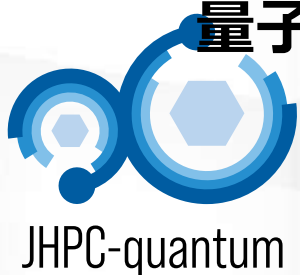


JHPC Quantumプロジェクト の進捗状況について

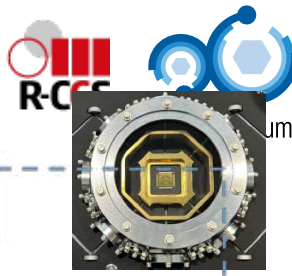
佐藤 三久 (JHPC Quantum プロジェクトリーダー)

理化学研究所 計算科学研究センター

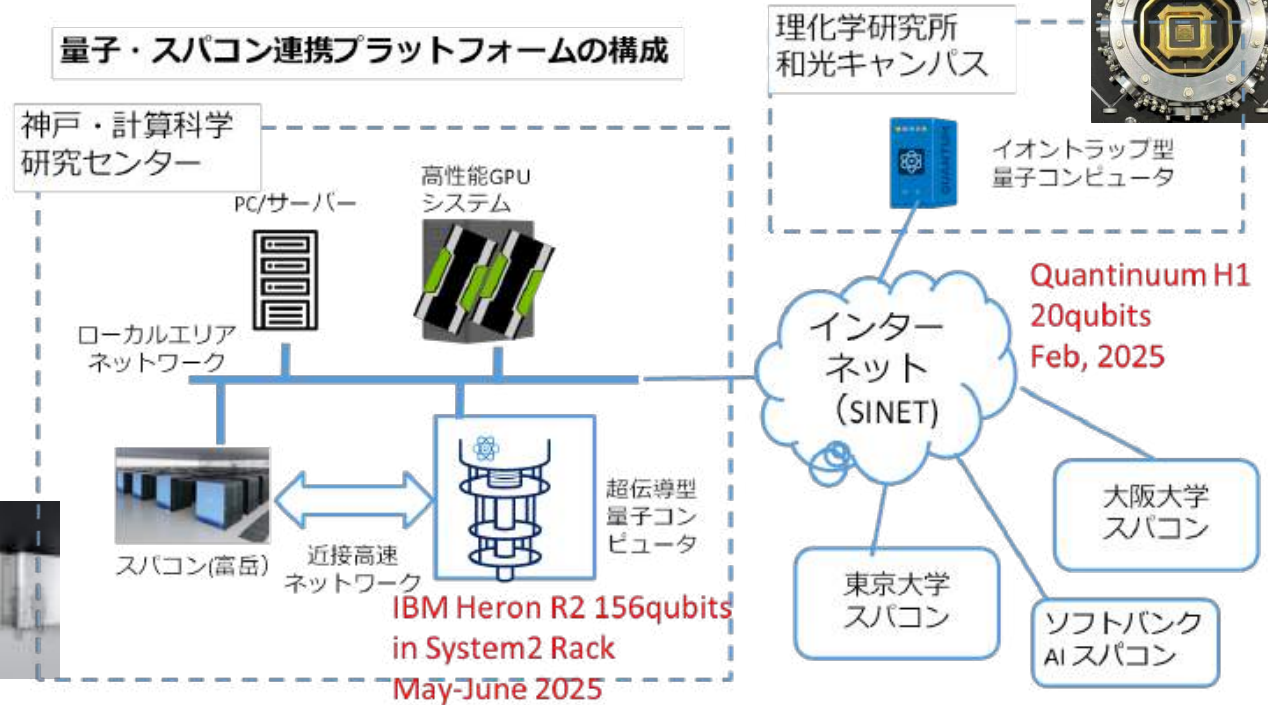
量子HPC連携プラットフォーム部門



JHPC-quantum プロジェクト



- 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”
- 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。

[量子優位性] 量子・大規模スパコン連携による量子優位性への挑戦

- IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD (Sample-based quantum diagonalization) 法を開発し、富岳の大規模ノード (15万ノード) とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPCハイブリッドプログラムの実行に成功。
- これまでの量子コンピュータを用いた計算では最も低い (最良) の結果を得ることができた。
- プロジェクト後半 (SG後) の量子優位性の実証に有効な見込みを得た。
- Quantinuumについても量子化学分野のデモアプリの開発・実行を行った。後半での有効性の実証に取り組む

[産業化支援] テストユーザープログラム実施による産業化支援を開始

- テストユーザープログラムを計画より前倒しで実施、現在12プロジェクトを採択。今年度は、21プロジェクト実施
- NEDOチャレンジユーザーを支援

[量子HPCプラットフォーム] 量子スパコン連携アプリを実行するJHPC Quantumプラットフォームを構築、運用開始

- 2種類の量子コンピュータ (IBM超伝導、Quantinuumイオントラップ) をオンプレミスで整備し、スーパーコンピュータ富岳と合わせて量子HPCハイブリッドプログラムを実行するプラットフォームが完成、これから本格運用に移行。ワークフローツールによる疎結合と遠隔手続き呼び出しによる密結合の2つの量子HPCハイブリッドプログラムのプログラミングの方法を確立、提供した。
- 動作の早いIBM超伝導については、同じ建屋で低遅延・高速な通信で、多数の量子回路が実行できるように配慮。(来年度)
- 他の多くのプロジェクトで量子HPCハイブリッドの重要性を指摘しているものの、密結合による大規模HPC環境からの利用をサポートしているシステムはない。

[事業仮説の特定] ソフトバンクAIスパコンを含む、複数スパコンからの利用を実証

- 複数スパコンからの利用について、前倒しで実証実験を実施
- ソフトバンクのAIスパコンを量子HPCプラットフォームを接続し、企業クラウド環境からの利用を進める計画。これにより、採択条件の一つである「実ビジネスにつながる事業仮説の特定」を進める。

[量子優位性] 量子・大規模スパコン連携による量子優位性への挑戦

- IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD (Sample-based quantum diagonalization) 法を開発し、富岳の大規模ノード (15万ノード) とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPCハイブリッドプログラムの実行に成功。
- これまでの量子コンピュータを用いた計算では最も低い (最良) の結果を得ることができた。
- プロジェクト後半 (SG後) の量子優位性の実証に有効な見込みを得た。
- Quantinuumについても量子化学分野のデモアプリの開発・実行を行った。後半での有効性の実証に取り組む

[産業化支援] テストユーザープログラム実施による産業化支援を開始

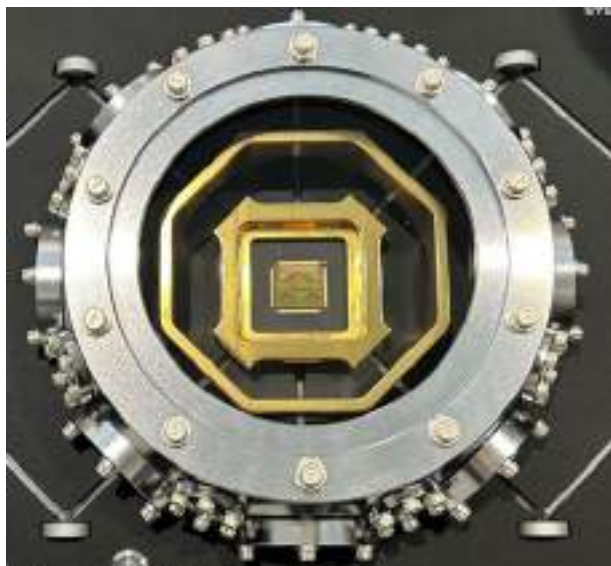
- テストユーザープログラムを計画より前倒しで実施、現在12プロジェクトを採択。今年度は、21プロジェクト実施
- NEDOチャレンジユーザーを支援

[量子HPCプラットフォーム] 量子スパコン連携アプリを実行するJHPC Quantumプラットフォームを構築、運用開始

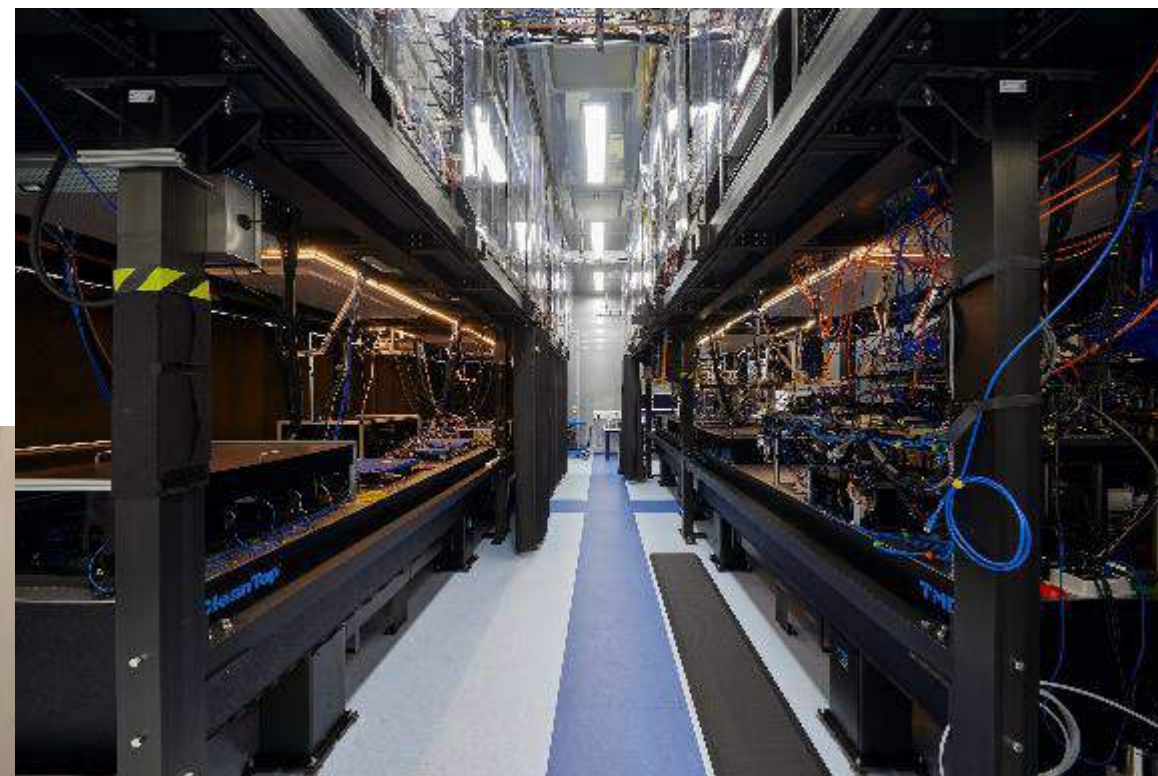
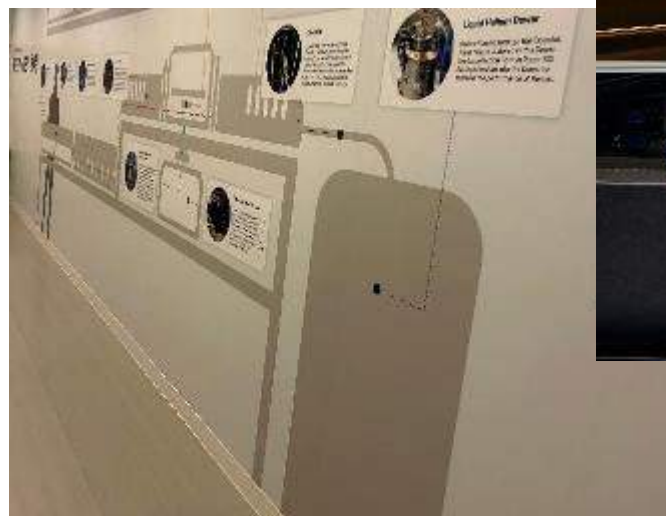
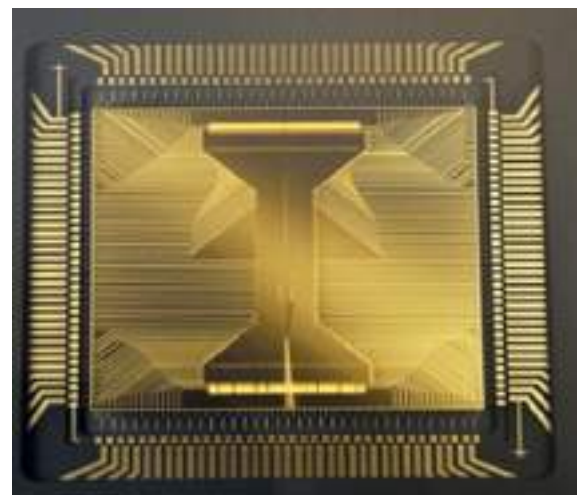
- 2種類の量子コンピュータ (IBM超伝導、Quantinuumイオントラップ) をオンプレミスで整備し、スーパーコンピュータ富岳と合わせて量子HPCハイブリッドプログラムを実行するプラットフォームが完成、これから本格運用に移行。ワークフローツールによる疎結合と遠隔手続き呼び出しによる密結合の2つの量子HPCハイブリッドプログラムのプログラミングの方法を確立、提供した。
- 動作の早いIBM超伝導については、同じ建屋で低遅延・高速な通信で、多数の量子回路が実行できるように配慮。(来年度)
- 他の多くのプロジェクトで量子HPCハイブリッドの重要性を指摘しているものの、密結合による大規模HPC環境からの利用をサポートしているシステムはない。

[事業仮説の特定] ソフトバンクAIスパコンを含む、複数スパコンからの利用を実証

- 複数スパコンからの利用について、前倒しで実証実験を実施
- ソフトバンクのAIスパコンを量子HPCプラットフォームを接続し、企業クラウド環境からの利用を進める計画。これにより、採択条件の一つである「実ビジネスにつながる事業仮説の特定」を進める。

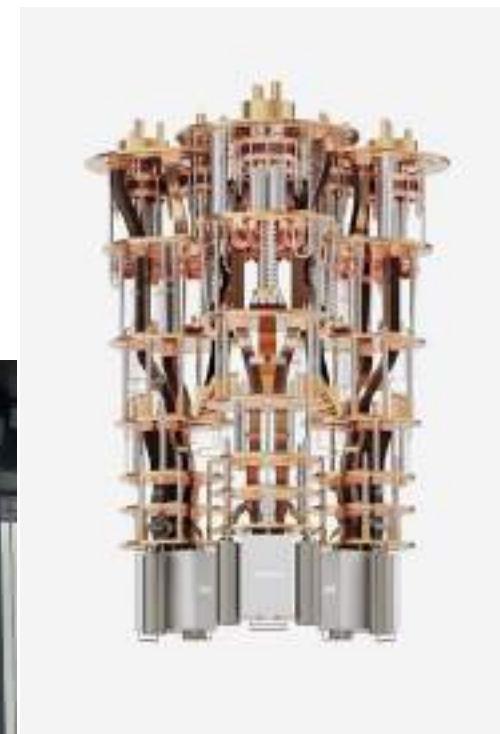
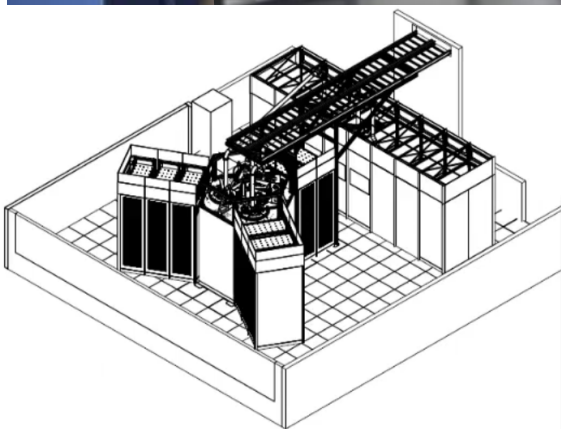


Quantinuumイオントラップ方式量子コンピュータ
が理研@和光に設置され、2月から稼働



©Quantinuum

IBM超伝導方式量子コンピュータがR-CCS@神戸に設置され、6月から稼働

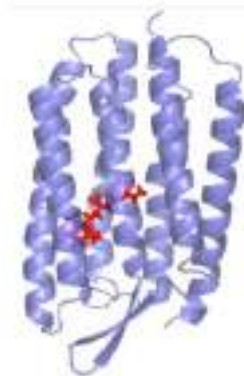


System 2は、3つのQPUを収容できるが、本システムはHeron R2 1 QPUのみ

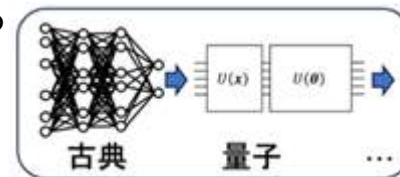
量子コンピュータ	特徴	用途
超伝導方式	中規模のqubit（150qubit以上）動作速度が速い。ノイズに対する対処が必要。量子ビットの接続に制限がある。	大中規模のNISQマシンの活用・実用的な利用を見据えた利用技術・システムソフトウェアの開発。高速性を活用した多数のサンプリングなどの応用
イオントラップ方式	小規模のqubit数（20～56 qubit）であるが、忠実度が高い。動作が遅いが、量子ビットの接続に自由度があり、有効利用が可能。	小中規模であるが、高い忠実度を利用したソフトウェア開発。深い（長い）量子プログラムを実行でき、応用範囲が広い

IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD（Sample-based quantum diagonalization）法を開発し、富岳の大規模ノード（15万ノード）とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPC/ハイブリッドプログラムの実行に成功。大規模なHPCとの組み合わせによる**[量子優位性]**の実証実験

生体分子系（レチナール）の反応解析を、R-CCSが開発したスパコンでの解析プログラムNTChemと組み合わせて**イオントラップ方式**の高忠実性を生かした、End-to-endのスケラブルな化学計算手法の実証実験



量子機械学習は量子コンピュータに期待されるアプリの一つ。**イオントラップ方式の忠実性と深い回路の実行を生かした**、量子機械学習の研究開発を実施している



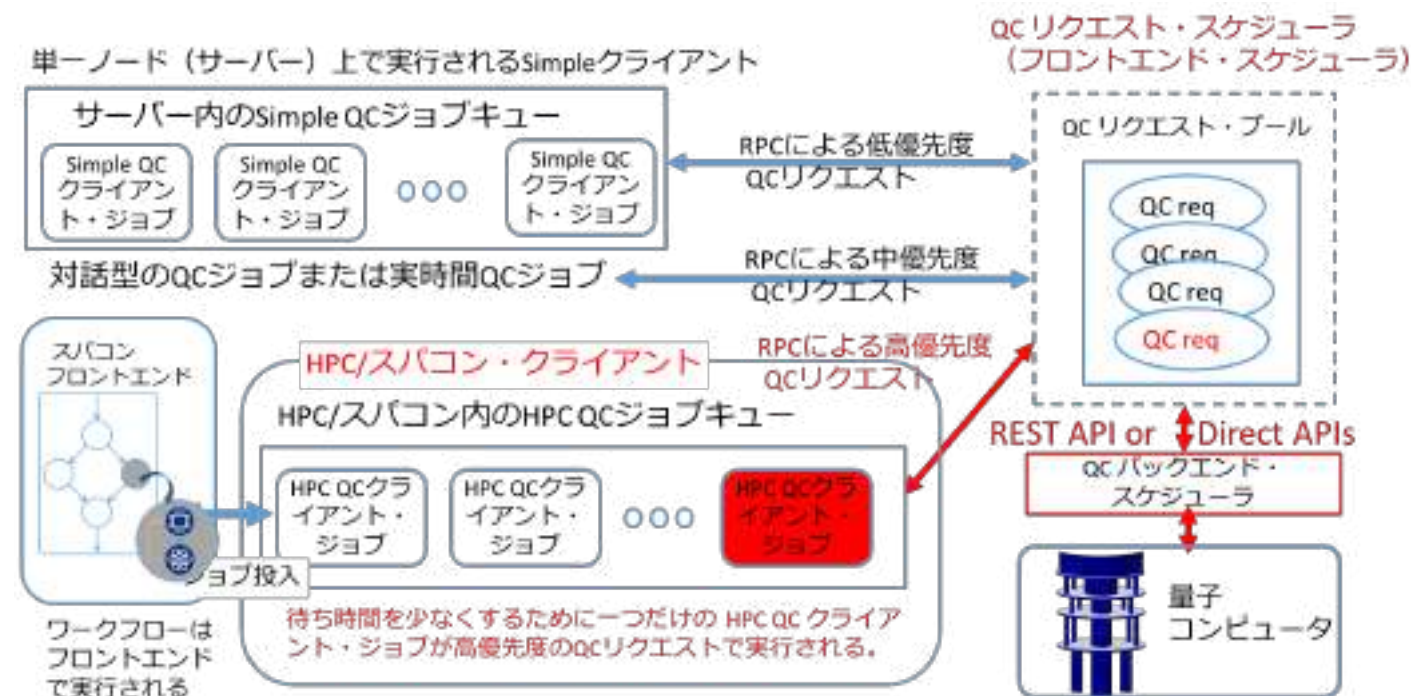
- テストユーザーの多くはIBM/QTMの両方を用い、それぞれの特性に合わせてアルゴリズムに改良を加え最良の結果を得ることを目論んでいる。
- 超伝導型の高速性、イオントラップ型の高忠実性の特性を生かした使い分け、連携アプリの高度化はこれまでにない試みであり、このためには異なる方式の量子コンピュータが必須。
⇒ 両者を同時に利用するアプリも検討中
- 異なる量子コンピュータに対応できる量子HPC連携プラットフォームは国産量子コンピュータを含む様々な量子コンピュータに適用でき、大きな優位性となっている。
⇒ 多様な量子コンピュータ方式へ本プロジェクトで開発したシステムソフトウェアが対応可能

● JHPC Quantum システム・アーキテクチャの設計方針

- ①量子コンピュータとスパコンが双方が効率的にスケジューリングできるようにすること。
- ②富岳、その他のスパコンとともに、認証・認可などを含むユーザー管理ができること
- ③通常の量子コンピュータの利用環境からスムーズに移行ができること

● JHPC Quantum システム・利用モデル

- ①qiskit等の単一ノードのサーバーからの利用
- ②ワークフローツールを用いた、それぞれ独立なプログラムによる、量子プログラム（①の単一ノード）とスパコンのHPCプログラムの連携
- ③HPCプログラムから直接、量子プログラムを実行・連携する高度な利用



[量子優位性] 量子・大規模スパコン連携による量子優位性への挑戦

- IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD (Sample-based quantum diagonalization) 法を開発し、富岳の大規模ノード (15万ノード) とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPCハイブリッドプログラムの実行に成功。
- これまでの量子コンピュータを用いた計算では最も低い (最良) の結果を得ることができた。
- プロジェクト後半 (SG後) の量子優位性の実証に有効な見込みを得た。
- Quantinuumについても量子化学分野のデモアプリの開発・実行を行った。後半での有効性の実証に取り組む

[産業化支援] テストユーザープログラム実施による産業化支援を開始

- テストユーザープログラムを計画より前倒しで実施、現在12プロジェクトを採択。今年度は、21プロジェクト実施
- NEDOチャレンジユーザーを支援

[量子HPCプラットフォーム] 量子スパコン連携アプリを実行するJHPC Quantumプラットフォームを構築、運用開始

- 2種類の量子コンピュータ (IBM超伝導、Quantinuumイオントラップ) をオンプレミスで整備し、スーパーコンピュータ富岳と合わせて量子HPCハイブリッドプログラムを実行するプラットフォームが完成、これから本格運用に移行。ワークフローツールによる疎結合と遠隔手続き呼び出しによる密結合の2つの量子HPCハイブリッドプログラムのプログラミングの方法を確立、提供した。
- 動作の早いIBM超伝導については、同じ建屋で低遅延・高速な通信で、多数の量子回路が実行できるように配慮。(来年度)
- 他の多くのプロジェクトで量子HPCハイブリッドの重要性を指摘しているものの、密結合による大規模HPC環境からの利用をサポートしているシステムはない。

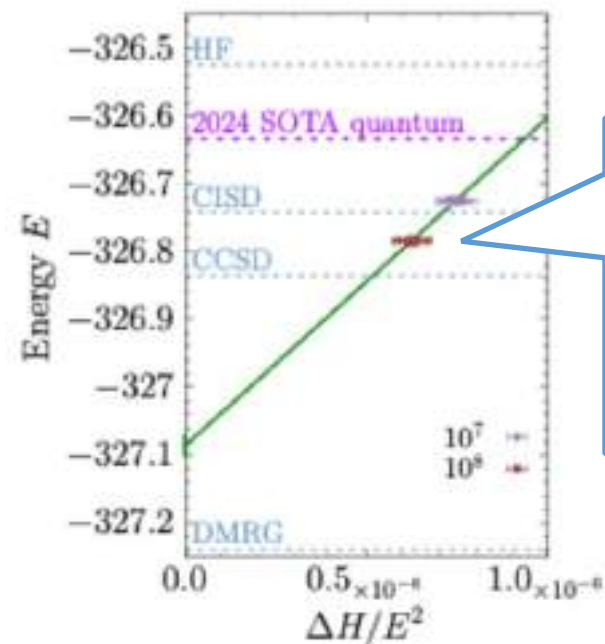
[事業仮説の特定] ソフトバンクAIスパコンを含む、複数スパコンからの利用を実証

- 複数スパコンからの利用について、前倒しで実証実験を実施
- ソフトバンクのAIスパコンを量子HPCプラットフォームを接続し、企業クラウド環境からの利用を進める計画。これにより、採択条件の一つである「実ビジネスにつながる事業仮説の特定」を進める。

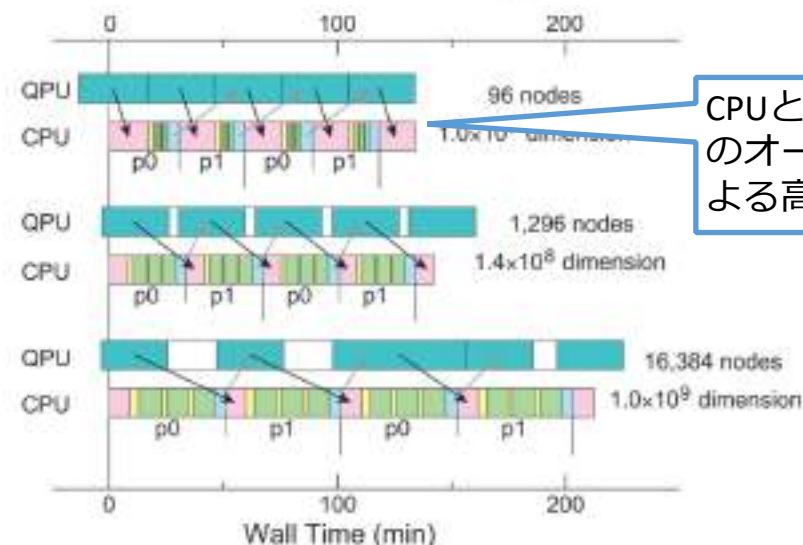
成果：SQD法による基底状態エネルギー計算

<https://arxiv.org/html/2511.00224v1>

- 分子 Fe_4S_4 について基底状態エネルギーをIBMの量子コンピュータHeron (156qbit) と富岳の15万ノードを連携させて、大規模計算を行い、**現時点の量子コンピュータを用いた結果の中で、最低のエネルギーを得た。**
- 対角化のサイズが 10^8 の場合（サンプリング数を多くした場合）は、CISD(CI single and double)法を越えている。このサイズの計算をするために15万ノードの富岳の計算が必要。
- 現在、最も優れている方法として知られているDMRG法（Density Matrix Renormalization Group：密度行列繰り込み群）には満たないが、分子規模を大きくすることが容易である、DMRGで計算できない分子にも適用可能などの利点があることが期待される。
- Fugakuを活用するために、大規模対角化の並列プログラムを開発し、高速化を図った。
- 量子コンピュータとスパコンの密結合(tight integration)による計算の高速化を図った
 - この実験では、富岳の大規模プログラムの中から、直接、量子コンピュータの回路実行要求を呼び出し、量子コンピュータの実行とスパコンの実行をオーバーラップさせ、高速化を行っている。
 - これまでの量子コンピュータの計算では古典側は単一コンピュータがほとんどであり、スパコンを使う場合でも、ワークフローツールによる、別々のプログラムでの実行（疎結合）である。**このような密結合での計算は初めての実験。**



対角化のサイズが 10^8 の場合（サンプリング数を多くした場合）は、CISD(CI single and double)法を越えている



CPUとQPUの計算のオーバーラップによる高速化

- 生体分子系（レチナール）の反応解析を、R-CCSが開発したスパコンでの解析プログラムNTChemと組み合わせて実行した。イオントラップの高忠実性を生かした、End-to-endのスケラブルな化学計算手法の実証実験に取り組んでいる。

生体分子系反応の解析

富岳-黎明 連携プラットフォームの構築とデモンストレーション

- 多くの生体分子反応系は**反応部位** (例: レチナール) と**環境** (例: タンパク) に分けられる
 - 環境**は巨大だが量子性が弱い → HPCによる大規模近似計算が効果的
 - 反応部位**は局所的だが量子性が強い → 量子コンピュータによる精密計算が効果的
- 生体分子系反応はHPC-量子連携プラットフォームの有望なアプリケーション
- 連携プラットフォームの構築と応用を共同で構築
 - “黎明” (全結合20量子ビット) を理研和光キャンパスに設置、2月に運用開始
 - ダイレクトアクセスAPI (qsubmit) の開発と富岳のジョブスケジューラとの融合
 - ワークフローシステム “Tierkreis” を富岳上にデプロイしHPC向けに機能を増強
- 生体分子系反応に関する応用のデモンストレーションを共同で実施
 - 量子化学計算パッケージ “NTChem” によって環境部分を実効的に含む反応部位の計算用インプットを **富岳** 上で計算
 - 得られたインプットを**富岳-黎明** 上に実装されたハイブリッドソルバー (TE-QSCI) を用いて処理
 - 参照値と良い一致を確認 → ハイブリッドシステムの end-to-end での動作を確認

Tierkreis (ワークフローシステム)

レチナールの光異性化

計算方法	全エネルギー / Ha
Hartree-Fock (初期値)	-848.3849
TE-QSCI (計算値)	-848.4312
CASCI (参照値)	-848.4339

[量子優位性] 量子・大規模スパコン連携による量子優位性への挑戦

- IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD (Sample-based quantum diagonalization) 法を開発し、富岳の大規模ノード (15万ノード) とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPCハイブリッドプログラムの実行に成功。
- これまでの量子コンピュータを用いた計算では最も低い (最良) の結果を得ることができた。
- プロジェクト後半 (SG後) の量子優位性の実証に有効な見込みを得た。
- Quantinuumについても量子化学分野のデモアプリの開発・実行を行った。後半での有効性の実証に取り組む

[産業化支援] テストユーザープログラム実施による産業化支援を開始

- テストユーザープログラムを計画より前倒しで実施、現在12プロジェクトを採択。今年度は、21プロジェクト実施
- NEDOチャレンジユーザーを支援

[量子HPCプラットフォーム] 量子スパコン連携アプリを実行するJHPC Quantumプラットフォームを構築、運用開始

- 2種類の量子コンピュータ (IBM超伝導、Quantinuumイオントラップ) をオンプレミスで整備し、スーパーコンピュータ富岳と合わせて量子HPCハイブリッドプログラムを実行するプラットフォームが完成、これから本格運用に移行。ワークフローツールによる疎結合と遠隔手続き呼び出しによる密結合の2つの量子HPCハイブリッドプログラムのプログラミングの方法を確立、提供した。
- 動作の早いIBM超伝導については、同じ建屋で低遅延・高速な通信で、多数の量子回路が実行できるように配慮。(来年度)
- 他の多くのプロジェクトで量子HPCハイブリッドの重要性を指摘しているものの、密結合による大規模HPC環境からの利用をサポートしているシステムはない。

[事業仮説の特定] ソフトバンクAIスパコンを含む、複数スパコンからの利用を実証

- 複数スパコンからの利用について、前倒しで実証実験を実施
- ソフトバンクのAIスパコンを量子HPCプラットフォームを接続し、企業クラウド環境からの利用を進める計画。これにより、採択条件の一つである「実ビジネスにつながる事業仮説の特定」を進める。

- 目的

量子HPC連携プラットフォームの初期ユーザーを発掘し、当該プラットフォームのフィードバックを得るとともに、ユーザーのコミュニティ醸成を図る。

- 広く提案を募集し、NEDOプロジェクトメンバからなる審査委員会で採否を決定

- 主たる募集要項

- 量子HPC連携ソフトウェアを使用すること。すなわち、量子コンピュータおよびスーパーコンピュータを両方有意に使用すること
- 期間は半年程度とすること
- 知財や成果発表に対する考え方への同意

- 実施状況

- プレ公募期 個別打診: 2024年12月～2025年1月 ⇒ 採択3件
- 公募1期: 2025年4月1日～4月30日 ⇒ 採択9件
- 公募2期: 2025年6月16日～7月15日 ⇒ 採択9件

- 次回の公募は、来年度の早い時期を予定



これまで（2025年8月まで）の活動実績

- プレ公募期 個別打診：2024年12月～2025年1月
⇒ 提案5件、採択3件
- TUP公募 1 期：2025年4月1日～4月30日
⇒ 提案12件、採択9件
- TUP第 1 回ハンズオンセミナー：6月19日
- TUP公募2期：2025年6月16日～7月15日
⇒ 提案11件、採択9件
- **公募 1 期の経験をふまえて公募 2 期では、**
 - 量子HPC連携ソフトウェアを使用すること。すわなち、量子コンピュータだけでなくスーパーコンピュータも有意に使用すること
 - 期間は半年程度とすること

を明確にした。すわなち、TUPでは、「これから量子コンピュータをはじめようとする人」ではなく「すでに一定の実績がある研究者」をターゲットにしていることを明確にしたのであり、しかも、期間を半年としているため、提案段階で量子HPC連携についてある程度具体的な構想を持っていることを要請している。
- **新規の公募はせず、採択提案の活動を支援することに注力する。具体的には、連携ソフトウェア等についてのハンズオンセミナーの実施であり、個別相談への対応である。**

企業ユーザーを中心としたテストユーザプログラム拡大による量子有用性へアプローチ

さらに、新たに**TUPプレミアム**を開始する。採択プロジェクトで顕著な結果を示したもののの中から、大規模実験により革新的な成果が期待できると判断したものについて、その実現に向けて物心両面より支援しようというもの。

TUPプレミアム2026年度末選考

富岳全系実験候補 – 数件 富岳中規模実験候補、最大1～2
TUPプレミアム2027年度末選考

富岳全系実験候補 – 数件 富岳中規模実験候補 – 最大1件

ただし、大規模実験には、R-CCSにおける所定の要件を満たす必要があり、NEDOプロジェクト内のみで結論できない。

Stage Gate後の活動予定

- 継続するものとして、公募2期と同様の要件で、
 - 2026年度5月にTUP公募3期
 - 2027年度5月にTUP公募4期
 を実施する。

[量子優位性] 量子・大規模スパコン連携による量子優位性への挑戦

- IBMと協力し、分子の基底状態を求める量子化学分野のアルゴリズムSQD (Sample-based quantum diagonalization) 法を開発し、富岳の大規模ノード (15万ノード) とIBMのHeronプロセッサを密結合し量子HPCハイブリッドプログラムの実行に成功。
- これまでの量子コンピュータを用いた計算では最も低い (最良) の結果を得ることができた。
- プロジェクト後半 (SG後) の量子優位性の実証に有効な見込みを得た。
- Quantinuumについても量子化学分野のデモアプリの開発・実行を行った。後半での有効性の実証に取り組む

[産業化支援] テストユーザープログラム実施による産業化支援を開始

- テストユーザープログラムを計画より前倒しで実施、現在12プロジェクトを採択。今年度は、21プロジェクト実施
- NEDOチャレンジユーザーを支援

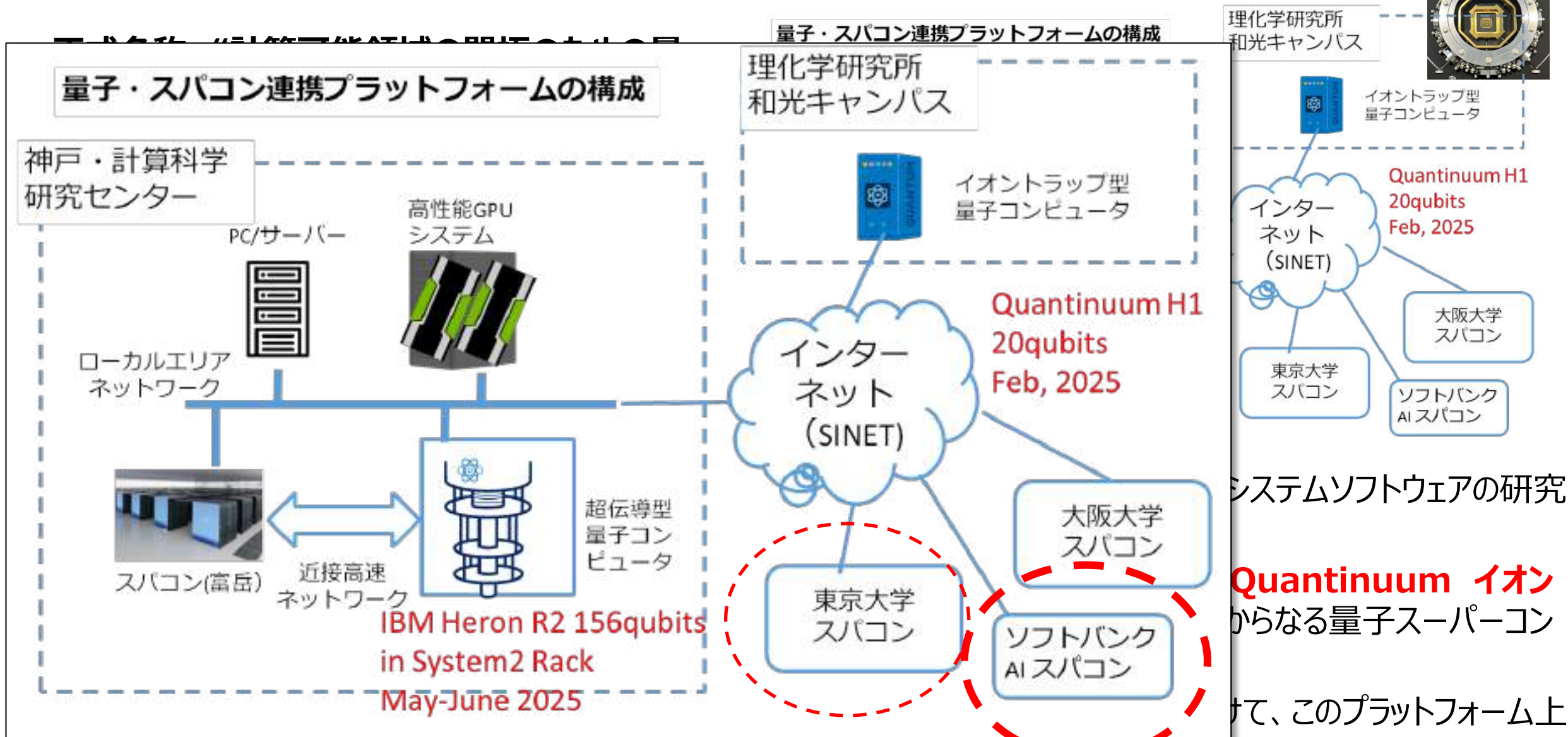
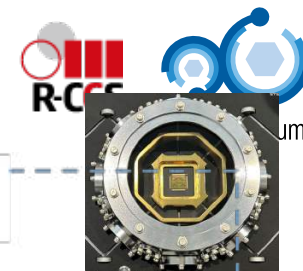
[量子HPCプラットフォーム] 量子スパコン連携アプリを実行するJHPC Quantumプラットフォームを構築、運用開始

- 2種類の量子コンピュータ (IBM超伝導、Quantinuumイオントラップ) をオンプレミスで整備し、スーパーコンピュータ富岳と合わせて量子HPCハイブリッドプログラムを実行するプラットフォームが完成、これから本格運用に移行。ワークフローツールによる疎結合と遠隔手続き呼び出しによる密結合の2つの量子HPCハイブリッドプログラムのプログラミングの方法を確立、提供した。
- 動作の早いIBM超伝導については、同じ建屋で低遅延・高速な通信で、多数の量子回路が実行できるように配慮。(来年度)
- 他の多くのプロジェクトで量子HPCハイブリッドの重要性を指摘しているものの、密結合による大規模HPC環境からの利用をサポートしているシステムはない。

[事業仮説の特定] ソフトバンクAIスパコンを含む、複数スパコンからの利用を実証

- 複数スパコンからの利用について、前倒しで実証実験を実施
- ソフトバンクのAIスパコンを量子HPCプラットフォームを接続し、企業クラウド環境からの利用を進める計画。これにより、採択条件の一つである「実ビジネスにつながる事業仮説の特定」を進める。

JHPC-quantum プロジェクト

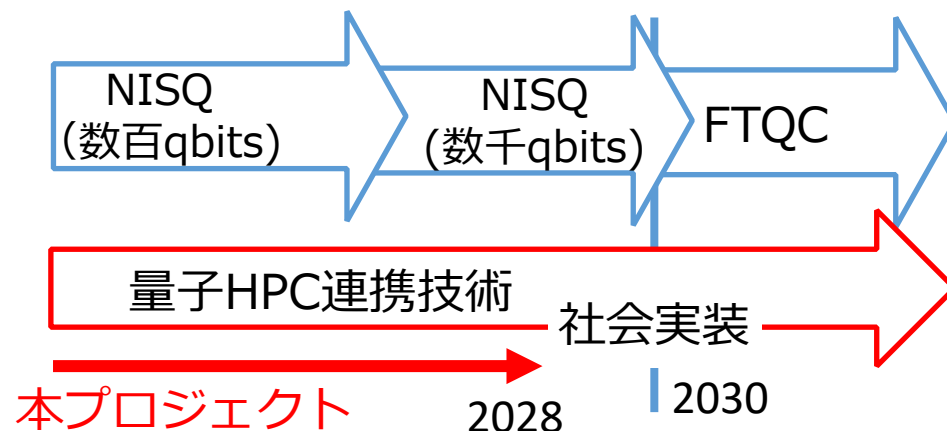


JHPC-quantumプロジェクトのマイルストーン

- 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 2 Q: 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



将来展望として、2030年代に向けて誤り訂正機能を持つ、FTQC（Fault-Tolerant Quantum Computer）の実用化が期待されているが、FTQCにおいてもスパコンとの連携は重要であり、しばらくはNISQを最大限活用し、社会実装に向け実用アプリを開発、実用的なアプリの開発経験を積み、FTQCを活用できるアプリにつなげる



現在、量子スパコンハイブリッドに期待される問題の解決や社会実装が期待される分野・アプリ開発

材料化学



日本が得意とする材料開発・製造の分野で、より研究開発が加速される。有機ELや次世代大容量蓄電池、有機系高効率次世代太陽電池の素材解析などの材料開発

中間目標である水素基底状態の解析を超える成果として、窒素分子の三重結合の切断、鉄硫黄クラスターの電子状態などの解明に成功。触媒反応の最適化や化学反応プロセスの効率化が見込める

創薬医療



生体分子における創薬に関する量子性の強い部分を量子コンピュータでシミュレーションし、新規創薬への貢献。ゲノムや創薬ためのオミックスデータ、医療画像等における量子機械学習の活用

製造流通



量子コンピュータによる最適化・量子機械学習により、効率的な工程プロセスの運営、資源の最適配置等

金融経済



量子機械学習による不正使用の抑制、検出あるいは防止

～複数スパコン・クラウド・量子コンピュータを相互利用するマルチプラットフォーム～

JHPC Quantum システムソフトウェアを用いて、複数の量子コンピュータを複数スパコン、複数クラウドから相互利用可能になる。スパコン、クラウドから企業ユーザー、アカデミアに整備された量子コンピュータを利用可能にし、量子HPC技術をいち早く利用、我が国の競争力強化に貢献する。

- アカデミアを中心としたユーザーについては、HPCI基盤の大学スパコンセンタから、量子コンピュータを利用して、量子HPC連携アプリケーションを実行可能に。
- スパコン並みの計算能力を持つクラウドベンダーが量子コンピュータを接続して商用量子HPCハイブリッド計算サービスを展開

