

# HPCI計画推進委員会

資料4-2

## 新計算原理調査研究チーム

2023年12月18日

慶應義塾大学 天野英晴

富士通株式会社 近藤正雄

理研RQC 柚木清司

理研R-CCS 佐藤三久

九州大学 谷本輝夫

東北大学 小松一彦

日本電気株式会社 百瀬真太郎

# 次世代計算基盤に係る調査研究 全体概要

- ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の開発にあたり、我が国として独自に開発・維持すべき技術を特定しつつ、要素技術の研究開発等を実施し、具体的な性能・機能等について検討を行う。
- システム、新計算原理、運用技術を対象に調査研究を実施。サイエンス・産業・社会のニーズを明確化し、それを実現可能なシステム等の選択肢を提案する。

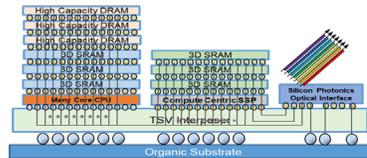
**システムチーム** 次世代計算基盤として想定されるアーキテクチャ（プロセッサ、メモリ、ストレージ等）、システムソフトウェア、アプリケーションを提案

**代表機関：理化学研究所（近藤 正章）**

国内外のベンダーを含めたオールジャパン体制のもと、高度なデジタルツイン実現の基盤として、電力制約の下で大規模なデータの移動を高度化・効率化するシステム構築を目指す。

(例)

- ・システム全体や構成要素について技術的可能性や総合性能の調査（3D積層メモリ、チップ間光通信等）
- ・国内で開発すべきソフトウェアを明らかにしつつ、今後の開発ロードマップを策定
- ・アプリ分野において、ポスト富岳時代に必要とされる計算機資源の調査、ベンチマーク構築 等



**代表機関：神戸大学（牧野 淳一郎）**

世界最高の電力当たり性能を実現している国産アクセラレータ技術、AI応用技術を活用し、従来分野の計算性能とAI利用の両方において高い実行効率を実現できるシステム構築を目指す。

(例)

- ・神戸大学・PFNが開発するMN-Core Xとそれに適合したCPUによる省電力化、効率改善
- ・ソフトウェア制御による実行効率の高度化、高効率コードの自動生成の実現
- ・商用を含めたアプリ性能の調査 等

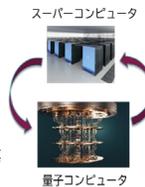


**新計算原理チーム 代表機関：慶應義塾大学（天野 英晴）**

量子コンピューティング（ゲート型、アニーラ型）とスーパーコンピューティングの融合計算を行うための「量子スーパーコンピューティング」の実現可能性を評価する。

(例)

- ・量子コンピュータの現状調査
- ・スパコンを用いた量子コンピュータのシミュレーション
- ・量子アルゴリズムとスパコンとの融合
- ・量子/疑似量子アニーリングマシンと高性能計算との連携に関する調査 等



**運用技術チーム 代表機関：東京大学（埴 敏博）**

大学情報基盤センターが多数参画した体制のもと、フラッグシップ、HPCI第二階層システム群や、mdxなどの多様なシステムが有機的に結合し、持続可能な次世代計算基盤の実現に向け、運用関連技術を調査する。

(例)

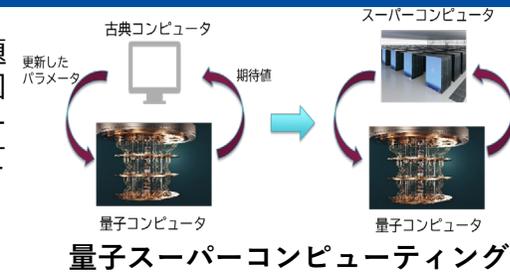
- ・複数のスパコン間のデータ連携、クラウド連携、セキュリティ等の連携技術検討
- ・再エネ活用、蓄電技術、廃熱再利用技術等のカーボンニュートラル実現に資する技術検討
- ・大規模データを効果的・効率的に活用するための仕組みの検討
- ・仮想化技術など、運用に向けた環境整備のための調査検討 等

	2022年度	2023年度
理化学研究所	テクノロジ・アーキ技術の調査・検討 既存ツールや利用動向調査、ベンチマーク設計 等	ベンチマーク性能解析/予測、新規開発ソフト項目検討・定量的評価、ベンチマーク評価に基づく性能分析、要素技術開発 等
神戸大学	独自アーキテクチャ暫定版、フレームワーク仕様検討、アプリ調査 等	グループ共同の性能評価・改良、要素技術開発 等
慶應義塾大学	量子コン、量子アルゴリズム、アニーリング関係の調査 等	スーパーコンピュータとの融合に関する技術実証 等
東京大学	技術調査、要件・課題抽出、ポリシー調査 等	プロトタイプ試作検討、技術要件の詳細化、要素技術の実現可能性検討 等

# 調査研究の全体概要（慶應義塾大学：新計算原理）

## 取組概要

量子コンピュータは、量子力学的な現象を用いて、従来のコンピュータでは現実的な時間や規模で解けなかった問題を解くことのできる新しい計算原理に基づくコンピュータで、日本ではすでにアニーリングマシンが各社出そろう一方、国際的には量子ゲート方式が急激に発達を遂げている。本調査研究では、量子コンピューティングとスーパーコンピューティングの融合計算を行う「量子スーパーコンピューティング」のアーキテクチャ、システムソフトウェア、アルゴリズムについて調査し、その実現可能性を評価する。



## 調査内容

現在の量子コンピュータ、アニーリングマシンのアーキテクチャ、システムソフトウェア、アルゴリズム、利用法、NISQアルゴリズム、量子コンピューティングのシミュレーション技術についてその現状を調査し、スーパーコンピューティングとの融合の方法について検討する。

### 量子コンピュータの現状調査（慶應義塾大学、富士通、他）

- クラウドを通じた利用調査、ヒアリング調査、実機調査により現在の各種量子コンピュータの現状を調査し、スーパーコンピュータとの融合アーキテクチャを探る

### 量子アルゴリズムの現状調査とスーパーコンピューティングとの融合（理研RQC）

- 量子変分アルゴリズムを中心に現在の量子アルゴリズムを調査し、変分法を超えたアルゴリズムについて検討する。

### 量子システムソフトウェアと量子コンピュータのシミュレーション（理研R-CCS）

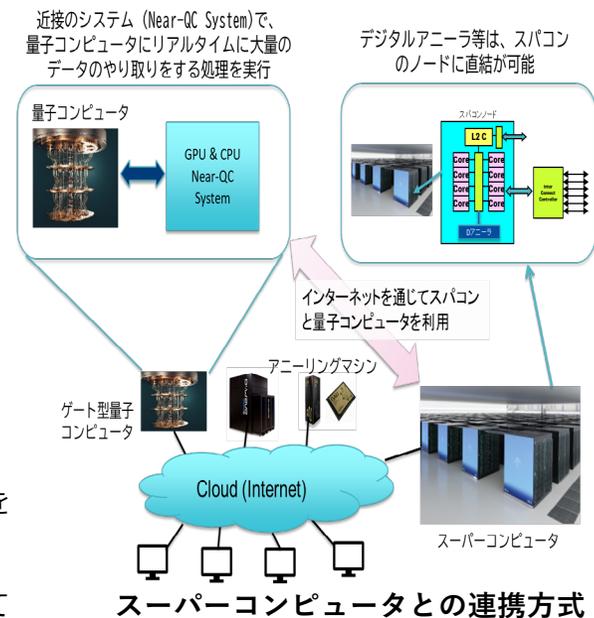
- 量子コンピュータのプログラミング環境、システムソフトウェアを調査し、スーパーコンピュータとの統合環境について検討する。また、スーパーコンピュータによる量子コンピュータのシミュレーションについて調査し、将来の方向性を検討する。

### NISQアルゴリズムの調査とスーパーコンピュータとの融合（九州大学）

- 多少のノイズがあっても有用な答えを導き出すNISQアルゴリズムを調査し、スーパーコンピュータの利用技術を検討する。

### 量子アニーリング、疑似量子アニーリングマシンについての調査（東北大学、NEC）

- 性能評価・性能分析を通じて、アニーリングマシンや高性能計算との連携における課題や実現の制約について評価、研究する



## スケジュール

初年度（2022年8月～2023年3月）は現状調査中心、2023年度はスーパーコンピュータとの融合に関する調査研究センター

# 量子コンピュータにはアニーラ型と量子ゲート型があり、両方が調査対象

東北大 + NEC

## アニーラ型(イジングマシン)



イジングモデル、QUBOモデルによる最適化専用  
量子力学的現象を利用していない  
現在、実際の役に立っている

慶應 + 富士通  
理研  
九州大

## ゲート型



量子力学的な現象を利用して、様々な問題を解くことができる汎用コンピュータ  
ノイズ、量子操作の精度、コヒーレンス時間などにより、まだ実際の問題では役に立っていない

# アニーラー型調査の結果

東北大+NECはベンチマークを用いて評価を取り論文を執筆

Machines	Hardware	Max # bits	# bits fully	Connectivity	Bit precision	Services
D-wave 2000Q	Quantum circuit QPU	2048	64	Chimera graph	Analog 6 bits	Cloud
D-wave Advantage	Quantum circuit QPU	5,760	124	Pegasus graph	Analog 6 bits	Cloud
D-wave Leap Hybrid	QPU + Digital circuit	N/A	N/A	N/A	N/A	Cloud
D-wave Neal	CPU	N/A	N/A	Fully	Digital 64 bits	Local
NEC Vector Annealer	VE Type 20B	100,000+	100,000+	Fully	Digital 32 bits	Local
Fixstars Amplify Engine	Nvidia A100	262,144	131,072	Fully	Digital	Cloud
Hitachi CMOS Annealer	GPU	61,952	176	King graph	Digital 3bits	Cloud
Toshiba SQBM+	GPUs	10,000,000	10,000,000	Fully	Digital	Cloud
Fujitsu Digital Annealer	Digital Annealing Units (DAU), マルチGPU	100,000+	100,000+	Fully	Digital	Cloud

結論：

1. 疑似アニーラーを含む最適化法は、Next富岳上のアクセラレータで動作するアプリケーションとして有用
2. Next富岳上の並列アプリケーションとしても考慮すべき
3. D-wave型（アナログ）アニーラーがNext富岳に接続されて使われるためにはブレイクスルーが必要

意見が分かれている議論：

アナログアニーラーが成功する可能性

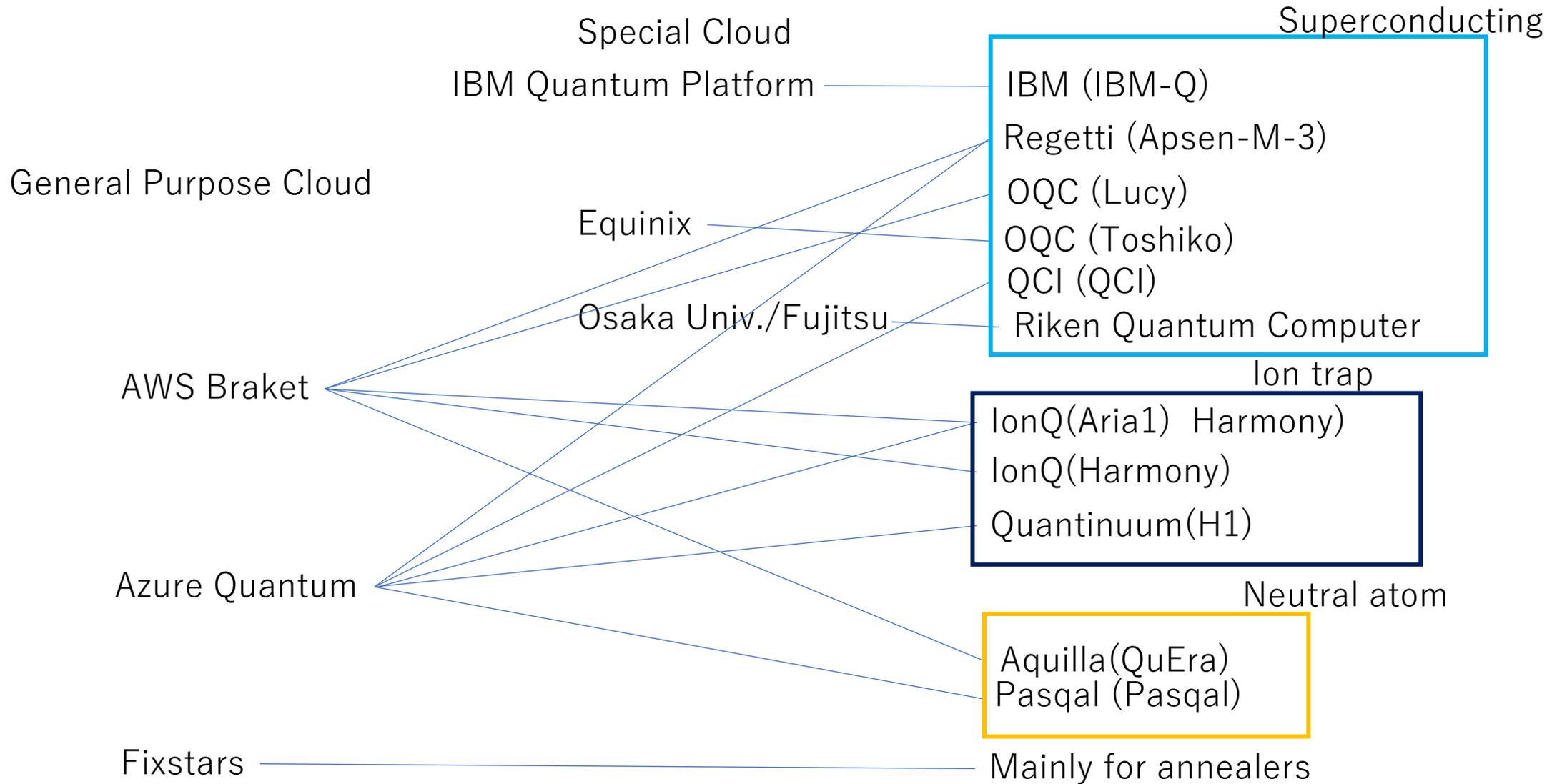
量子のトンネル効果により、最適解に短時間で到達、エネルギー効率が良い

# 量子ゲートの各方式

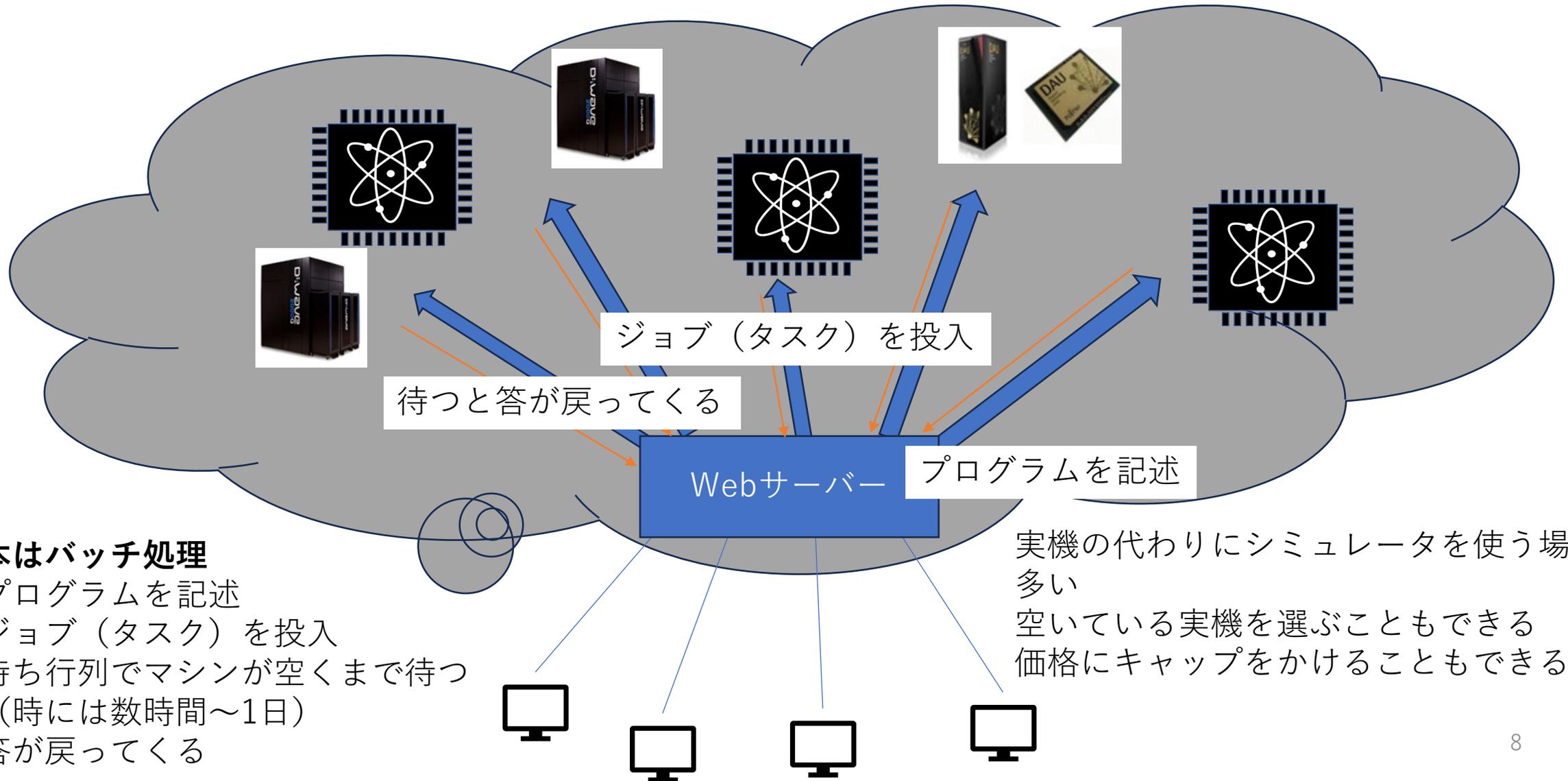
	超電導	イオントラップ	中性原子	光量子	半導体ドット
方式	希釈冷凍装置内の基板上の量子をマイクロ波で制御	電子を取り去ったイオンの形で量子を電磁波により捕捉し、操作する	中性原子をレーザーによる光ピンセットで真空中にトラップし、格子状に整列	光の振幅の量子状態を利用し、重ね合わせや干渉を量子操作として利用	半導体チップ上のアレイに量子を整列させて操作
特徴	最も開発が進んでいる。クラウドで利用可能	忠実度が高い。全結合。クラウドで利用可能	大規模化が容易。最近クラウドで使える	極低温が不要 光通信と相性が良い	大規模化が容易 極低温が不要
qubit数	433 (2022)	43 (Quantinuum)	289 (QuEra)	これから	これから
代表的な開発元	IBM, Google, Rigetti, OQC, 理研, NEC	IonQ, Quantinuum, OIST	QuEra, ColdQuanta, Pasqal, Quandera 分子研	Xanadu, PsiQuantum, Quix Quantum 東大、NTT、理研	Intel, 日立, 理研
課題	冷凍装置内の量子数には限度がある	大規模化が難しい	ノイズに弱い	光源やパルスなど光技術の改良	忠実度の改善

# ゲート型量子コンピュータの現在

様々な形のクラウドで利用可能：主として超電導型とIon trap型、中性原子型が登場しつつある



# クラウドでの利用は主としてバッチ処理



## 基本はバッチ処理

- プログラムを記述
- ジョブ (タスク) を投入
- 待ち行列でマシンが空くまで待つ  
(時には数時間~1日)
- 答が戻ってくる

- 実機の代わりにシミュレータを使う場合も多い
- 空いている実機を選ぶこともできる
- 価格にキャップをかけることもできる

# では量子ゲート型量子コンピュータはいくらするか？ (Q2B Silicon Valley 23.12より)

- いくらするか？
  - Rigetti Novera (superconducting, 9-qubit) \$**900K**
  - IONQ(Ion trap) \$ **10M**
  - Quandera (neutral atom) \$ **1M以上**
- ランニングコスト？
  - 冷却剤のコストが大きい。循環するが漏れる分を足す必要がある
  - 電気料金はスパコンよりも圧倒的に小さい
  - 設置場所は特別な部屋にする必要はあるが、さほどコストは掛からない。

IBM Q Kawasakiは、新川崎のNanoBiCに  
設置されている  
ここは通常の工場レベルの装備



# 量子ゲート型の現状

- ベンダ以外の利用者はクラウド経由で利用しているが、利用qubit数はさほど多くない。多くのqubitを利用しているのはベンダの研究が多い[arXiv:2307.16130v1]
- ハイブリッドコンピューティングはクラウドでも可能
  - 量子コンピュータと従来型コンピュータの間で自動的にデータ交換させてジョブを動かすことができる。
  - dockerを利用して、ユーザ環境と量子コンピュータの協調が可能
- 一方、商用クラウド上での利用には限界がある
  - ユーザ側
    - 多数の量子ビットを利用する場合は、待ち時間が長く、資金を要する
    - ハイブリッド利用は、待ち行列の待ち時間が短くなるだけ。しかも資金を要する  
→ベンダ自体か、ベンダと共同研究を行う環境を持つ研究機関以外、大規模な量子ビットを用いたハイブリッドの利用は困難
    - 量子コンピュータシミュレータは利用可能だが、貧弱
  - 量子コンピュータ開発側
    - 企業を設立しないとAWSクラウドには量子コンピュータを出すことができない
    - Fixtarsのクラウドは簡単らしい

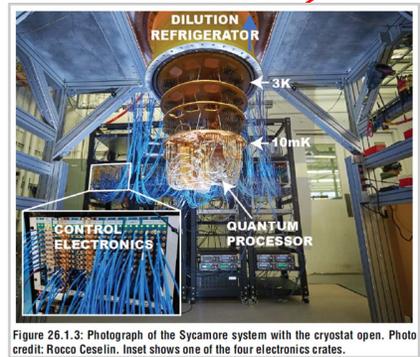
# NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum computer) vs. FTQC (Fault Tolerant Quantum Computer)

使える  
量子コンピュータ

表面符号を用いた誤り訂正量子計算  
FTQC

NISQ、FTQCシステム  
九大

Googleの路線  
AIの利用

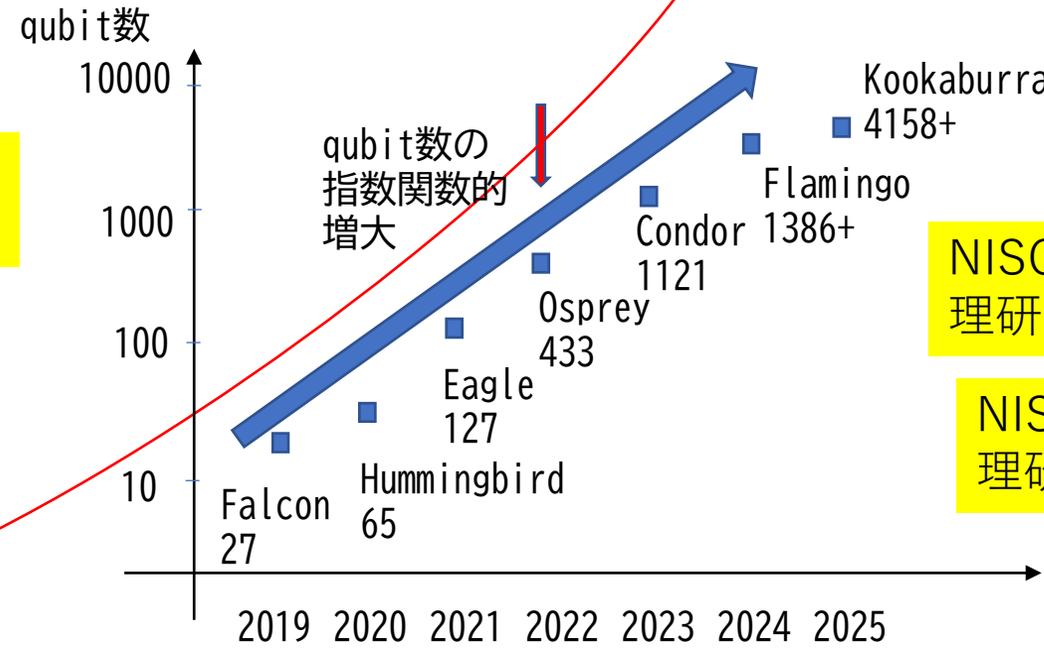


一定のノイズを念頭に置いた量子計算応用  
NISQアルゴリズムを極める  
Error Mitigation

現在の量子コンピュータの  
利用調査、FTQCの現状 慶大・富士通

現在の実験的  
量子コンピュータ

現在の量子コンピュータは  
ENIAC以前の実験機のレベル  
qubit数が少ない  
忠実度が低い



NISQ + スパコン融合  
理研R-CCS

NISQアルゴリズム  
理研RQC

IBMのロードマップ (2022) より

# ハイブリッドアーキテクチャ

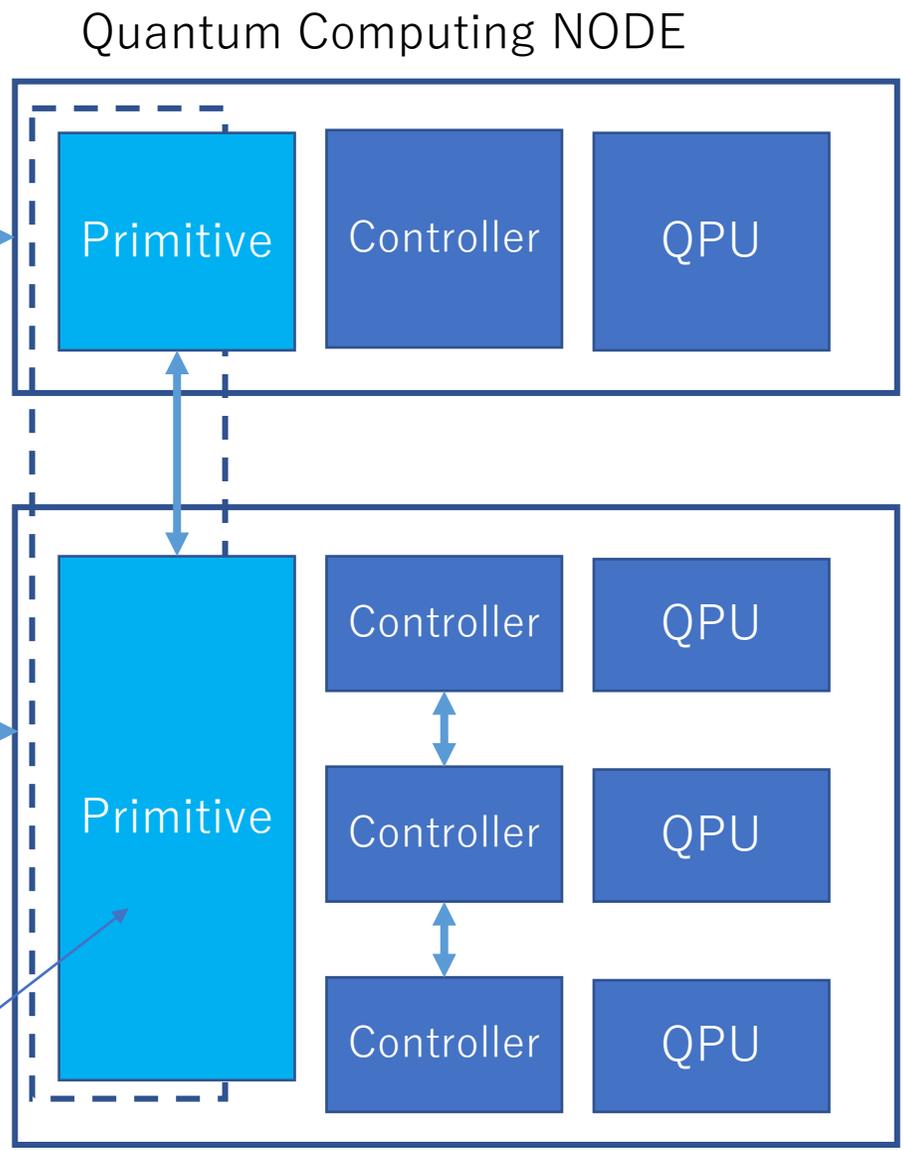
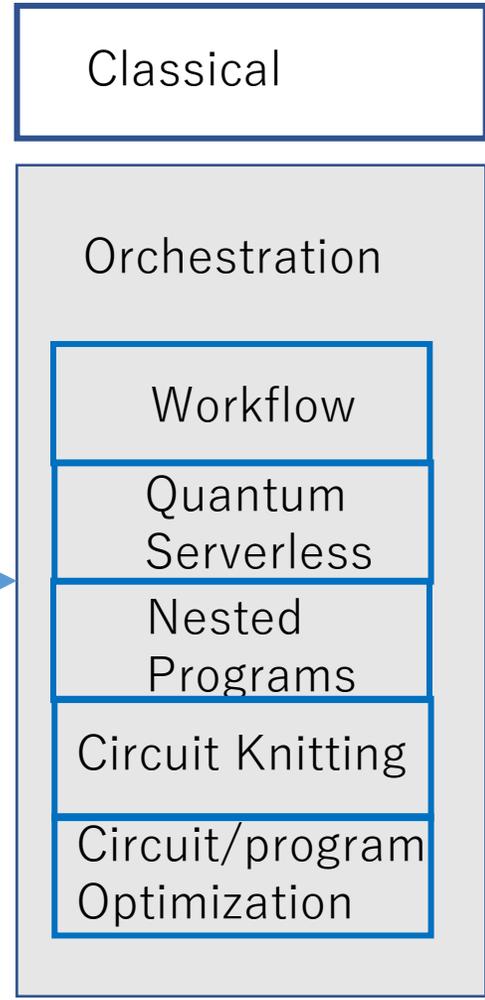
IBMのQuantum-Classical Architectureのモデル <https://arxiv.org/abs/2209.06841>を改変

**計算遅延**  
Orchestrationを行うHPC  
→コヒーレント時間より高速に結果を返す必要がある用途  
(数msec)ならば同一サイトに置くのが良い  
Primitiveに任せるならばどこに置いてもいい



**量子コンピュータへの入力**  
アプリによるが  
プログラム、パラメータなど

**量子コンピュータの出力**  
400 qubit × 1000shotでも  
400Kbitなので大したことない  
確率分布でもデータ自体は少ない



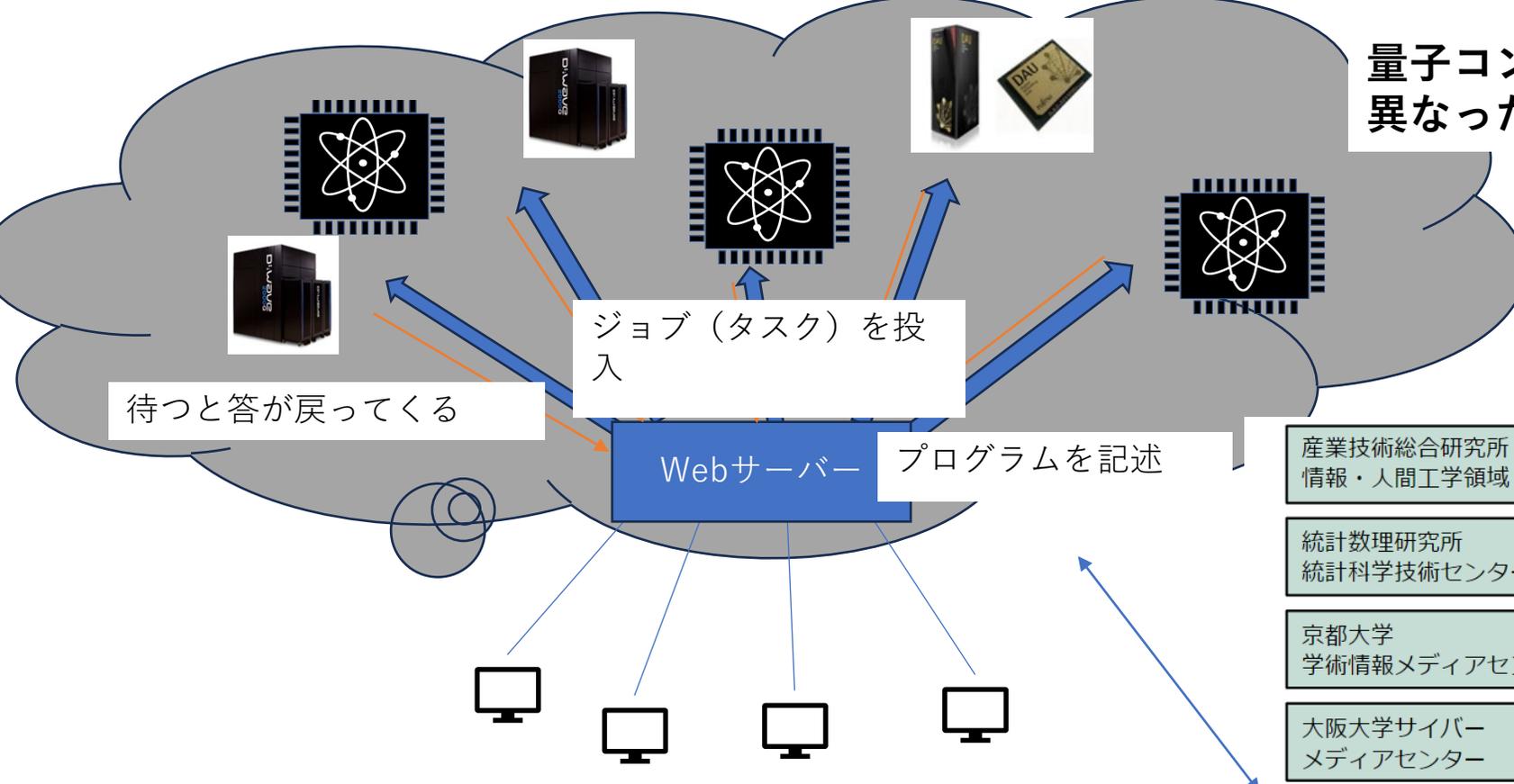
Runtime Compilation  
Error Suppression/Mitigation/  
Correction...

# QPUとHPCをどのように接続するのか？

- QPUの入出力データ量:
  - アプリケーションに依るが、入力は量子回路とパラメータ、出力は1000shot程度の測定結果と確率分布→さほど大きいものではない
- レイテンシィ:
  - エラー緩和や修正の研究では、レイテンシィは可能な限り小さい方がよい。
  - コヒーレンス時間より短い必要
- **QPUの入出力はPrimitiveと呼ぶ従来型コンピュータ**
  - ネットワークを經由して接続：接続自体が難しいわけではない
- **QPUとHPCは同一のクラウド上でアクセスする必要がある**
- **Open Problems:**
  - QPUとHPCは同一サイトで密結合する必要がある
  - スーパーコンピュータ(あるいはFlagshipスパコン)がHPCとして必要

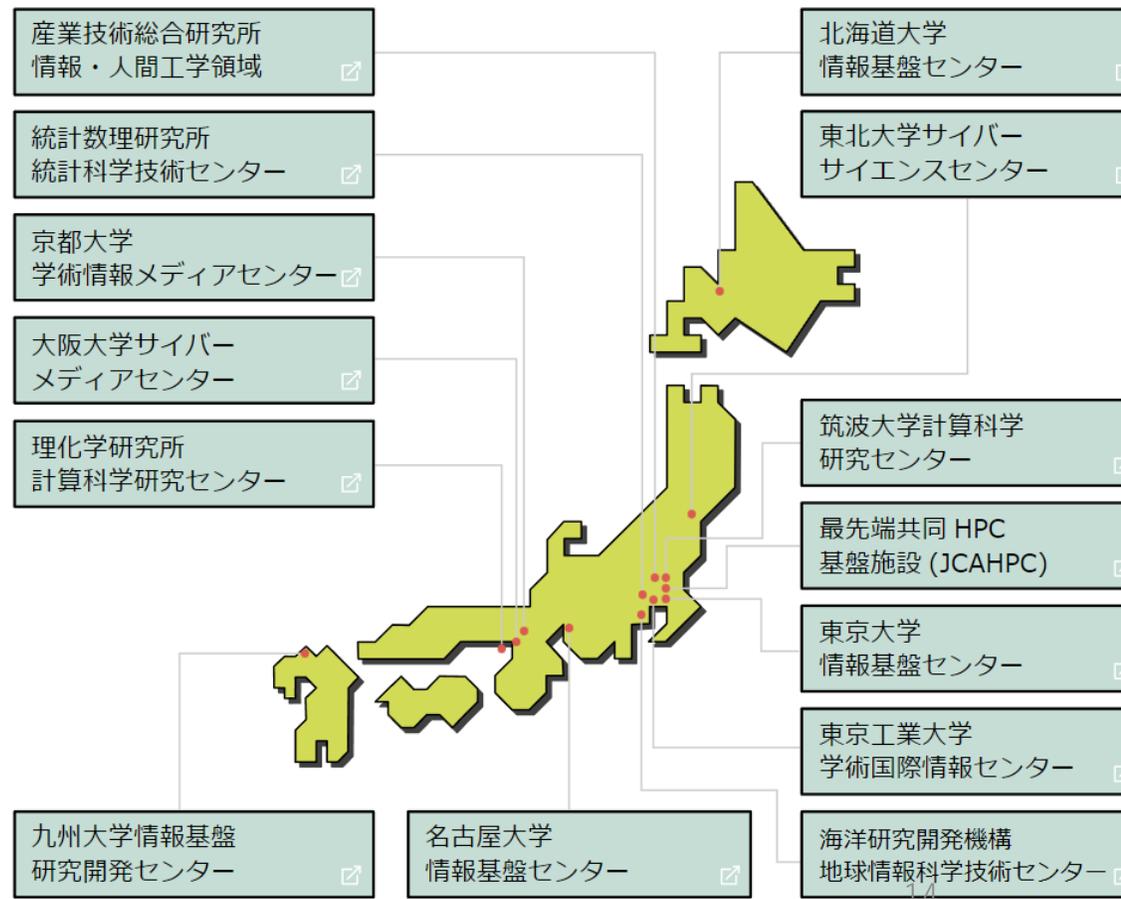
量子コンピュータとスーパーコンピュータは  
異なった世界で使われている

スーパーコンピュータは国の支援する  
計算センターで運用し、HPCIなどで  
利用する

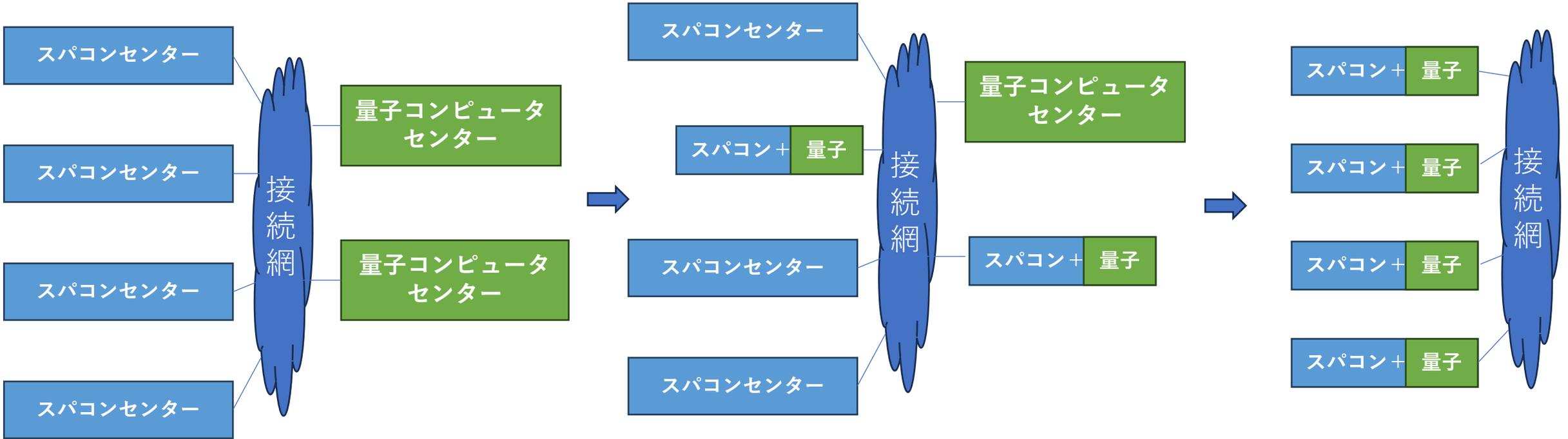


量子コンピュータはIBM、AWS、Microsoft、Fixstarsなどの  
一般のクラウドで利用する

現状ではスーパーコンピュータと量子コンピュータの  
融合は困難



将来の国の計算基盤（スーパーコンピュータ、量子コンピュータを含む）整備の方向性についての提言  
 量子コンピュータを計算基盤の一つとして位置づけ、申請、認証、ジョブ管理、APIの方法を統一する



a)独立したセンターを接続  
 スパコンはスパコン、量子は量子  
 申請や認証を統一、ジョブ管理、  
 APIを統一

b)様々な構成のセンターを接続

c)統合センター  
 全ての（多くの）スパコン  
 センターは計算リソースとし  
 て量子コンピュータを装備

量子インターネットの利用はさらに未来の話  
 →複数量子コンピュータの接続に限られる

# スパコン+量子融合クラウドの利点

- 今のままではなぜ良くないか？
  - 量子コンピュータの研究が制約される
  - 量子コンピュータクラウドがなし崩しに実現されていく
- スパコン方式の申請、アカウント管理
  - 量子コンピュータの商用クラウド利用は超混雑が予想されるので資金がモノを言うようになる（混雑は今でも結構ひどい）
  - 広く研究を行うためには現在のスパコン方式は優れている
- スパコンにログインして用いることで、ユーザ環境の整備や量子コンピュータの柔軟な利用が可能
  - 実はクラウドでもdocker環境でAIプラットフォームと連携できたりして割と進んでいる。しかし、スパコンログイン方式の方がより柔軟にできる可能性がある
- 大規模高速なシミュレーションが可能。実機と簡単に入れ替えることができるのが魅力
  - 現在、クラウドでも量子コンピュータシミュレータは使えるが、脆弱
    - 例) AWS 状態ベクトル型 34qubitまで、テンソルネットワーク型50qubitまで
    - 富岳ならば状態ベクトル型 40qubit (46qubit)、テンソルネットワーク型100以上は可能
    - 例) スパコン不老を使っている量子化学計算の専門家杉崎さん (SQAI)のインタビュー (6・30)
- スパコンを既に利用している物理学者、量子化学、天文学等の研究者が自然に量子コンピュータに研究を展開できる
- 本当に量子コンピュータが計算資源として役に立つようになればスパコンセンターに入れるのは自然
- 実験的な量子コンピュータ（ムーンショットG6の成果など）を簡単にクラウドに導入可能
  - 量子コンピュータの研究者にはクラウドへの投入が困難で壁になっている
  - 統一したジョブ管理で、複数量子コンピュータ間の連携も可能になる

# 問題点

- そもそも現在の量子コンピュータは実用的な問題を解くためには使えない
- そのくせ無茶苦茶高価なので配備が困難
- スパコンと現在の量子コンピュータを接続してもすぐに目立った成果が出そうにない（異論あり）
  - 大規模高速なシミュレータ、比較的空いている以外、今の量子コンピュータ研究者にあまりアピールしない
- フラグシップスパコンを接続すると、通常利用のユーザに迷惑が掛かる可能性がある
  - 量子コンピュータ研究者の大量申請により従来のスパコンユーザが使えない
  - 量子コンピュータのメンテナンスによるシステムダウンなど、
- スパコンセンターの負担が大きくなる
  - スパコンだけでも管理が大変なのに変なものを入れたら大変
  - 量子コンピュータのリプレイスのサイクルがやたら早いかもしれない
- 庇を貸して母屋を取られる
  - スパコン中心なはずが、量子コンピュータが中心の管理方式になってしまう

## ポイントは標準的なアクセス方式の確立

- a)-c)すべての方式で重要なのは量子コンピュータに対する
  - 統一されたアクセス方法
  - コ・スケジューリング方法
- これらをどうするかは理研R-CCSで調査検討中
  - 量子コンピュータならではのスケジューリング方法があるかもしれない
- 量子コンピュータだけでなく、領域特化型（AI専用など）の計算資源にアクセスするための汎用モデルを考える