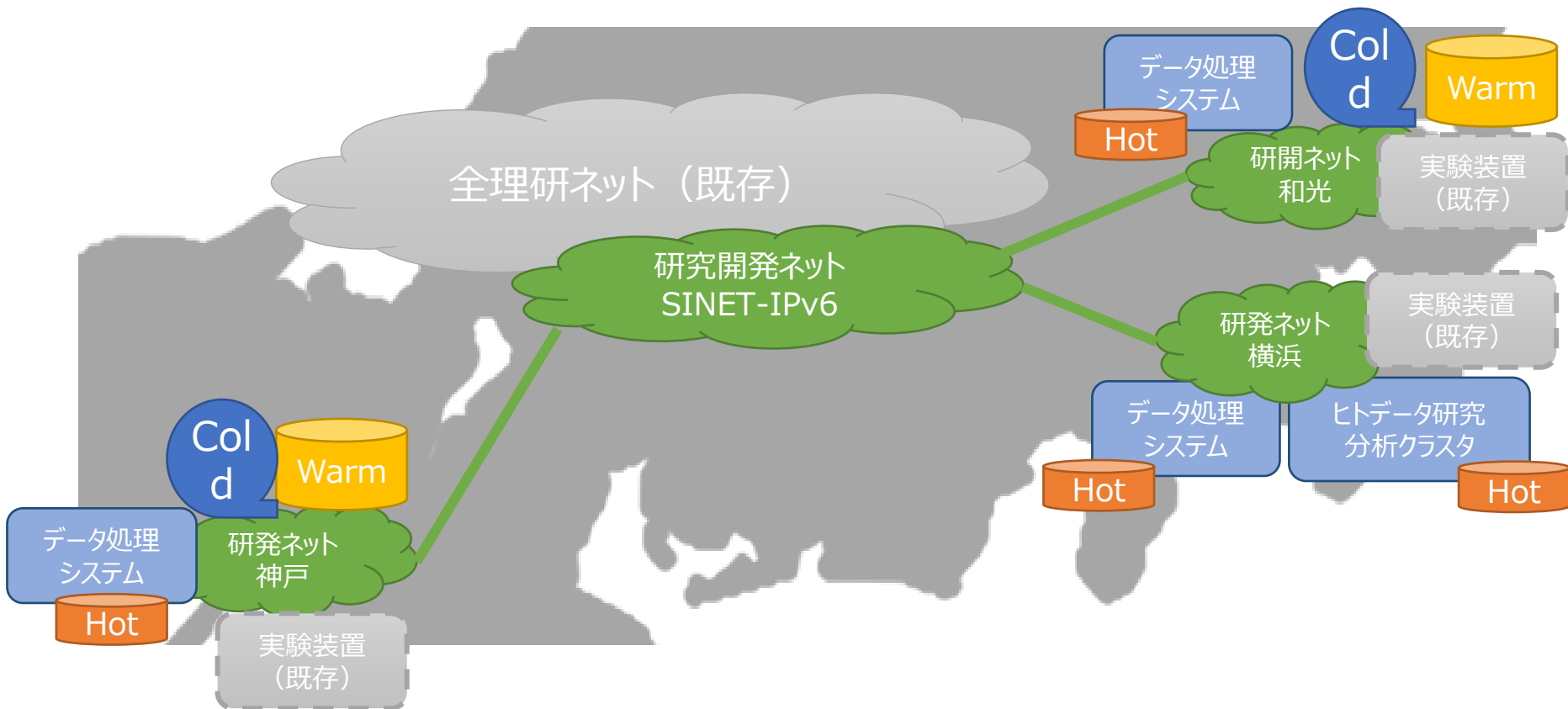
体制

情報統合本部において以下の体制を構築

- データ知識化開発ユニット
- データ管理システム開発ユニット
- 生命科学データ共有開発ユニット
- 医科学データ共有開発ユニット
- 物理学データ共有開発ユニット（秋予定）
- 工学データ共有開発ユニット（秋予定）
- ネットワーク高度利用技術開発ユニット（夏予定）

TRIP1：「良質なデータ取得」プラットフォーム 進捗状況

- 多様な研究分野のデータを分散的に保存しつつも、一元的に管理できるストレージシステムの構築。
- データの活用頻度や求められるセキュリティレベルに応じたコスト最適なデータ保管システムの確立



研究開発ネット：ネットワーク機器、SINETアクセス回線を今年度内に構築予定

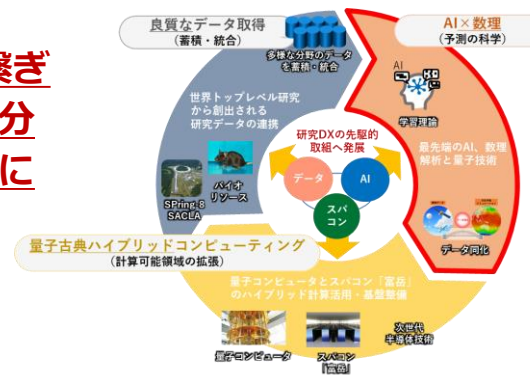
ストレージシステム：Warm&Coldストレージを今年度末構築予定。

研究データの転送管理システム：各データ処理システムおよび分析クラスタ・管理システムは今年度末構築予定。

	アクセス頻度	アクセス速度
①Hot Data	特に高い	速い
②Warm Data	高い	やや遅い
③Cold Data	低い	とても遅い

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



高度化の取組

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

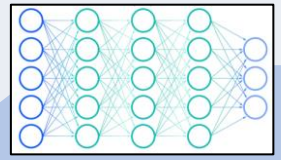
TRIP 2

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

従来の活動

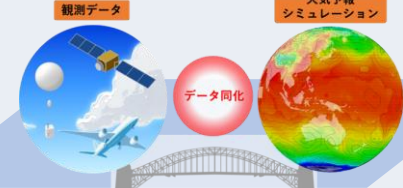
- 機械学習や最適化問題の基礎理論の研究を推進



- 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

R5年度実施内容

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

- 効率的な量子古典データ変換技術の開発
- 物理法則駆動型の量子機械学習理論の数理基盤構築

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

量子物理学

- 量子古典ハイブリッド計算による量子多体系の時間挙動解析法の開発
- 量子物質やゲージ理論にあらわれる負符号問題に対する量子古典ハイブリッド手法の開発

量子化学

- 変分量子固有値解法アルゴリズムに基づくユニタリー結合クラスタ法の開発
- 量子・古典ハイブリッド計算に基づいた電子相関埋め込み法の開発

生命科学

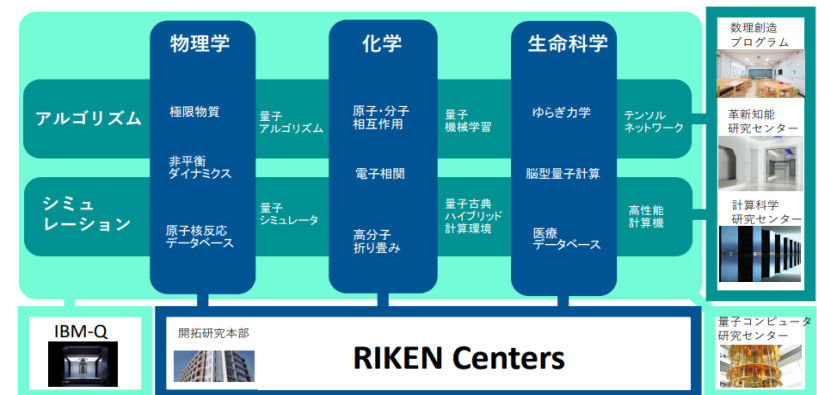
- RNAやDNAの折り畳み構造、生態系ネットワーク因果構造に対する量子古典ハイブリッド計算の実現

体制

AI×数理のプラットフォームの一つとして、理研内の8研究センターから10研究室が参画し、量子計算を推進する研究体制、RIKEN Quantumを構築。

- 数理創造研究プログラム
- 量子コンピュータ研究センター
- 仁科加速器科学研究センター
- 計算科学研究センター
- 創発物性科学研究センター
- 開拓研究本部
- 情報統合本部
- 脳神経科学研究センター

「量子計算科学に基づく基礎科学」の推進



cf. CERN Quantum Technology Initiative (CERN QTI)
Berkeley Quantum (LBNL, UCB), Quantum BC (Vancouver, Canada)

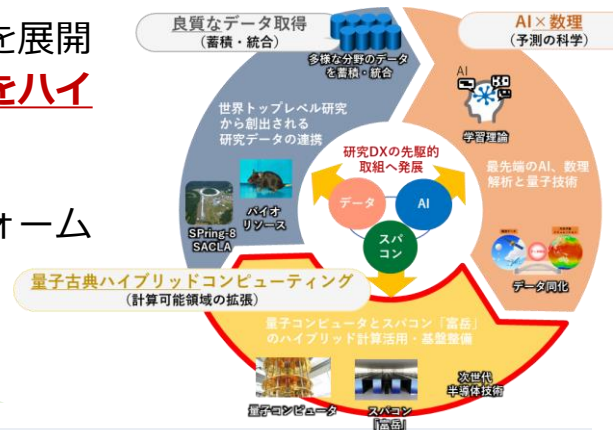
「量子計算科学に基づく基礎科学」の推進



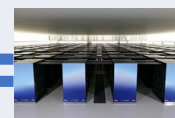
量子計算科学による基礎科学のブレークスルーは、
各研究分野の第一線の研究者が協働してのみ達成できる。
10研究室 → 理研全体に拡大

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

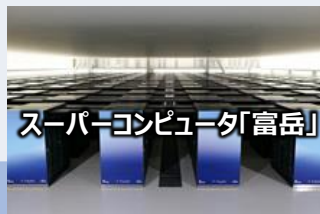
TRIP 3

【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**



- 「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



- 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



既存の理研プラットフォーム

高度化の取組

従来の活動

R5年度実施内容

①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

○量子古典ハイブリッドコンピューティングの基盤となる開発・実行環境の構築

- 量子コンピュータとスーパーコンピュータを高度に連携させるため、ソフトウェアスタック（ハイブリッド・プログラミング・システム）等の開発（プロトタイプの高度化）を行う。

○量子計算シミュレーション技術開発及び高度化

- 量子コンピュータ及び量子アルゴリズム等の開発を加速させるため、「富岳」をはじめとするスーパーコンピュータや、高性能GPUシステム上で稼働する量子計算シミュレーション技術開発及び高度化等を行う。

②量子・古典コンピュータを直結型で統合

- ①をふまえ、量子コンピュータとスーパーコンピュータの結合試験に向けた結合形態の検討と環境整備を行う。

③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の開発

- 次世代中赤外固体レーザーの試験装置の開発に着手し、EUV露光に必要なkW級出力を実現可能な設計パラメータを検討する。
- 波長変換用のレーザー結晶を含む次世代レーザー素子の開発に着手し、中赤外LEUV 変換効率向上へ向けた露光機用レーザーの他波長での動作可能性を検証する。

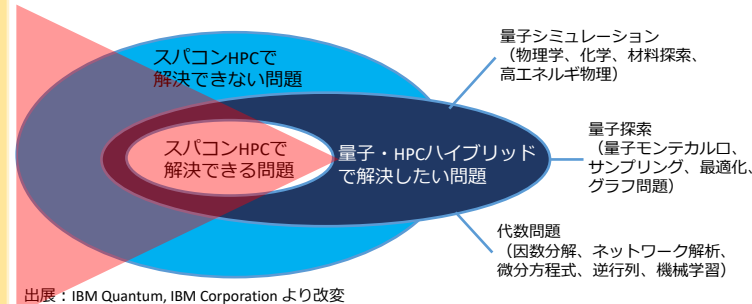
体制

計算科学研究センター（R-CCS）、量子コンピュータ研究センター（RQC）、光量子工学研究センター（RAP）を中心に以下の体制を構築。

- ・R-CCS 量子HPC連携プラットフォーム部門（新規）設置
- ・RQC 13研究室が参画。
- ・RAP 3研究室が参画

量子HPC連携プラットフォームの構築

- 量子コンピュータ (QC) とスーパーコンピュータ (HPC) とを高度に連携させることで計算可能領域を拡張。
- QCとHPCを連携させるシステムソフトウェア (Software Stack) の開発を加速させ、アドバンスド・コンピューティングを推進。
- 「量子-HPCハイブリッド環境」を世界に先駆けて整備し、提供することで、QCの本格利用に向けた研究開発環境を確保。



研究開発体制の整備

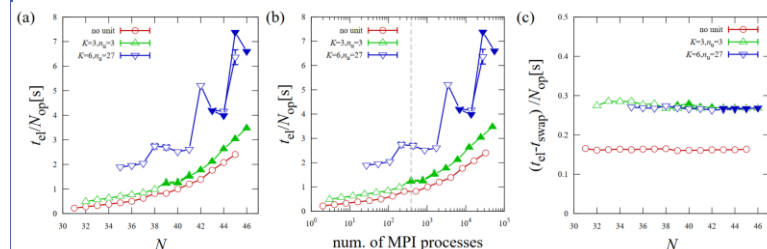


計算科学研究センター (R-CCS)に「量子HPC連携プラットフォーム部門」を2023年4月1日設置、プラットフォーム構築に向けた研究開発を加速。TRIP 2 で進める「RIKEN Quantum」との協業を強力に推進。

ユニット名	研究開発概要
量子HPCソフトウェア環境開発ユニット	量子HPCハイブリッドを実現するためのソフトウェア環境の開発 量子コンピュータとスーパーコンピュータを高度に連携させるため、ソフトウェアスタック (ハイブリッド・プログラミング・システム) 等の開発を行う。
量子計算シミュレーション技術開発ユニット	スーパーコンピュータ上で稼働する量子計算シミュレーション技術開発 量子コンピュータ及び量子アルゴリズム等の開発を加速させるため、「富岳」をはじめとするスーパーコンピュータや、高性能GPUシステム上で稼働する量子計算シミュレーション技術開発及び高度化等を行う。
量子HPCプラットフォーム運用技術ユニット	量子HPCプラットフォームの環境整備及び運用 量子コンピュータ及びスーパーコンピュータによるプラットフォームの環境整備及び運用を行う。また、ユーザーに対して両者の共通利用を推進するための利用環境の開発・高度化等を行う。

(先行的) 研究開発実績

R-CCSで開発した量子計算シミュレータ“braket”をスーパーコンピュータ「富岳」に実装し、「富岳」のlargeキューで、倍精度46qubitsのシミュレーションを実現。また、40qubitsのシミュレーションは1000ノード以下で手軽に実行できるようになり、ワークステーションやGPUにより進められている30qubits程度での量子アルゴリズムの研究開発をスケールアップする環境を整えた。



1. 元素変換（核変換）の予測と制御

新たなエネルギー源の創生や有用な新規元素同位体の発掘等につなげていくため、**様々な条件下での多種多様な核反応に関する知見を蓄積し、核反応理論の精度を向上させる。**

このため、取得が不十分なコアとなる核種のデータを取得、核種の特性予測モデルを構築し、データを補完するとともに、量子古典ハイブリッド計算を活用することによって、これまでにない高精度な特性予測モデルを構築し、核反応データベースを拡張する。

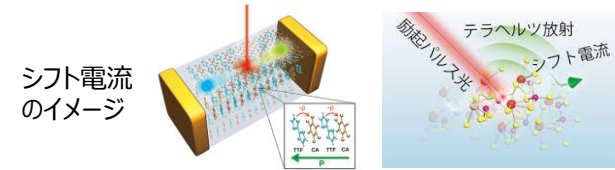
Cs129 32.06 h 1/2+	Cs130 29.21 m 1+	Cs131 9.689 d 5/2+	Cs132 6.479 d 2+	Cs133 7/2+	Cs134 2.0648 y 4+	Cs135 2.3E+6 y 7/2+	Cs136 13.16 d 5+	Cs137 30.07 y 7/2+
EC	EC,β	EC	EC,β	100	EC,β	β	β	β
0+	1/2+	0+	3/2+	0+	0+	0+	3/2+	0+
1.91	26.4	4.1	21.2	26.9	β	10.4	β	8.9
1127	1128 24.99 m 1+	1129 1.5717 y 1+	1130 12.36 h 5+	1131 8.02070 d 7/2+	1132 2.295 h 4+	1133 20.8 h 7/2+	1134 52.5 m (4)	1135 6.57 h 7/2+
100	EC,β	β	β	β	β	β	β	β

(例：医療用RI生産の場合)
黄色部分のデータを中心に取得（水色が不足データ）

2. 多電子集団における新機能発現機構の解明

高性能・高機能な物質・材料開発のため、**特に、古典コンピュータでは計算能力の限界により、十分に行うことができない多電子集団の相互作用が大きく影響する量子多体系物性や機能の予測を目指す。**

このため、量子古典ハイブリッド計算を活用することにより、物質中の電子状態をその相互作用も含めて高精度にシミュレーションすることを可能とし、物質の化学的組成からその物性や機能を高確度で予測を目指す。

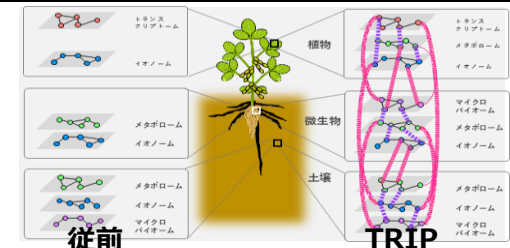


(例えば、光を照射した際に、特殊な電子状態に起因して電流が発生する現象（シフト電流）は、時間的な電子の移動とその状態、電荷分布を理解するデータが必要。)

3. グリーンデジタルトランスフォーメーション

SDGsで提唱された「食料安全保障」「陸域生態系の保護、回復、持続可能な利用の推進」「持続可能な消費生産形態」の実現を目指し、**多階層で構成された生態系（植物-微生物-土壌）の高精度予測と制御を目指す。**

このため、量子古典ハイブリッド計算を活用することによって、生態系を構築する多要素間のネットワークモデルを構築し、古典計算では難しい多階層で構成された生態系の高精度予測と制御を目指す。



(例えば、農業の場合、大豆に関する生態系データ・バイオリソース)