

2024年度量子・スパコン連携プラットフォーム
プロジェクトシンポジウム
2025年2月12日（水）

JHPC-quantumプロジェクト の進捗状況について

佐藤 三久

JHPC-quantumプロジェクト 事業代表
理化学研究所 計算科学研究センター
量子HPC連携プラットフォーム部門 部門長
(順天堂大学健康データサイエンス学部 教授)

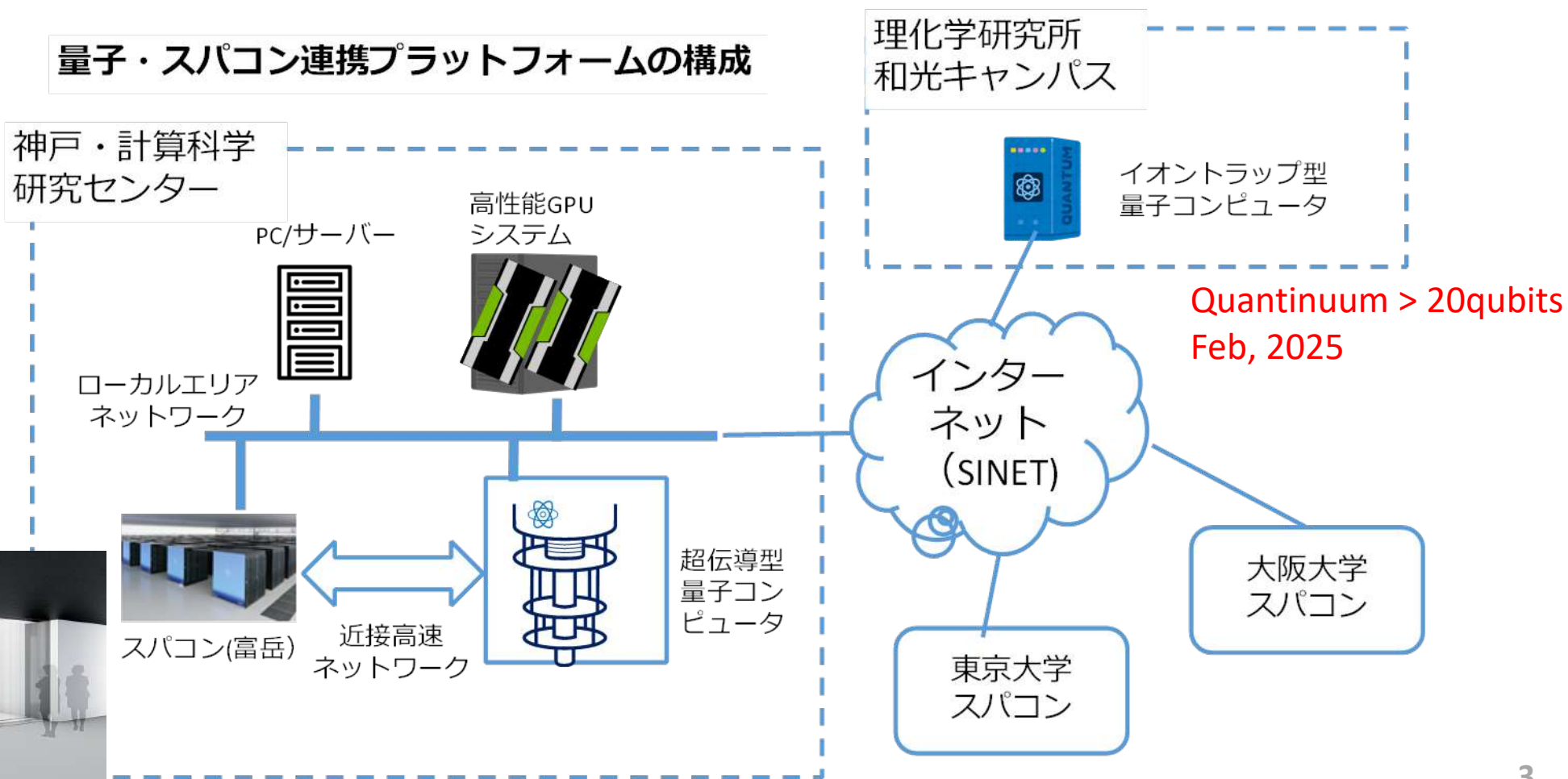


経済産業省（経産省）「ポスト5G情報通信システム基盤強化研究開発事業」の一環として、量子コンピュータ（QC）とスーパーコンピュータ（HPC）が連携して動作する環境（ソフトウェア開発等）を整備し、我が国の産業基盤の高度化（計算資源の拡張）に資するために、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）が公募を実施、理研が採択された。

- **正式名称：“計算可能領域の開拓のための量子・スパコン連携プラットフォームの研究開発”**
 - 通称：「JHPC-quantum プロジェクト」
- **メンバー：国立研究開発法人理化学研究所、ソフトバンク株式会社（共同実施）東京大学、大阪大学**
- **プロジェクト期間：2023年11月 – 2028年10月（5年間）**
- **ミッション：**
 - 量子コンピュータとスーパーコンピュータ（HPC）を連携するための量子HPCハイブリッドシステムソフトウェアの研究開発を行う。
 - このシステムソフトウェアを用いて、**2つの種類の量子コンピュータ（IBM超伝導型、Quantinuumイオントラップ型）をオンプレミスで導入し、「富岳」、GPUシステム、東大と阪大のスパコン**からなる量子スーパーコンピュータハイブリッド計算のためのプラットフォームを構築
 - 量子HPCハイブリッドアプリケーションの**優位性を実証**するとともに、**ポスト5G**時代に向けて、このプラットフォーム上で量子HPCハイブリッドアプリケーションをサービスとして展開する技術開発。

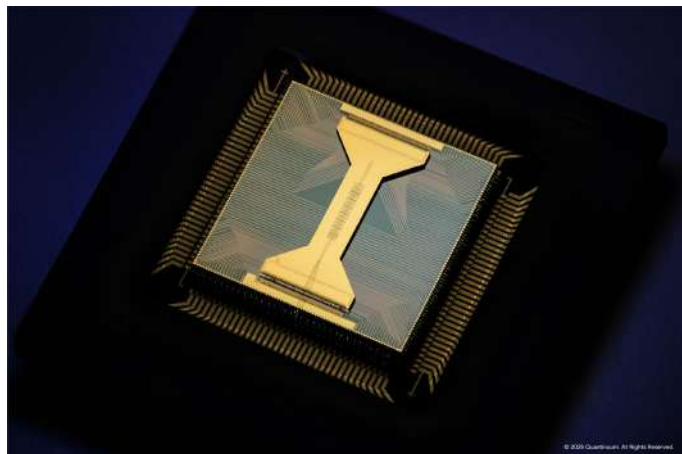
特性の異なる2種類の量子コンピュータを**オンプレミス**で整備(2025年2Qに整備)、理研及び東京大学、大阪大学のスパコンから利用可能な量子スパコン連携プラットフォームを構築し、**実際の量子・HPCアプリケーションで有効性を実証**。

量子・スパコン連携プラットフォームの構成



IBM > 133qubits
May-June 2025





黎明

QUANTINUUM
REIMEI

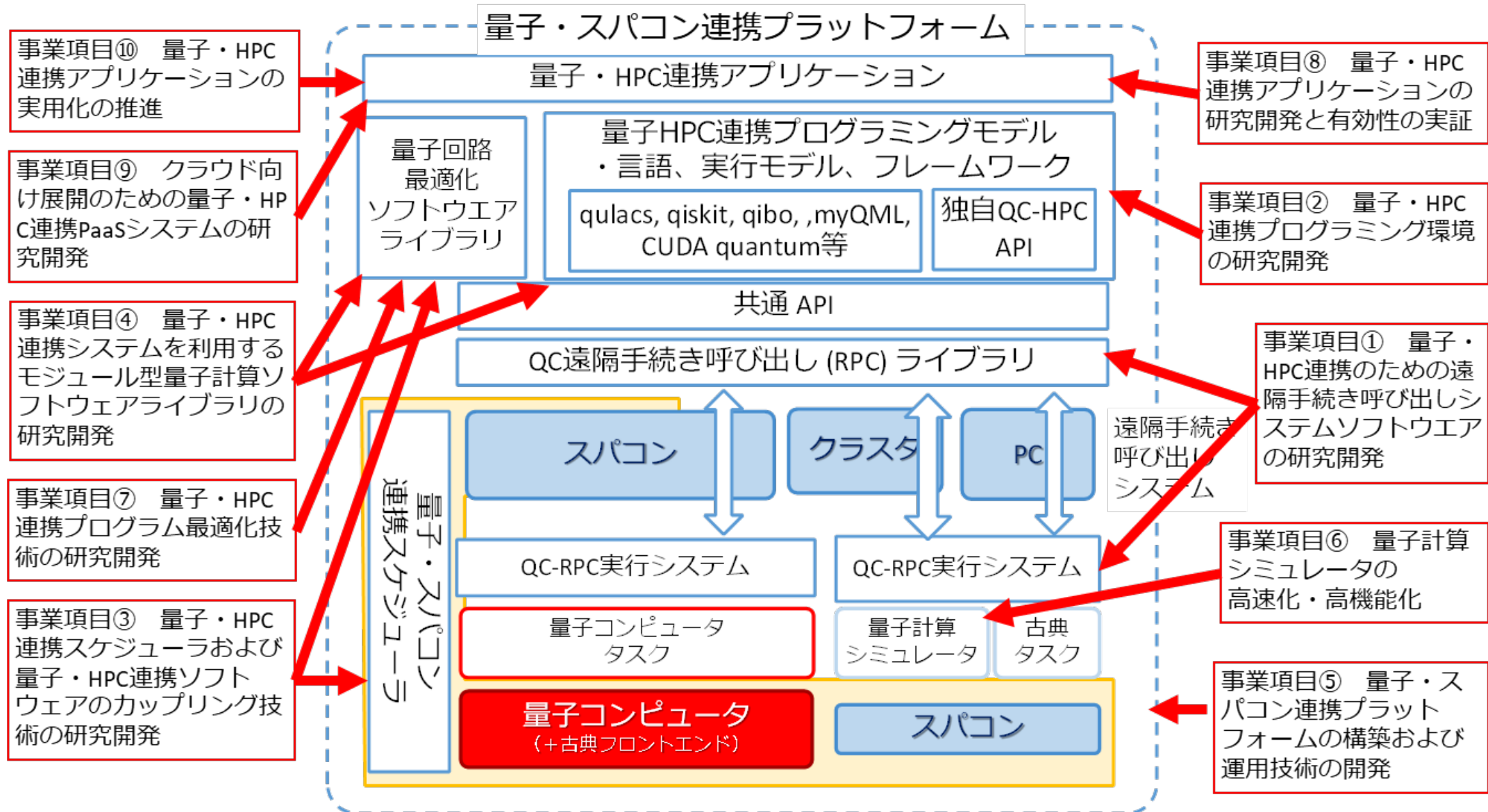
” Quantinuumイオントラップ方式量子
コンピュータが2月から稼働



IBMのマシンの部屋ができた。
(R-CCSの玄関ホールから見える！)



事業項目



● 各事業項目の進捗については、最後のセッションで。

中間目標

- ①実際の量子コンピュータを整備し、開発した量子・HPC連携システムソフトウェアを設置し、量子・スパコン連携プラットフォームを構築する。運用体制を整備し、プラットフォームを量子・HPC連携アプリケーションの研究開発者に提供する。
- ②最終目標の量子多体系の低エネルギー状態の計算の検証に必要な量子ダイナミックスプログラムおよび目標達成のための詳細の評価条件など**主要パラメータを明確**にする。
- ③量子・スパコン連携プラットフォームの有効性を検証するアプリケーションとして、新材料や化学反応の設計に不可欠な量子多体系の低エネルギー状態の計算を標的とする。現行の古典的計算リソースだけでは厳密な計算が困難な、STO-3G基底に基づく26サイトの水素原子系（52量子ビット系相当）の基底状態を、24時間以内にエネルギー誤差0.1Ha以内で求めるために必要な要件を定義する。これには、エネルギー誤差の評価方法と、該当アプリケーションに特有のハイパーパラメータの設定値の特定が含まれる。
- ④量子多体計算の応用が可能な化学分野や材料分野でパートナー企業を特定し、トライアル環境の提供を開始する。

最終目標

- ①開発した量子・スパコン連携プラットフォームにおいて、普遍的に必要な機能、性能確立のため量子ダイナミックスアルゴリズムを用いた**実証**を行う。中間目標で設定した主要パラメータでの計算を24時間以内で実行するとともに誤差抑制技術と量子ダイナミックス計算相当の手続きを組み込んだ量子計算ライブラリを開発し、プラットフォームに組み込む。
- ②量子・スパコン連携プラットフォームの有効性を検証するアプリケーションドメインとして、新材料や化学反応の設計に不可欠な量子多体系の低エネルギー状態の計算を標的とする。現行の古典的計算リソースだけでは厳密な計算が困難なSTO-3G基底に基づく26サイトの水素原子系（52量子ビット系相当）の基底状態を、24時間以内にエネルギー誤差0.1Ha以内で求めるための検証を行う。
- ③開発した量子・HPC連携システムソフトウェアを用いて、**複数のスパコン並びにクラウドと複数の量子コンピュータおよび量子計算シミュレータからなるマルチプラットフォームを構築、それぞれ相互に利用できることを確認**する。
- ④量子・スパコン連携プラットフォームを用いた実用アプリを検討するトライアル企業を4社以上獲得する。

① 実際の量子コンピュータを整備し、開発した量子・HPC連携システムソフトウェアを設置し、量子・スパコン連携プラットフォームを構築する。運用体制を整備し、プラットフォームを量子・HPC連携アプリケーションの研究開発者に提供する。

- システムソフトウェアの開発は計画通り。一部機能は実装中であるが、年度末まで**最初のバージョンのソフトウェア開発の終了**の見込み
- 量子コンピュータは富岳の計算リソース、ネットワーク環境も含め設置が進行中。計画通り設置される見込み
- 量子コンピュータの設置後、システムソフトウェアを配置（デプロイ）し、テスト運用を開始する見込み。すでに一部テストが進行中。2026年度から運用開始を計画
- 最終目標③（マルチサイトのスパコンのサポート）について**一部前倒しして**、機能を限定し、複数のスパコン（東京大学）からアクセスする機能の検討を開始

- ② 最終目標の量子多体系の低エネルギー状態の計算の検証に必要な量子ダイナミックスプログラムおよび目標達成のための詳細の評価条件など主要パラメータを明確にする。
- ③ 量子・スパコン連携プラットフォームの有効性を検証するアプリケーションとして、新材料や化学反応の設計に不可欠な量子多体系の低エネルギー状態の計算を標的とする。現行の古典的計算リソースだけでは厳密な計算が困難な、STO-3G基底に基づく26サイトの水素原子系（52量子ビット系相当）の基底状態を、24時間以内にエネルギー誤差0.1Ha以内で求めるために必要な要件を定義する。これには、エネルギー誤差の評価方法と、該当アプリケーションに特有のハイパーパラメータの設定値の特定が含まれる。

- クラウド利用でアクセスできる量子コンピュータを用いて、最終目標に挙げられているアプリケーションについて、目標達成のための詳細の評価条件など**主要パラメータの明確化**や必要な要件の精査を実施中
- IBMのQPUと富岳の大規模並列プログラムを連携し、Sample-based quantum diagonalization (SQD)法による量子化学分野のアプリケーションを大規模な量子HPCハイブリッドプログラムとしての実行を計画（**前倒しして最終目標①②の有効性の実証に新たなユースケース**としての寄与に期待）

- 最近になって、多くの量子HPCハイブリッド・アルゴリズムとアプリケーションが提案されている。
 - おもに、NISQを対象とする。
 - 量子変分アルゴリズム
 - VQE, QAOA, …いろいろな変分アルゴリズムが提案されている。
- 実用に向けて、以下のアプリケーション領域に注目している。
 - 量子化学
 - **Quantum-centric Supercomputing (QCSC) with IBM and RIKEN**
 - Sample-based quantum diagonalization (SQD)
 - 量子機械学習：Quantum Machine Learning (QML)
 - 普通の機械学習と QMLとの転移学習

- いわゆる“汎用量子コンピュータ”は、様々な量子システムを予測することができるシミュレータとしてもちいることができることが知られている。
 - 量子化学における電子構造の問題は、100量子ビットを超える量子コンピュータにとって実用的なユースケースとなる。現在の量子コンピュータは、このサイズの量子ビット数（100qubit以上）に達しているために、この問題は有望と思われる。
- しかしながら、これらのユースケースを量子コンピュータにマッピングすると、深い回路が生成され、量子状態の保持の時間に制限がある、現在の量子コンピュータでは実行が難しく、まだ、フォールト・トレラントな量子でないNISQでは、分子エネルギーを推定するための測定回数が膨大になり、実行時間が法外になってしまう。
- したがって、残念ながら、量子コンピュータ単体では、現在の量子コンピュータでは、手が届かない問題となる。



- **HPCを活用したアルゴリズムSample-based quantum diagonalization (SQD)による解決**

- **“Quantum Utility” 量子有用性**

どのように、現在の量子コンピュータを実用的な問題に適用するか。

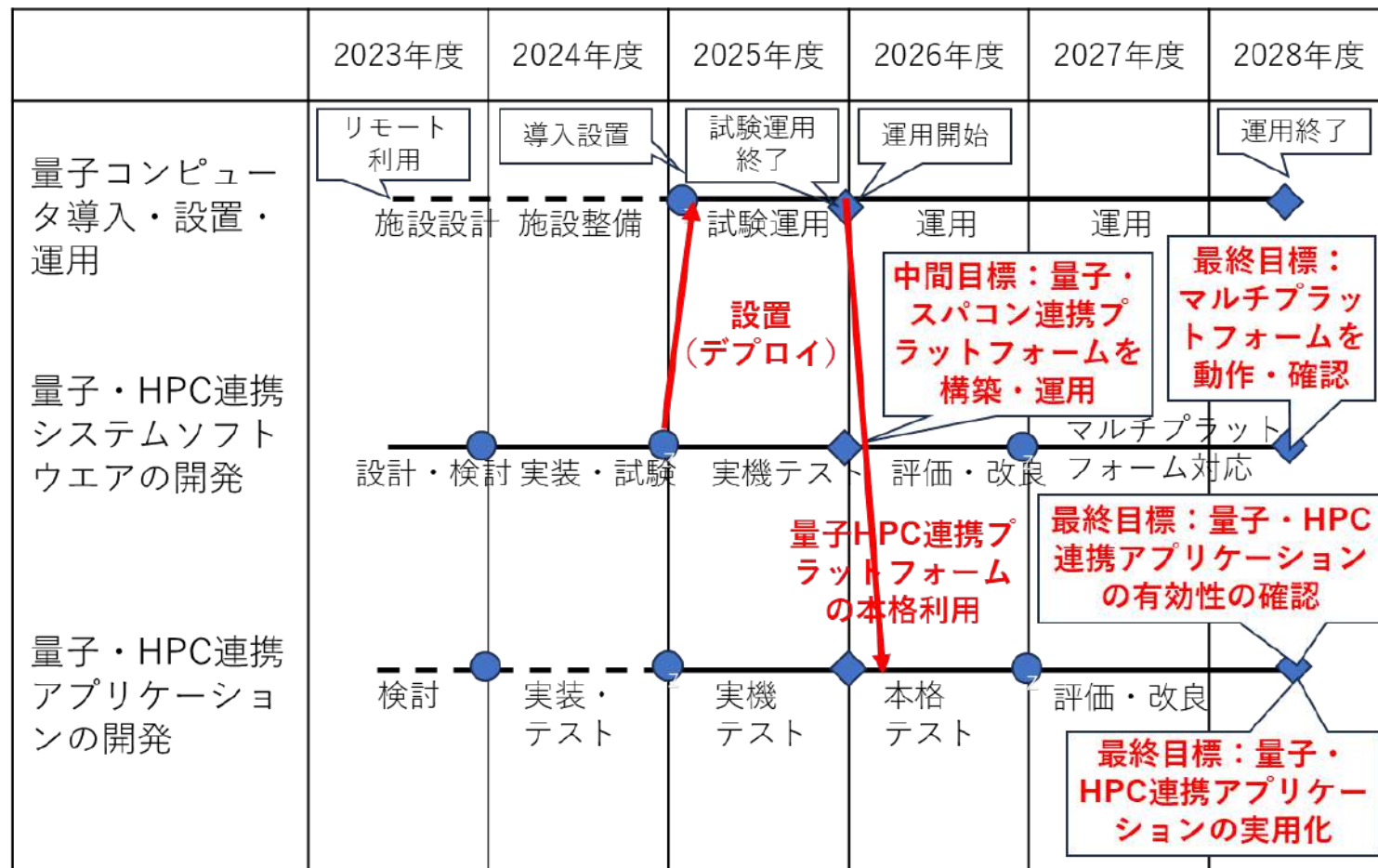


J. Gambetta, VP for QC, IBM @
IBM Quantum Summit 2023

**④ 量子多体計算の応用が可能な化学分野や材料分野でパートナー企業を特定し、
トライアル環境の提供を開始する。**

- 化学分野の数社とプラットフォームの利用計画について議論を継続
- テストユーザープログラムの実施を開始
- 「テストユーザープログラム」を利用することで実用化トライアルを加速化

- 2023年11月、プロジェクト開始
- 2025年2Q、実機設置完了
- 2026年1Q、量子・スパコン連携プラットフォーム運用開始
- (2026年2Q: ステージゲート)
- 後半は、量子・HPC連携アプリの有効性実証、実用化へ



- 実機導入し構築・運用する量子スパコン連携プラットフォームのテストユーザーとして評価・フィードバックを得ることを目的に、「JHPC-quantumプラットフォームテストユーザープログラム(仮称)」を実施し、ソフトウェアおよびシステムの高度化、当該プラットフォームのユーザーのコミュニティ醸成を図る。
- 応募に際しては、応募資料には以下を記載して頂く。
 - 実施課題: **トライアルする量子、HPC、ハイブリッドアルゴリズム/ソフトウェアの概要情報**
 - 必要とする量子計算機やHPCのリソース量
 - NEDOプロジェクトに協力頂くことへの同意。具体的には:
 - ハイブリッドシステムの統合テスト実施への協力
 - 知財や成果発表に対する考え方への同意
- 審査: NEDOプロジェクトメンバの月例会議等で審査する。
- **今年度準備、来年度実施予定。**