

令和 5 年 6 月 15 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19H01095

研究課題名(和文)量子アニーリングが拓く高性能マテリアルインフォマティクス基盤の新展開

研究課題名(英文)Quantum-Annealing Assisted Innovative Material Informatics Infrastructure

研究代表者

小林 広明 (Kobayashi, Hiroaki)

東北大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：40205480

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 38,840,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、従来の高性能計算技術とポストムーア時代の情報処理技術として期待されている量子コンピューティング技術を融合した次世代高性能計算基盤を構築した。さらに、本計算基盤を活用して、計算科学とデータ科学の融合による高性能・高機能高分子材料設計開発基盤を実現した。本高性能・高機能高分子材料設計基盤により従来の計算技術では実現不可能な規模と精度の物性の解明が可能になった。さらに量子アニーリング技術を活用した高性能・高品質クラスタリング技術を確立したことにより、従来の方法では見いだせない新規材料候補を開拓できる可能性を示すことができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果は、ムーアの法則の終焉が叫ばれる中、従来の高性能計算技術の高性能化の限界を新たな情報処理技術として期待されている量子アニーリングで突破し、ポストムーア時代の新たな高性能計算基盤のあり方を示すものであり、学術的意義が高い。また本計算基盤を高分子材料設計に応用し、その有用性を実用的な高分子材料設計で明らかにしたことの社会的意義も高い。

研究成果の概要(英文)：In this research, we have developed a next-generation high-performance computing infrastructure that integrates conventional high-performance computing technology with quantum computing technology, which is expected to become the information processing technology of the post-Moore era. Furthermore, by utilizing this computational infrastructure, we realized a high-performance polymer material design and development platform by integrating computational science and data science. This high-performance polymer material design platform has made it possible to clarify the physical properties of polymer materials on a scale and with a precision that cannot be achieved with conventional computational techniques. Furthermore, the establishment of a high-performance, high-quality clustering technique using quantum annealing technology has demonstrated the possibility of developing new material candidates that cannot be found by conventional methods.

研究分野：高性能計算・量子計算

キーワード：高性能計算 量子アニーリング クラスタリング 高分子材料設計

## 1. 研究開始当初の背景

「ムーアの法則の終焉」を見据えて、「ポストムーア時代の新しい情報処理機構」の研究開発が盛んに行われてきている。特に近年注目を集めている情報処理機構として量子コンピュータがあるが、その中で組合せ最適化問題に対象を絞って原理を具現化し、商用化に成功した量子アニーリングマシンは、量子効果(重ね合わせの原理)を利用して一気に組み合わせ問題の最適解を導出できる可能性があることから、組合せ対象数に応じて指数関数的処理能力の向上が期待されている。しかしながら現状の量子アニーリングマシンは組み合わせ最適化問題に特化した専用処理装置であり、組合せ最適化問題は多くの社会問題の解決に必要な不可欠とはいえ、実用アプリケーションの開発には組合せ最適問題の入力、あるいはその出力を入力とする従来型のシミュレーション技術等との密接な連携を実現する新しい量子コンピューティング統合型情報処理機構・プログラミング技術の確立が求められている。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、1) データ科学と計算科学の両面で有効なベクトル処理の高効率実行を目指した高分子材料シミュレーション向け高性能計算技術の確立、2) 新興の量子アニーリング技術と従来の高性能計算技術を統合してポストムーア時代に突入してもサステナブルな新たな情報処理基盤の確立、3) 量子アニーリングを活用した新世代高分子材料設計基盤の確立である。

## 3. 研究の方法

本研究では、高分子材料設計サブグループと高性能情報処理基盤グループを構成し、前者は高分子材料マルチスケールシミュレータの高機能化と高精度化に取り組む。さらに実験とシミュレーションで得られたデータを元に、材料とその機能を関係つけるデータを構築し、クラスタリングによりその関係性を明らかにし、高機能材料候補の検出を行う。後者は、高性能計算技術としてベクトル型アーキテクチャに着目し、高分子材料マルチスケールシミュレータの高速化と大規模化に取り組む。また、量子アニーリングによる最適化ライブラリの構築を行い、併せて量子アニーリングを用いて、高機能材料候補抽出のための高性能・高速量子クラスタリングアルゴリズムを実現する。

## 4. 研究成果

まず、計算科学とデータ科学の融合による新たな高分子材料設計シミュレーション技術構築を目指し、研究開発を行った。主たる技術開発要素は以下の2点、1) 高分子材料の硬化反応に伴う架橋ネットワーク形成に関するマルチスケール粒子動力学シミュレーション技術開発、2) 自己組織化マップ(SOM)/ベイズ推定を連携した機械学習による新規材料探索手法の開発、である。

エポキシ樹脂に代表される架橋高分子材料(熱硬化性高分子)は、主剤と硬化剤の架橋反応によって合成される。また、改質剤・添加剤となる他の高分子をブレンドすることで、内部のメゾスケールの不均一構造を制御し、種々の機能性を付与し、各種性質を向上させることが行われる。そのため、架橋反応を取り扱えるような反応モデルを組み合わせた全原子分子動力学(MD)計算手法に加えて、より大きなスケールの現象が取り扱えるように、同様の反応モデルを粗視化粒子スケールの計算手法である散逸粒子動力学(DPD)法に組み合わ

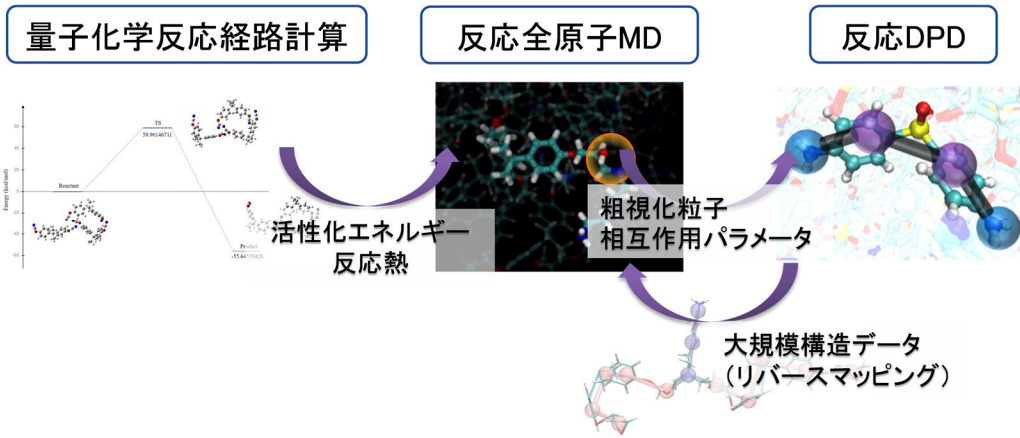


図 1 架橋反応をモデル化した QC/MD/DPD 連携シミュレーションツールの概略図

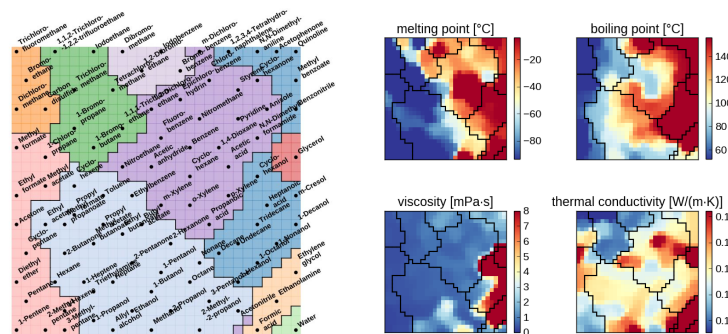


図 2 SOM の材料グルーピング (左図) および SOM 上に展開された各種物性マップ (右図)

せた反応 DPD シミュレーションを構築した。これによって、全原子スケールのみならず粗視化スケールでの硬化反応計算が実現し、計算時間の大幅な短縮に成功した (図 1)。この方法では、量子化学反応経路計算によって得られた正確な活性化エネルギーや反応熱を MD および DPD の反応モデルに組み込む。また、全原子 MD 計算から DPD 粒子間の相互作用をボトムアップで決定する手法を構築し、逆に反応 DPD 計算によって得られた構造を基に全原子 MD モデルを復元するリバースマッピングの実装を行った。結果として、全原子スケールにおいては、反応 MD 計算手法による種々の架橋高分子材料の熱機械特性は、実験結果とよく整合することを示した。また、粗視化粒子スケールにおいて、反応 DPD 計算による硬化特性は、全原子反応 MD 計算とよく整合し、DPD 計算結果からリバースマッピングによって復元した全原子モデルにおいて、機械特性や構造が全原子 MD 計算のみで得られる結果とよく一致することを確かめた。さらに、熱硬化性/熱可塑性高分子ブレンドのような大規模相分離不均一系にも適用可能となった。以上のように、原子・分子から粗視化スケールを繋ぐ精緻なマルチスケールシミュレーション技術の開発に成功した。

次に、高効率な材料探索手法の構築を目指し、高分子材料の各種物性を入力データとする SOM 解析コードの開発を行った (図 2)。SOM (Self-Organizing Map、自己組織化マップ) はフィードフォワード型のニューラルネットワークを基にする次元削減技術である。入力データ間の“距離”を反映しながら、2次元マップに写像する。そのため、SOM によって各材料種・各種物性間の相関関係やトレードオフ関係が 2次元マップ上で可視化され、所望の物性を有する材料のターゲットエリアを容易に抽出することができる。この手法を、有機液体材料や難燃性多成分エポキシ樹脂に適用し、従前の性能を上回る新たな樹脂種の開発に成功

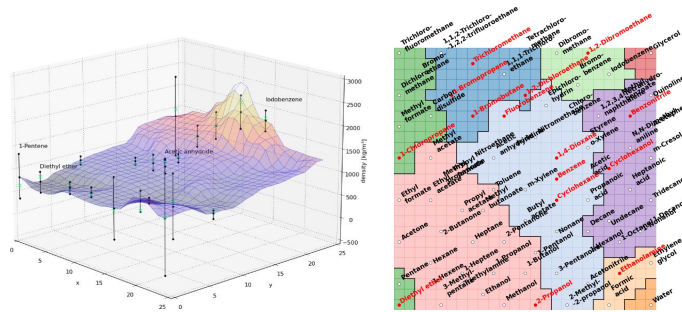


図3 予測した欠損データ（左図）をSOM上に再マップ（右図）

した．さらに，SOM 解析の結果を学習データとして活用可能なベイズ推定（ガウス過程回帰，GPR）の予測技術を構築し，欠損した材料の物性や新規材料の物性を予測する技術（図3）を実現した．予測精度を検証したところ，少ないデータ数でも誤差 10%程度での物性予測に成功した．また，GPR については，python 言語のパッケージである PyTorch および scikit-learn を利用し大幅な高速化を行ったため，今後材料探索ループにおける効率化の鍵となる物性予測の高速化に寄与するものと考えられる．

表 1 プログラム実行情報

高分子材料シミュレーションにおいて多数原子の大規模シミュレーションを実現するため、ベクトル型スーパーコンピュータ SX-Aurora TSUBASA を用いてシミュレーションの高速化研究を実施した。対象としたプログラムは分子動力学シミュレーション（Peachgk\_md）である。

プログラム実行情報	数値
性能値 (Mflop/s)	258.7
ベクトル演算率 (%)	59.7
平均ベクトル長	16.4

Peachgk\_md を SX-Aurora TSUBASA で実行した時の初期性能を表 1 に示す。性能値は 258.7 Mflop/s と低いものであった。その原因は、表中のベクトル演算率 59.7%と平均ベクトル長 16.4 から Peachgk\_md がベクトル化されていなく、ベクトルプロセッサの性能を十分に引き出していないことであった。そこで、ベクトル化できていないルーチンやベクトル処理の効率が悪くルーチンに対して、どのようにベクトル化または最適化を行うかを検討し、以下の対応を行った。

- ・ Ewald 法の処理にループ分割法を適応
- ・ リスト形式の DO ループに対してブロッキングによる止まり木法の適応
- ・ FFT 処理を一次元 FFT から一次元多重 FFT へ変更
- ・ 複数の DO ループをインライン展開

表 2 が上記最適化後のプログラム実行情報である。ベクトル演算率が 98.8%、平均ベクトル長が 178.4 となり、性能値が 12,414.1Mflop/s と大幅に向上している。

次に並列化の検討を行った。Peachgk\_md はプログラムの実装方法から並列数 50 が上限になっており、大規模シミュレーション実現の妨げとなっていた。そこで、並列数の拡大手法の検討を行い、領域分割法を用いることで並列数が拡大できることが判明し、その実装を行った。

表 2 最適化後のプログラム実行情報

プログラム実行情報	数値
性能値 (Mflop/s)	12414.1
ベクトル演算率 (%)	98.8
平均ベクトル長	178.4

この実装においてメモリ使用量を削減できることも判明し、メモリ使用量の削減も行った。表 3 が 64 並列での実行時間とメモリ使用量である。メモリ容量を約 1/4 とし、より大規模なシミュレーションが実現可能となった。

表 3 64 並列での実行時間とメモリ容量

64並列実行	実行時間 (秒)	メモリ使用量 (GB)
メモリ削減前	15.4	1.12
メモリ削減後	13.1	0.26

表 4 プリ処理の実行時間

	実行時間 (秒)
最適化前	4087.6
最適化後	91.7

Peachgk\_md はクーロン力の計算において、相互に影響する粒子ペアを入力データとするため、Peachgk\_md を実行する前にその粒子ペアを作成するプリ処理を実行している。このプリ処理がシミュレーションの大規模化に伴って実行時間が増加し、

Peachgk\_md より実行時間が長くなることが判明した。そこで、このプリ処理の高速化も実施した。高速化としては粒子ペアを作るアルゴリズムを見直し、union-find と呼ばれるデータ構造を適用し、かつプログラム言語 cython を用いることで、表 4 のように実行時間を 1/44 に短縮することにも成功した。

以上の取り組みにより、高分子材料シミュレーションである分子動力学シミュレーション Peachgk\_md の高速化とメモリ削減を実施し、より大規模なシミュレーションを実行できるようになった。

量子アニーリングに関する研究では、材料候補物資等の探索手法を開発するべくブラックボックス最適化の性能評価を主に行ってきた。ブラックボックス最適化では、毎回量子アニーリング等により低いエネルギーを生み出した結果を採用して、線形回帰を実行して実行的なコスト関数を推定するが、様々な条件のもと性能評価を行った結果、さまざまなエネルギーを持つ結果をサンプリングした方が良いことが判明した。それは一様分布からのサンプリングではなく、高温のシミュレートドアニーリング等の結果から出力されたデータを用いると良いという極めて非自明な結果を導いた。

アニーリングマシンと高性能計算システムの連携による非階層型クラスタリング手法の開発では、クラスタリング条件を定義する制約項を QUBO とは別に定義するアニーリングベースのクラスタリングを、量子アニーリングマシンやデジタルアニーリングマシンを対象に、QUBO 生成などの前処理および、データ集計の後処理などに従来の高性能計算システムを活用する手法を開発した。本手法により、従来の手法ではビット精度不足によりクラスタリングが困難なデータ数が大きい場合においても、クラスタリングが実現できることを明らかにした。また精度を比べると、開発したクラスタリングが 38%もの低い Cost 値(同一クラスタ内距離総和を全てのクラスタで足し合わせた値)を達成しており(図 4)、従来の k-means より高い品質で可視化できていることが明らかになった(図 5)。

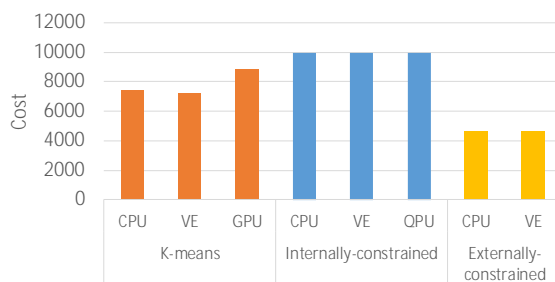


図 4 クラスタ内距離総和(Cost)の比較

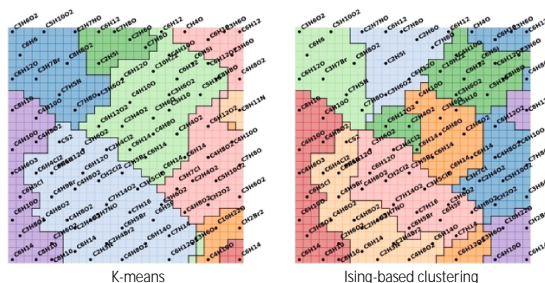


図 5 材料のクラスタリング結果

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計20件（うち査読付論文 20件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 16件）

1. 著者名 Nobuyuki Odagiri, Keiichi Shirasu, Yoshiaki Kawagoe, Gota Kikugawa, Yutaka Oya, Naoki Kishimoto, Fumio S. Ohuchi, Tomonaga Okabe	4. 巻 138
2. 論文標題 Amine/epoxy stoichiometric ratio dependence of crosslinked structure and ductility in amine cured epoxy thermosetting resins	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Polymer Science	6. 最初と最後の頁 1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/app.50542	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yutaka Oya, Masahiro Nakazawa, Keiichi Shirasu, Yuki Hino, Kyosuke Inuyama, Gota Kikugawa, Jing Li, Riichi Kuwahara, Naoki Kishimoto, Hiroki Waizumi, Masaaki Nishikawa, Anthony Waas, Nobuyuki Odagiri, Andrew Koyanagi, Marco Salviato, Tomonaga Okabe	4. 巻 762
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation of cross-linking processes and material properties for epoxy resins using first-principle calculation combined with global reaction route mapping algorithms	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2020.138104	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masahito Kumagai, Kazuhiko Komatsu, Fumiyo Takano, Takuya Araki, Masayuki Sato, and Hiroaki Kobayashi	4. 巻 -
2. 論文標題 Combinatorial Clustering based on an Externally-defined One-hot Constraint	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of The Eighth International Symposium on Computing and Networking	6. 最初と最後の頁 59-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/CANDAR51075.2020.00015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okuyama Manaka, Ohzeki Masayuki	4. 巻 89
2. 論文標題 Inequality for Local Energy of Ising Model with Quenched Randomness and Its Application	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064704 ~ 064704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.064704	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Bando Yuki, Susa Yuki, Oshiyama Hiroki, Shibata Naokazu, Ohzeki Masayuki, Gomez-Ruiz Fernando Javier, Lidar Daniel A., Suzuki Sei, del Campo Adolfo, Nishimori Hidetoshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Probing the universality of topological defect formation in a quantum annealer: Kibble-Zurek mechanism and beyond	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 1-20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.033369	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Masayuki Ohzeki	4. 巻 10
2. 論文標題 Breaking limitation of quantum annealer in solving optimization problems under constraints	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-60022-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Maina Sogabe, Masayuki Ohzeki, Koji Fujimoto, Atsuko Sehara Fujisawa, Satoshi Nishimura	4. 巻 13
2. 論文標題 Restored interlaced volumetric imaging increases image quality and scanning speed during intravital imaging in living mice	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Biophotonics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jbio.201960204	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masayuki Yamamoto, Masayuki Ohzeki, Kazuyuki Tanaka	4. 巻 89
2. 論文標題 Fair Sampling by Simulated Annealing on Quantum Annealer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.025002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Junya Otsuki, Masayuki Ohzeki, Hiroshi Shinaoka, Kazuyoshi Yoshimi	4. 巻 89
2. 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kazuyuki Tanaka, Masayuki Ohzeki, Muneki Yasuda	4. 巻 13
2. 論文標題 Sublinear Computational Time Modeling by Momentum-Space Renormalization Group Theory in Statistical Machine Learning Procedures	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Review of Socionetwork Strategies	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s12626-019-00053-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Shinichiro Taguchi	4. 巻 9
2. 論文標題 Efficient partition of integer optimization problems with one-hot encoding	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-49539-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masayuki Ohzeki	4. 巻 88
2. 論文標題 Message-passing Algorithm of Quantum Annealing with Nonstoquastic Hamiltonian	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.061005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -



1. 著者名 Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi	4. 巻 9
2. 論文標題 Improving solutions by embedding larger subproblems in a D-Wave quantum annealer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-018-38388-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masayuki Ohzeki, Akira Miki, Masamichi J. Miyama and Masayoshi Terabe	4. 巻 1
2. 論文標題 Control of automated guided vehicles without collision by quantum annealer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Front. Comput. Sci.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fcomp.2019.00009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naoki Nishimura, Kotaro Tanahashi, Koji Sugauma, Masamichi J. Miyama and Masayuki Ohzeki	4. 巻 1
2. 論文標題 Item Listing Optimization for E-Commerce Websites Based on Diversity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 <a href="https://doi.org/10.3389/fcomp.2019.00002">https://doi.org/10.3389/fcomp.2019.00002</a>	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fcomp.2019.00002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhao Yinbo, Kikugawa Gota, Kawagoe Yoshiaki, Shirasu Keiichi, Okabe Tomonaga	4. 巻 198
2. 論文標題 Molecular-scale investigation on relationship between thermal conductivity and the structure of crosslinked epoxy resin	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 123429 ~ 123429
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123429	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Masahito, Komatsu Kazuhiko, Sato Masayuki, Kobayashi Hiroaki	4. 巻 16
2. 論文標題 Ising-Based Kernel Clustering	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Algorithms	6. 最初と最後の頁 214 ~ 214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/a16040214	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hikaru Takayashiki, Masayuki Sato, Kazuhiko Komatsu, Hiroaki Kobayashi	4. 巻 -
2. 論文標題 Page-Address Coalescing of Vector Gather Instructions for Efficient Address Translation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Proceedings of 2022 IEEE/ACM 12th Workshop on Irregular Applications: Architectures and Algorithms (IA3)	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Haba Renichiro, Ohzeki Masayuki, Tanaka Kazuyuki	4. 巻 12
2. 論文標題 Travel time optimization on multi-AGV routing by reverse annealing	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-22704-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okuyama Manaka, Ohki Kentaro, Ohzeki Masayuki	4. 巻 381
2. 論文標題 Threshold theorem in isolated quantum dynamics with stochastic control errors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1098/rsta.2021.0412	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計49件（うち招待講演 16件 / うち国際学会 36件）

1. 発表者名 川越吉晃, 菊川豪太, 岡部朋永
2. 発表標題 量子化学反応経路計算と散逸粒子動力学法を用いた熱硬化性樹脂の架橋形成モデリング
3. 学会等名 第12回日本複合材料会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Zhao Yinbo, 菊川 豪太, 岸本 直樹, 川越 吉晃, 白須 圭一, 岡部 朋永
2. 発表標題 量子化学反応経路計算と分子動力学シミュレーションによる多成分系エポキシ樹脂の熱機械特性の解析
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 菊川 豪太, 国枝 宏之, ZHAO Yinbo, 大矢 豊大, 岡部 朋永
2. 発表標題 エポキシ架橋高分子材料の熱機械特性に関する反応分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第57回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshiaki Abe, Freddie D. Witherden, Kazuhiko Komatsu, Brian C. Vermeire, Peter E. Vincent, Kozo Fujii
2. 発表標題 High-fidelity Flow Simulation around a Low-pressure Turbine Blade and Cross-platform Implementation with PyFR
3. 学会等名 17th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshiaki Abe
2. 発表標題 Simulations of Flow over Low-Pressure Turbine Blades with PyFR,
3. 学会等名 PyFR Symposium 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shunsuke TsukadaMasayuki SatoKazuhiko KomatsuHiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Metadata Management for Large-Scale Hybrid Memory Architectures
3. 学会等名 ISC High Performance (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 塚田 俊介, 佐藤 雅之, 高屋敷 光, 小松 一彦, 小林 広明
2. 発表標題 複合型メインメモリのメタデータ管理のためのデータアクセス解析
3. 学会等名 並列/分散/協調処理に関する「福井」サマー・ワークショップ(SWoPP2020)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Performance Evaluation of SX-Aurora TSUBASA and Its Quantum Annealing-Assisted Application Design
3. 学会等名 Russian Supercomputing days 2020, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masahito Kumagai, Kazuhiko Komatsu, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 An Evaluation of a Hierarchical Clustering Method Using Quantum Annealing
3. 学会等名 ISC High Performance
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小林広明
2. 発表標題 高性能計算基盤の開発とそのデータ科学・計算科学融合型キラーアプリ
3. 学会等名 東北大学知のフォーラム: 実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 The New Era of Hybrid-Computing on and with SX-Aurora TSUBASA: Vector-Scalar to Vector-Digital Annealing, to Vector-Quantum Annealing
3. 学会等名 31st Workshop on Sustained Simulation Performance (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Gota Kikugawa
2. 発表標題 Full atomistic molecular dynamics and DPD integrated simulations with reaction model for advanced design of thermosetting polymeric materials
3. 学会等名 International Workshop on applications of Materials Integration for CFRP (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshiaki Abe, Tomonaga Okabe
2. 発表標題 Interaction Between Fibers and Viscous Flow Evaluated by Simplified Bead-Chain Model and Generalized SPH
3. 学会等名 72nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Breaking limitation of quantum annealer in solving optimization problem under constraints
3. 学会等名 Adiabatic Quantum Computing Conference 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masamichi J. Miyama, Ami S. Koshikawa and Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 T-QARD Update: Recent activities and some new algorithms
3. 学会等名 Qubits North America 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 量子アニーリングが示す情報科学の未来 (量子退火所代表的資訊科學的未來)
3. 学会等名 2019台日科学技術フォーラム(2019台日科技高峰論壇-數位創新與智慧製造) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum annealing and its application -new generation of natural computing
3. 学会等名 The IEEE International 3D Systems Integration Conference (3DIC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum annealing and its application to deep learning - new direction of quantum annealing -
3. 学会等名 Deep Learning and physics 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum annealing and machine learning - new directions of quantum
3. 学会等名 IPAM Workshop IV: Using Physical Insights for Machine Learning (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum annealing and its practical applications
3. 学会等名 17th RIEC International Workshop on Spintronics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum Annealing and Machine Learning-new directions of Quantum Annealing-
3. 学会等名 Indo Japan Joint Workshop on Quantum Computation & Information ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Breaking limit of quantum annealer by statistical mechanics
3. 学会等名 Meeting on Quantum Annealing of the LHZ Architecture and Related Topics ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kou Murakami, Kazuhiko Komatsu, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Performance evaluation of a clustering approach based on thermophysical properties by using multiple platform
3. 学会等名 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia) ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masahito Kumagai, Kazuhiko Komatsu, Masayuki Sato, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 An Evaluation of a Hierarchical Clustering Method Using Quantum Annealing
3. 学会等名 ISC2020 ( 国際学会 )
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 村上 洸, 佐藤 雅之, 小松 一彦, 小林 広明
2. 発表標題 ベクトルコンピュータを用いた機械学習の高速化に関する研究
3. 学会等名 電気関係学会東北支部連合大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 熊谷 政仁, 小松 一彦, 佐藤 雅之, 小林 広明
2. 発表標題 量子アニーリングを用いたクラスタリング手法の評価
3. 学会等名 2020年電子情報通信学会総合大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 QA-Assisted Next Generation HPC Infrastructure for Computational Science, Data Science and their Integrated Applications
3. 学会等名 Russian Supercomputing Days 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Quantum-Annealing Assisted Next-Generation HPC for Inductive and Deductive Computing Integrated Applications
3. 学会等名 30th Workshop on Sustained Simulation Performance (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 李 楷文, 菊川 豪太, 川越 吉晃, Zhao Yinbo, 岡部 朋永
2. 発表標題 架橋高分子材料の反応DPDシミュレーションにおける相互作用パラメータのボトムアップ探索
3. 学会等名 第59回日本伝熱シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kaiwen Li, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Yinbo Zhao, Tomonaga Okabe
2. 発表標題 Bottom-up exploration of interaction parameters in reactive DPD simulation for epoxy polymers
3. 学会等名 The 13th Asian Thermophysical Properties Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yinbo Zhao, Gota Kikugawa, Yoshiaki Kawagoe, Keiichi Shirasu, Tomonaga Okabe
2. 発表標題 Unveiling the relationship between thermal conductivity and the structure of crosslinked epoxy resin
3. 学会等名 The 13th Asian Thermophysical Properties Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshiaki Abe
2. 発表標題 Aerodynamic and Structural Simulations for Aircraft Design
3. 学会等名 Aerospace Practitioner and Professional Engineer Lecture Series (APPELS), Department of Aerospace Engineering, Texas A&M University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Various practical applications of quantum annealing
3. 学会等名 TSRC Workshop Scientific Applications of Quantum Annealers (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum annealing and its applications to real world-Solutions and Education
3. 学会等名 2022 Japan-Taiwan Advanced Quantum Technology Research and Development Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大関 真之
2. 発表標題 量子アニーリングとその教育プログラムへの可能性
3. 学会等名 第1回 国際シンポジウム：メタバース・XR技術の教育利用と国際協創 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum Technology Innovation hub: Tohoku University
3. 学会等名 Qubits: Complexity to Clarity (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masayuki Ohzeki
2. 発表標題 Quantum Superposition and Education
3. 学会等名 Symposium on Quantum-annealing Based HPC   Tohoku Forum for Creativity (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 R&D of a Quantum-Classical HPC Hybrid Platform and its Target Applications with QA-Based Simulation-Data Analysis Hybrid
3. 学会等名 HPC2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Reaggregation of Disaggregation: A Smart Approach to the Optimized Architecture and Platform Design
3. 学会等名 33rd Workshop on Sustained Simulation Performance (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林広明
2. 発表標題 量子アニーリングアシスト型次世代スーパーコンピューティング基盤とその応用に関する研究開発
3. 学会等名 量子コンピュータ未来構想フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kaho Aoyama, Kazuhiko Komatsu, Masahito Kumagai, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Analysis of Precision Vectors for Ising-based Linear Regression
3. 学会等名 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT '22), (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masayuki Sato, Yuya Omori, Ryusuke Egawa, Ken Nakamura, Daisuke Kobayashi, Hiroe Iwasaki, Kazuhiko Komatsu, Hiroaki Kobayashi,
2. 発表標題 A Partitioned Memory Architecture with Prefetching for Efficient Video Encoders
3. 学会等名 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT '22) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hikaru Takayashiki, Masayuki Sato, Kazuhiko Komatsu, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Page-Address Coalescing of Vector Gather Instructions for Efficient Address Translation
3. 学会等名 2022 IEEE/ACM 12th Workshop on Irregular Applications: Architectures and Algorithms (IA3) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ilya Afanasyev, Kazuhiko Komatsu, Dmitry Lichmanov, Vadim Voevodin, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 High-Performance GraphBLAS Backend Prototype for NEC SX-Aurora TSUBASA
3. 学会等名 2022 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Issei Fukamizu, Kazuhiko Komatsu, Masahito Kumagai, Hironori Miyazawa, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Prediction of turbine blade condition using supervised machine learning trained by digital-twin simulation
3. 学会等名 International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ken Nakamura, Yuya Omori, Daisuke Kobayashi, Koyo Nitta, Kimikazu Sano, Masayuki Sato, Hiroe Iwasaki, and Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 An Efficient Reference Image Sharing Method for the Parallel Video Encoding Architecture
3. 学会等名 IEEE Symposium in Low-Power and High-Speed Chips (COOL Chips), (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshiaki Kondo, Masayuki Sato, Ken Nakamura, Yuya Omori, Daisuke Kobayashi, Hiroe Iwasaki, Ryusuke Egawa, Kazuhiko Komatsu, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 A Shared Cache Architecture for VVC Coding
3. 学会等名 2022 IEEE Symposium in Low-Power and High-Speed Chips (COOL CHIPS) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahito Kumagai, Yoshihisa Yamamoto, Yoshitaka Inui, Satoshi Kako, Kazuhiko Komatsu, Hiroaki Kobayashi
2. 発表標題 Squeezed-Quantum-Noise-Assisted Optimization for Quadratic Binary Problems by CIM-CAC
3. 学会等名 Coherent Network Computing 2022 (CNC2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林広明
2. 発表標題 HPC-AI-QCの融合: 量子アニーリングアシスト型次世代スーパーコンピューティング基盤とハイブリッドコンピューティングに関する研究開発
3. 学会等名 Supercomputing Now (招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Resch, M., Wossough, M., Bez, W., Focht, E., Kobayashi, H.	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Springer Nature Switzerland AG	5. 総ページ数 234
3. 書名 Sustained Simulation Performance 2018 and 2019	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	岡部 朋永 (Okabe Tomonaga)  (50344164)	東北大学・工学研究科・教授  (11301)	
研究分担者	大関 真之 (Ohzeki Masayuki)  (80447549)	東北大学・情報科学研究科・教授  (11301)	
研究分担者	撫佐 昭裕 (Musa Akihiro)  (40639655)	東北大学・サイバーサイエンスセンター・客員教授  (11301)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	菊川 豪太  (Kikugawa Gota)  (90435644)	東北大学・流体科学研究所・准教授    (11301)	
研究分担者	小松 一彦  (Komatsu Kazuhiko)  (50813888)	東北大学・サイバーサイエンスセンター・准教授    (11301)	
研究分担者	佐藤 雅之  (Sato Masayuki)  (50781308)	東北大学・情報科学研究科・准教授    (11301)	
研究分担者	阿部 圭晃  (Aber Yoshiaki)  (40785010)	東北大学・流体科学研究所・助教    (11301)	
研究分担者	観山 正道  (Miyama Masamichi)  (60639095)	東北大学・情報科学研究科・特任助教    (11301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関