

評価委員会 次世代計算基盤に係る調査研究 新計算原理調査研究チームの報告

2024年3月6日

東大dlab 天野英晴、慶應義塾大学 渡辺宙志

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。

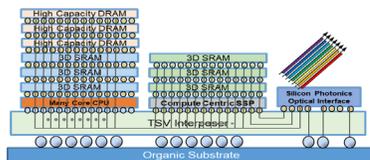
システムチーム 次世代計算基盤として想定されるアーキテクチャ（プロセッサ、メモリ、ストレージ等）、システムソフトウェア、アプリケーションを提案

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

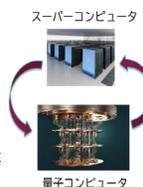


新計算原理チーム 代表機関：慶應義塾大学（天野 英晴）

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（埜 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

大部分の
チームは
ここで
研究を
終了

	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

新計算原理調査研究チームは任務をほぼ終了した

次世代計算基盤に係る調査研究

新計算原理チーム報告会

5月29日 13:00-17:00

完全リモート Zoom

<https://us06web.zoom.us/j/83342048033?pwd=aoRSbEDzUoi7JZiAby5Qg1AzAsILE7.1>



プログラム

13:00-13:05 文科省よりご挨拶

13:05-13:20 全体の概要 天野英晴(慶應チーム)

13:20-14:00 NISQ アルゴリズムの最新動向
柚木清司(理研 RQC チーム)

14:00-14:40 量子コンピュータとスパコンの連携
佐藤三久(理研 R-CCS チーム)
休憩

14:50-15:30 FTQC 最新動向
谷本輝夫(九州大学チーム)

15:30-16:10 量子アニーラの現状
小松一彦, 百瀬真太郎(東北大・NEC チーム)

16:10-16:50 量子コンピュータシミュレータの現状
近藤正雄(富士通株式会社、慶應チーム)

16:50-17:00 2024 年度の活動
渡辺宙志(慶應チーム)

- 最終報告会を5月29日に実施
 - 300名ほどの参加者があった
 - <https://new-computation-principle.github.io/>
 - なぜ新計算原理チームだけ2024年5月に終了したか？
 - 当初予定に忠実だったから
 - 将来のHPCとQuantum Computerの在り方について提言をした
 - 2030年までにはゲート型はそのままではまだ使えない
→ ポスト富岳に直接は関係しない
- ### 調査よりも実践の時期である
- JHPC-Quantumがスタート → 佐藤G、柚木G
 - ムーンショットG6は佳境 → 谷本G、天野はAD
→ FTQC-ARC研究会立ち上げ(11月25日)
- 東北大+NECグループはアニーラの調査継続
現実的な方法であり、ポスト富岳と関連する可能性がある
と判断したため

最近の取り組み

成果報告の公開

<https://new-computation-principle.github.io/>

今年度の成果も含めた成果報告書のPDFもアップロード予定。

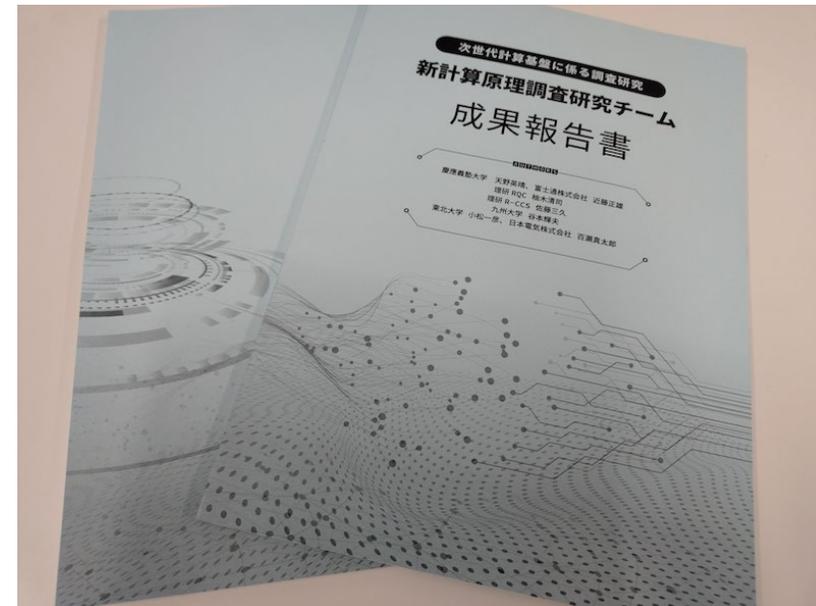
成果報告書を製本 & 配布

11月時点での成果報告書を100部製本した。

12月27日に東京大学で開催された合同ワークショップにて配布

<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/events/20241227-1/>

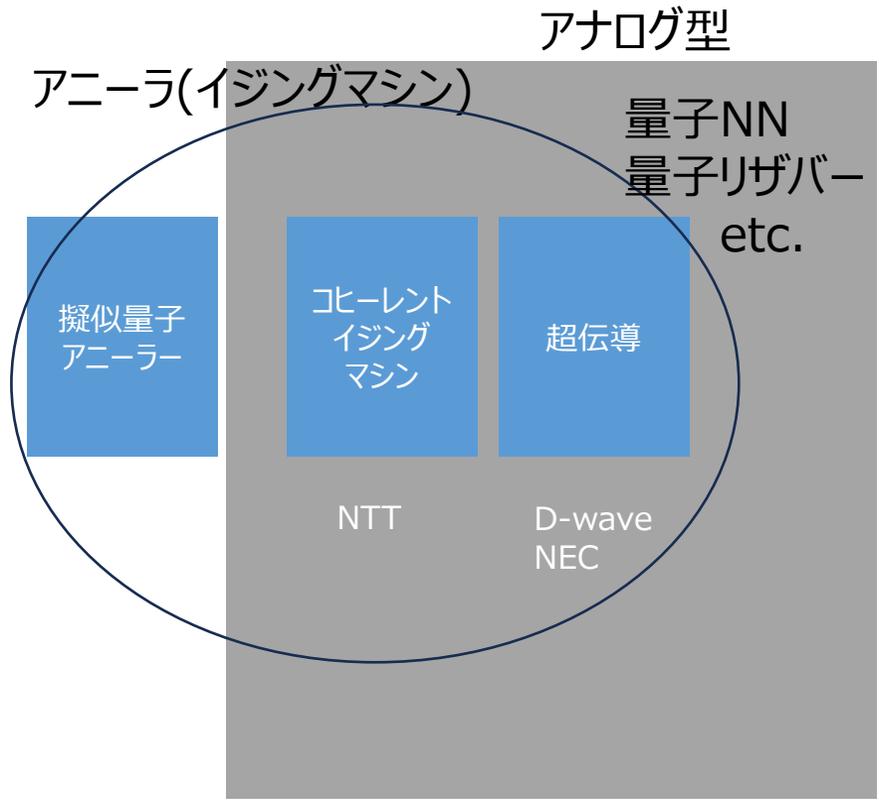
100部完売



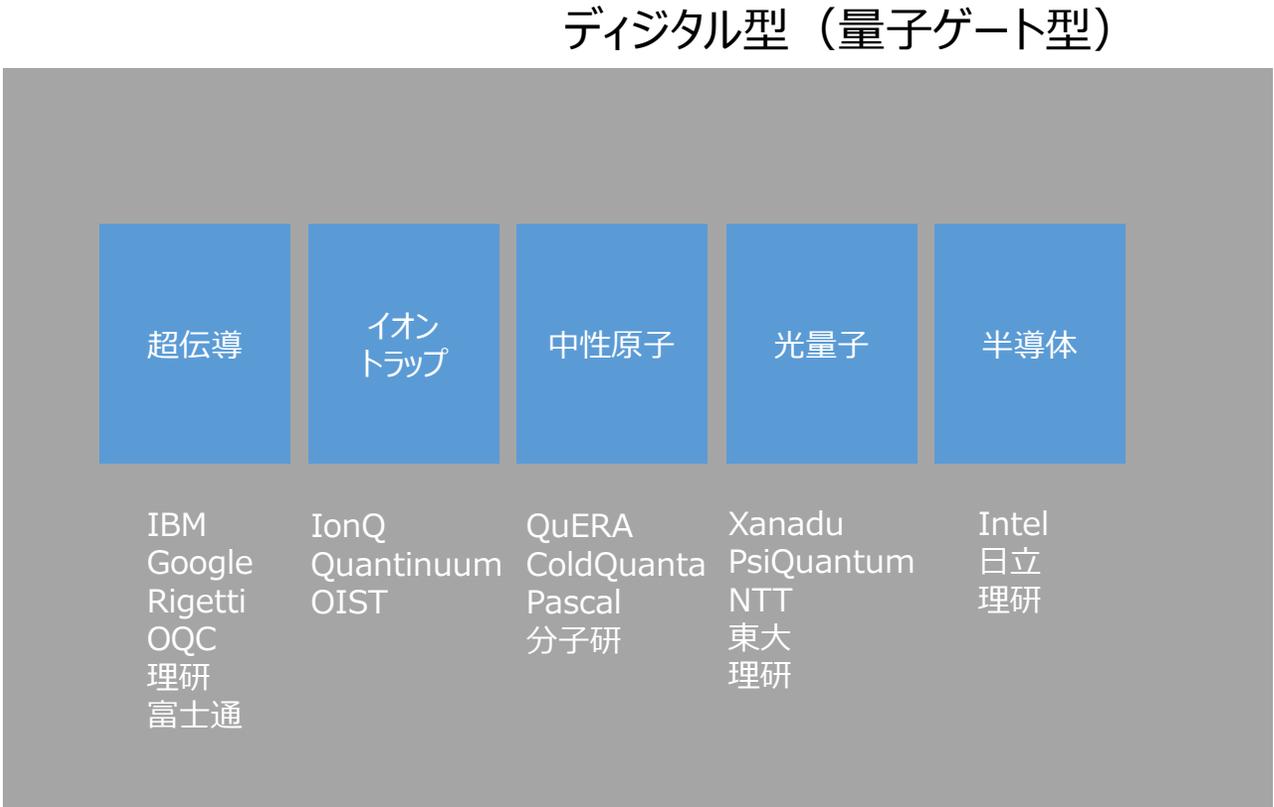
その他のアウトリーチ活動

1. 10月4日 東京大学第6回社会人講座
Next富岳FS新計算原理チームの調査内容報告 天野
2. 10月28日 量子ソフトウェア研究会招待講演
FS新計算原理チームの調査報告 天野

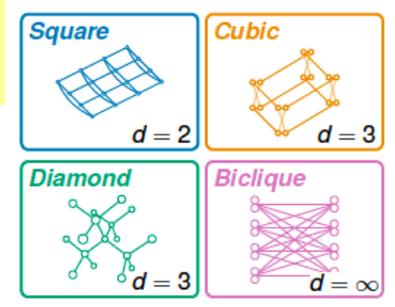
アナログ型とデジタル型に分けて考えるべき



量子の動きをそのまま問題解法に利用
トンネル効果、量子重ね合わせなど
量子的現象を利用
量子アニーラーは実問題で利用可能

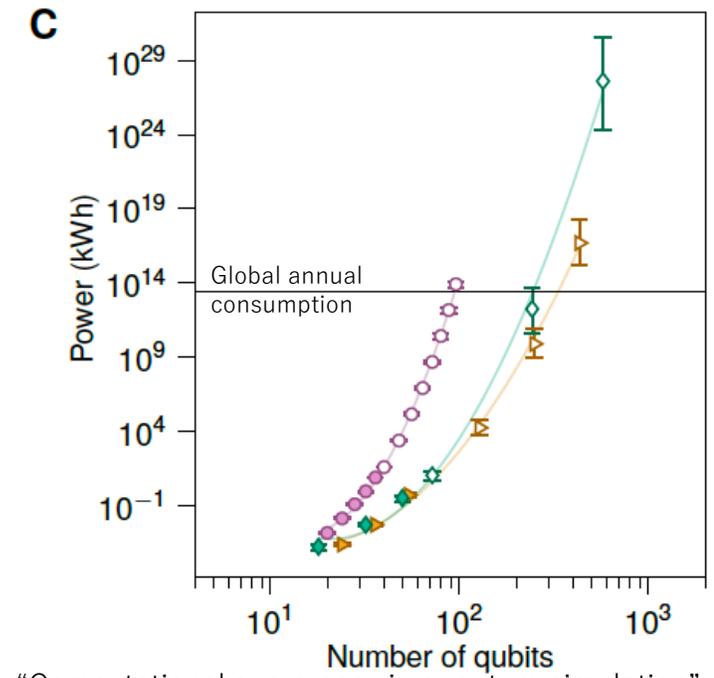
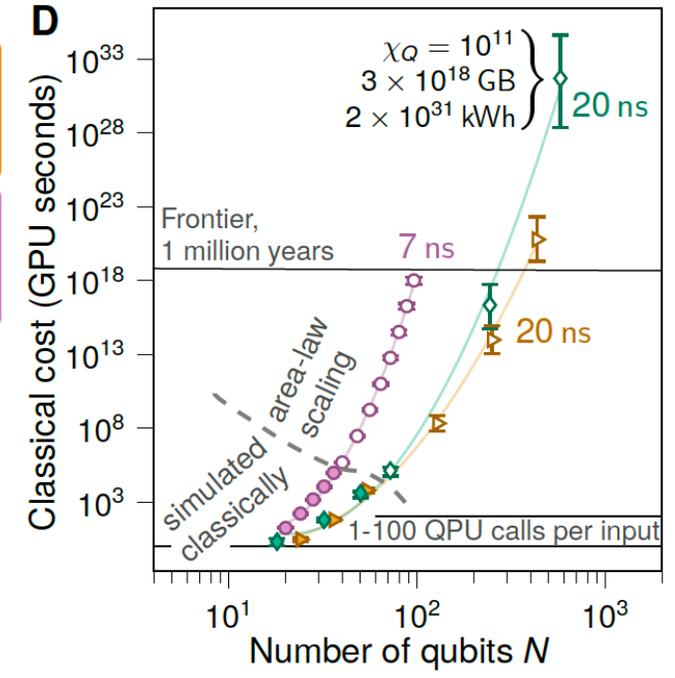


量子力学的な現象を利用して、ゲートで量子ビットを扱うことで
様々な問題を解くことが
できる汎用コンピュータ
ノイズ、量子操作の精度、コヒーレンス時間などにより、まだ
実際の問題では役に立っていない

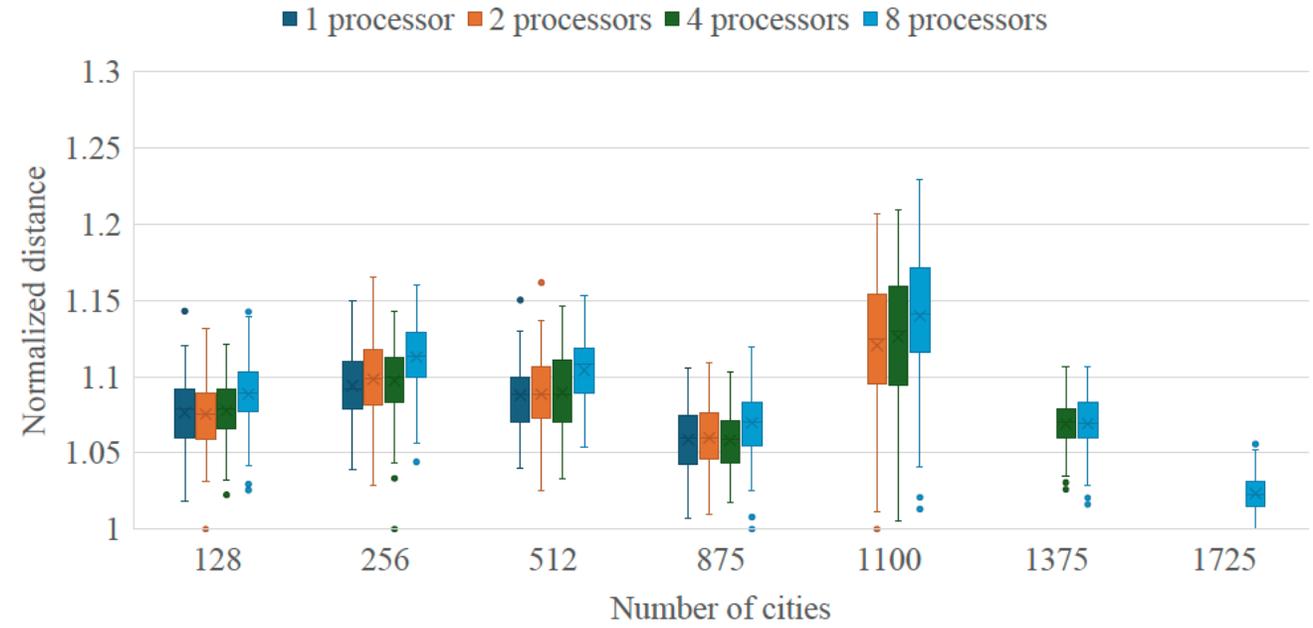
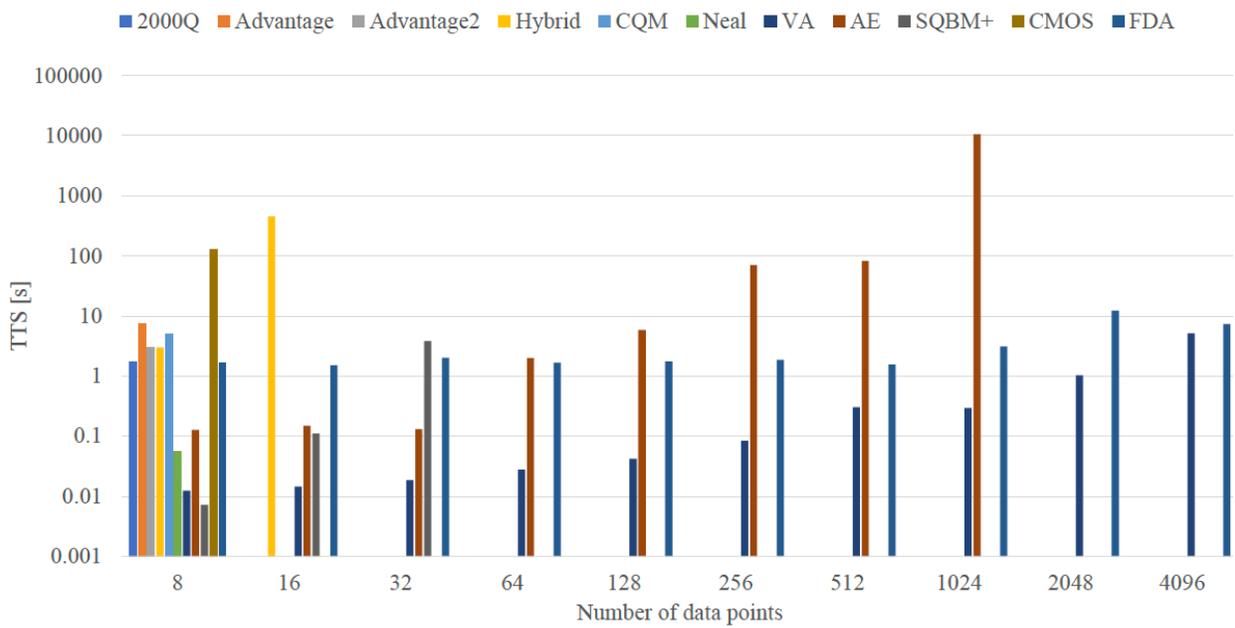


量子アニーリングマシンの調査(右図 D-Waveの実機による)

- 磁気スピン非平衡動力学シミュレーションにおける量子超越性の確認**
 - Frontier または Summit スーパーコンピュータで実験に基づき外挿 (Tensor network や NN に基づく近似手法)
 - Frontier や Summit で数百万年、700PB のメモリ容量、正解の消費電力1年間分が必要となる計算
 - QPU では現実的な時間、消費電力で実行可能
- 量子アニーリング実例 (D-Waveの実機による)**
 - 基地局のグルーピングを量子アニーリングにより最適化 (NTT ドコモ)**
 - モバイル端末位置の把握や通信保持のために発信されるページング信号の数を削減
 - ページング信号を最大約15%削減、約1.2倍の端末数の接続が可能
 - 汎用ソルバーで27時間の処理を約40秒で実現でき、全国規模へのスケール可能
 - テレビ広告の見られた人数の最適化 (リクルート)**
 - 実際の視聴率サンプリングから過去の広告資料データを学習し、機械学習により視聴率を推定、量子アニーリングにより広告割り当てを最適化し、テレビ放送のスケジュール作成
 - 手動のスケジュールリングよりもリーチ達成率が90%向上
 - ライドシェア、マルチモーダルシェアに向けた最適化(デンソー)**
 - 量子ソルバーを用いたスケジュールリングの最適化
 - 京都の実データを利用し、30%の車両数削減



量子および疑似量子アニーリングマシンの性能調査

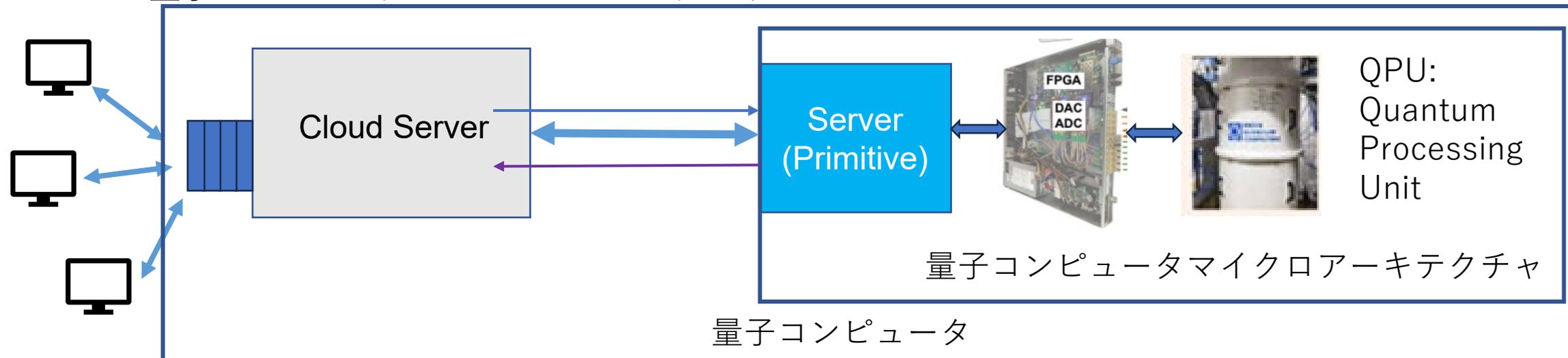


- 富士通デジタルアニーラでの実験・性能評価を追加
 - 組み合わせクラスタリングによる性能評価
 - NEC Vector Anneal, 富士通デジタルアニーラ、Fixstars Amplifyの順に、短いTTSを達成
 - ビット数、結合構造、数値精度、局所解から脱出能力が重要
 - 量子アニーリングマシンは、ビット数増加による大きな問題の実行に期待

- マルチノードを用いたアニーリングによる大規模実験
 - マルチノードを用いたアニーリングマシンの登場
 - NEC Vector Annealによる実験
 - TSPを用いた評価
 - シングルノードでは実現できない大規模問題(1725都市)の求解が可能
 - マルチノードにおいても精度は同等

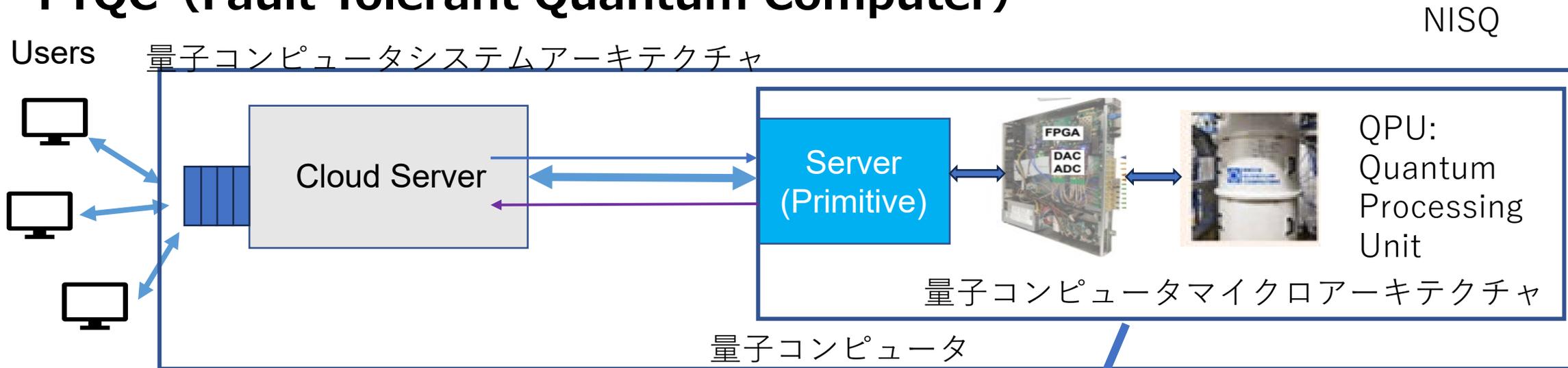
コンピュータ屋から見た量子コンピュータのアーキテクチャ システムアーキテクチャとマイクロアーキテクチャを区別しよう

Users 量子コンピュータシステムアーキテクチャ

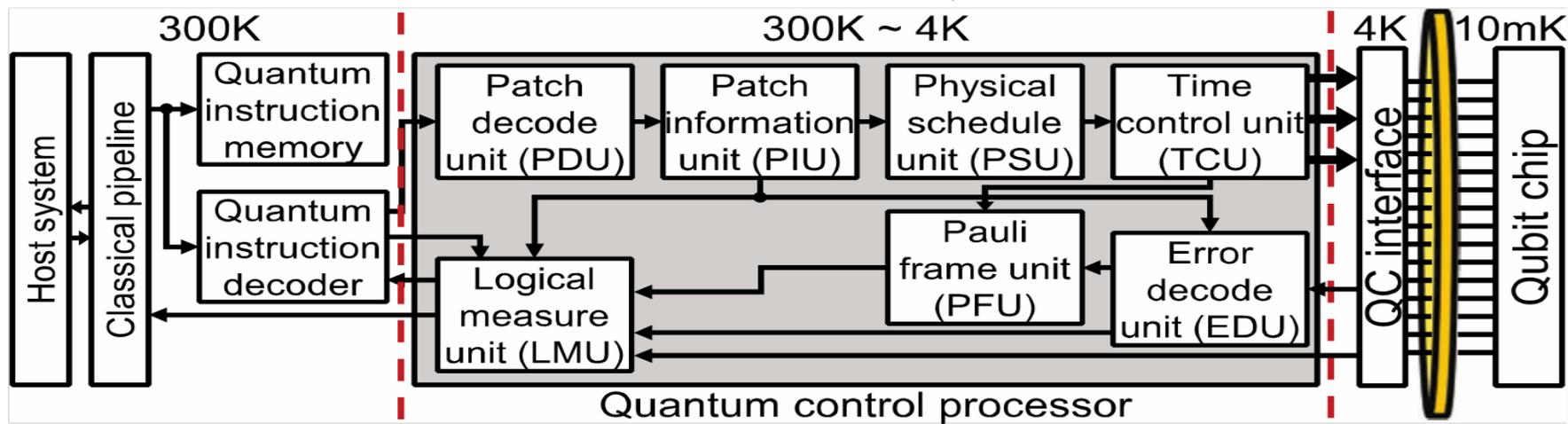


- 量子コンピュータマイクロアーキテクチャ：
 - QPUは実現の方法が様々
 - QPUの性質により、マイクロアーキテクチャは大きく異なる
- 量子コンピュータシステムアーキテクチャ
 - クラウドにならざるを得ない
 - 量子コンピュータは高価でオンプレミスは困難
 - この時点でQPUの違いは隠ぺいされる（多分）
 - では、普通のコンピュータ、例えばスパコンと同じといえるのだろうか？

NISQ (Noisy International Scale Quantum Computer) と FTQC (Fault Tolerant Quantum Computer)



FTQC

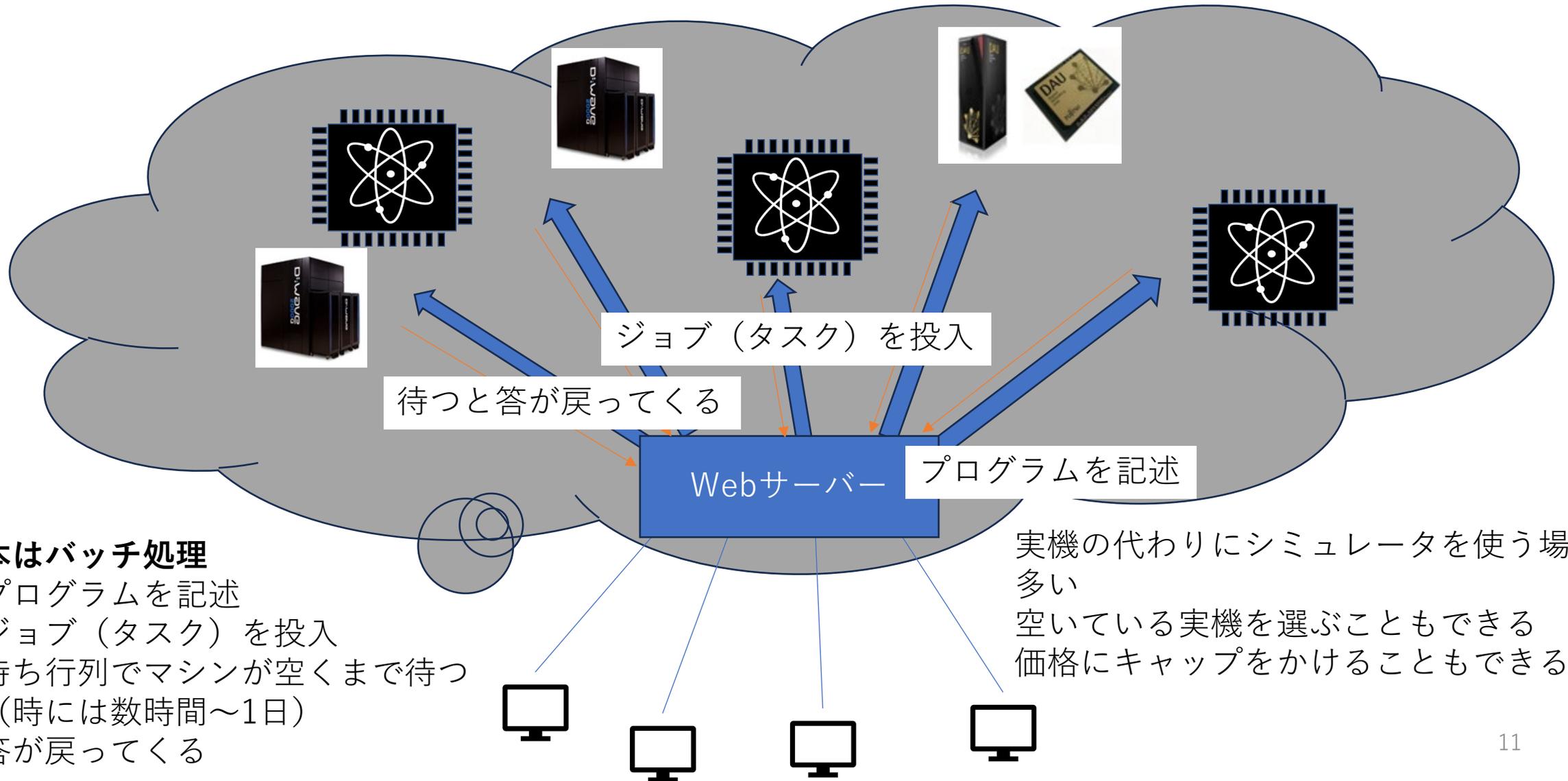


FTQCのマイクロアーキテクチャは複雑多数のノイズを含む量子ビットのエラー訂正をして少数の理想的な量子ビットを実現するため

本調査の中心はNISQのシステムアーキテクチャ

- 現在最もイノベーションが活発なのはFTQC
 - Moonshot G6は、12チームが理論、物理、アーキテクチャの広い領域で研究開発を行っている
 - この報告を精査すればFTQCの調査はほぼ可能
 - 今回の報告書では谷本Gがまとめている
- 今回の調査の目的はNISQとスーパーコンピュータの接続、協調をポスト富岳でどのようにするか？
 - NISQの現状調査 天野、近藤G
 - NISQのアルゴリズム 柚木G
 - NISQのシステムアーキテクチャ、言語 佐藤G

現在の量子コンピュータのシステムアーキテクチャ



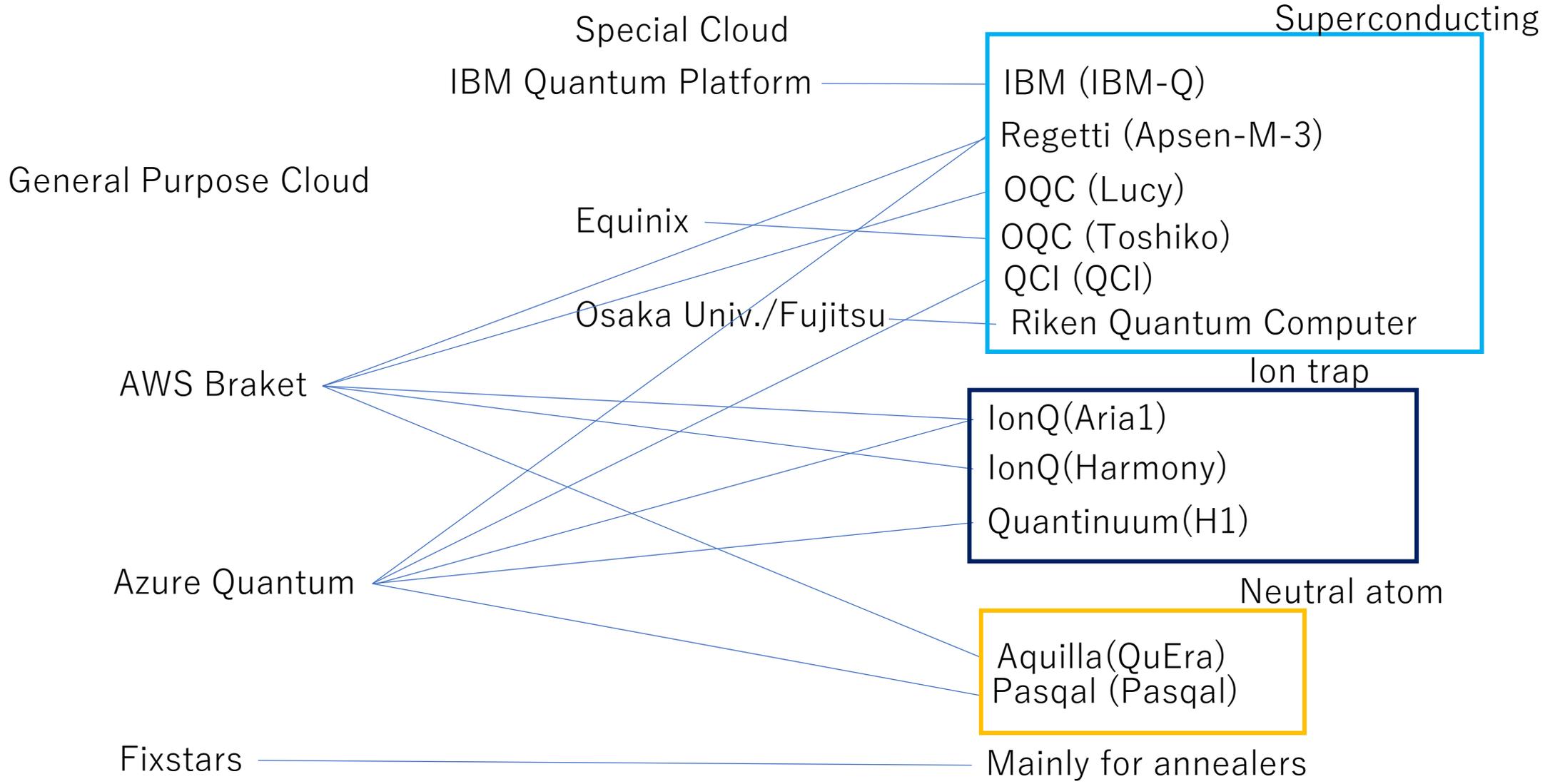
基本はバッチ処理

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

クラウドの現状

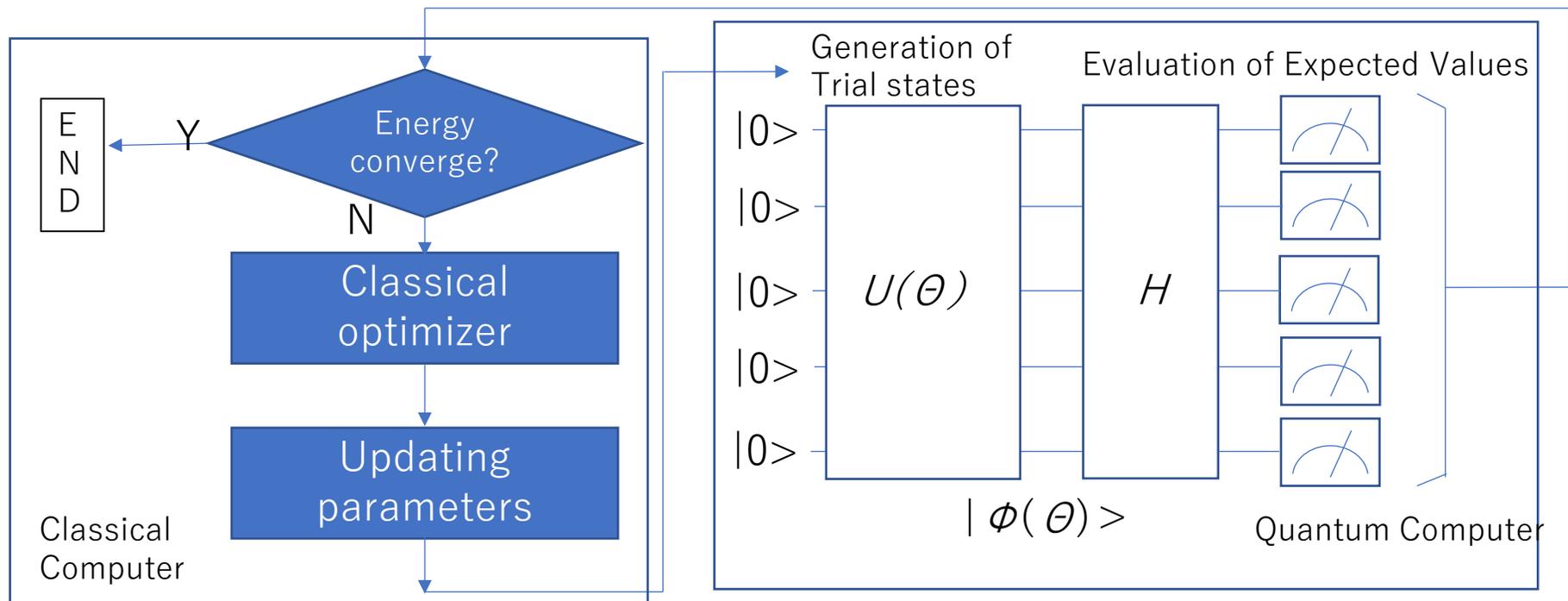
様々な形のクラウドで利用可能：主として超電導型とIon trap型、中性原子型が登場しつつある



量子コンピュータと従来型コンピュータのハイブリッド利用

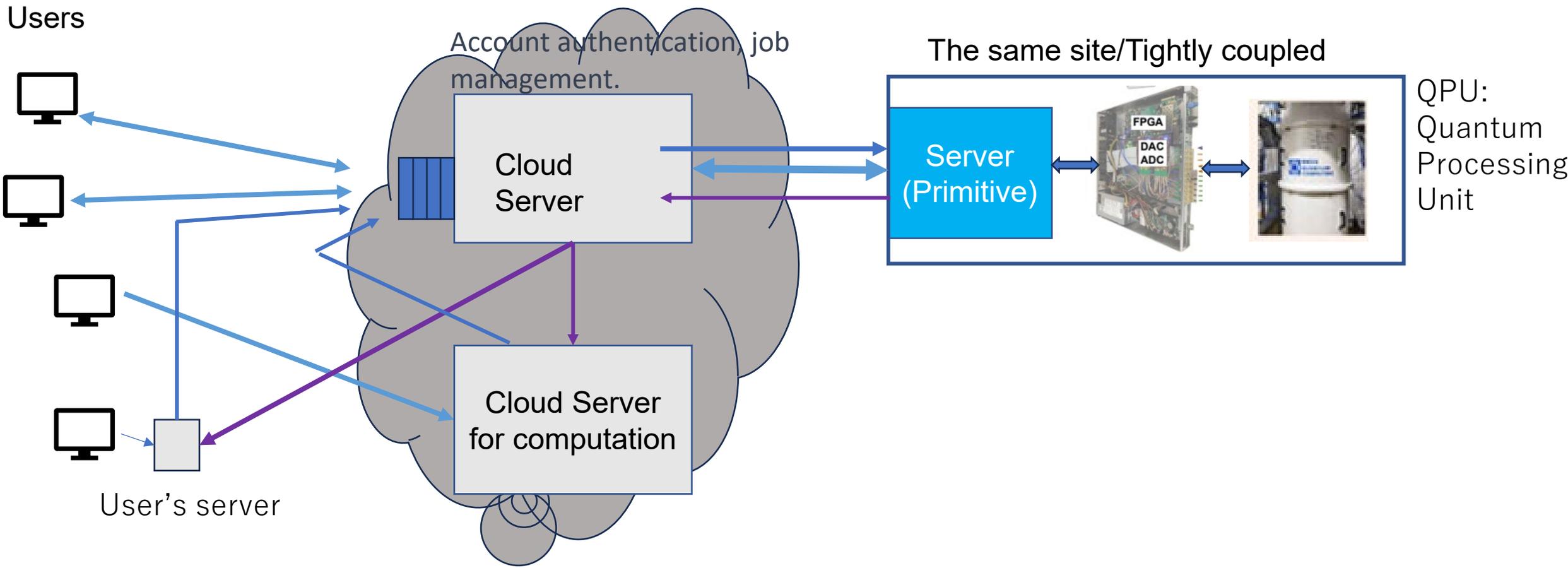
For NISQ, the hybrid computing is commonly used.

For example, VQE (Variational Quantum Eigensolver) searches solution alternatively execution of quantum computing and classical computing. This type of algorithm is popularly used in quantum chemistry computation. Using AI in the classical side is hopeful approach.



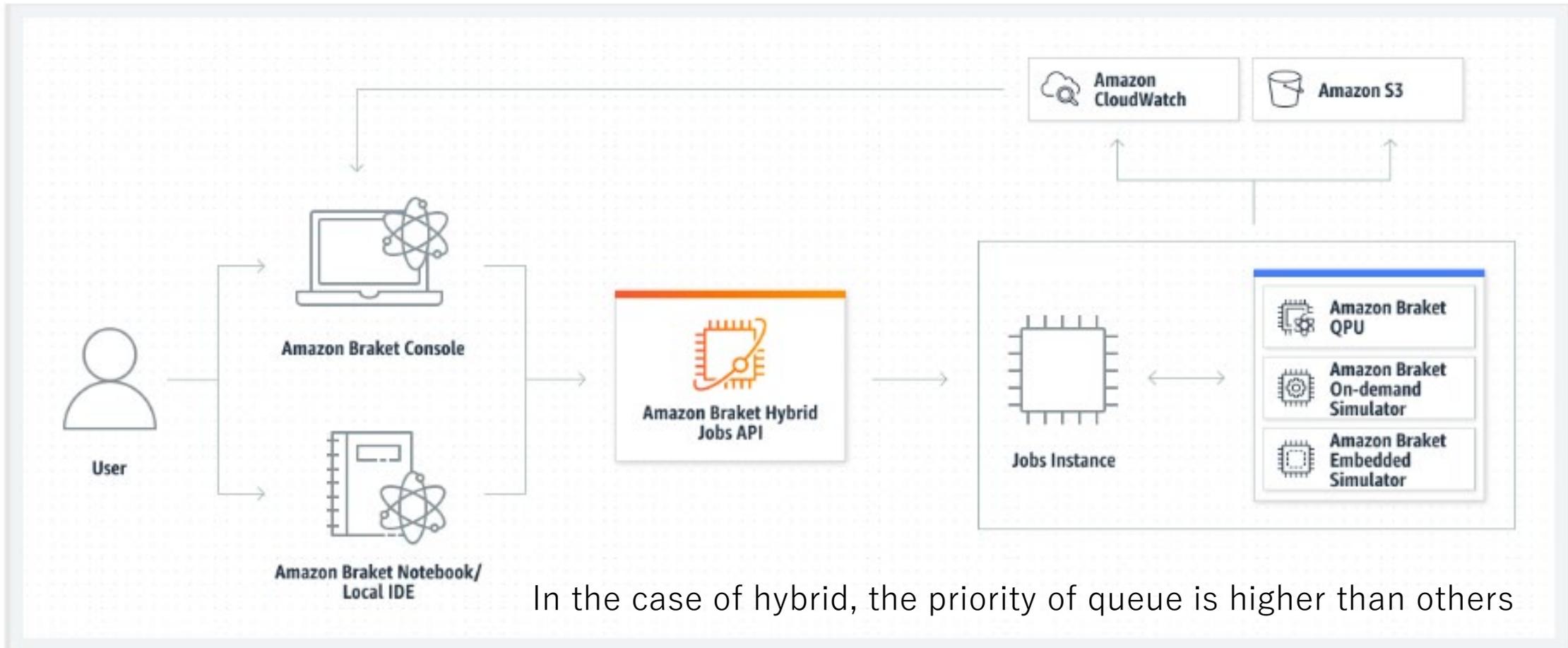
ハイブリッドコンピュータのアーキテクチャ

The loop between Classical computer and Quantum computer is executed automatically.



ハイブリッドジョブの実現例：AWS braket hybrid

1. Algorithm description (braket SDK/PennyLane)
2. Preparing Docker Container which includes users' program environment (AWS provides some)
3. Job generation, target device selection and setting options.
4. Call QPU or on-demand simulator by APIs. Jobs are pushed into the queue.
5. They are executed alternatively.



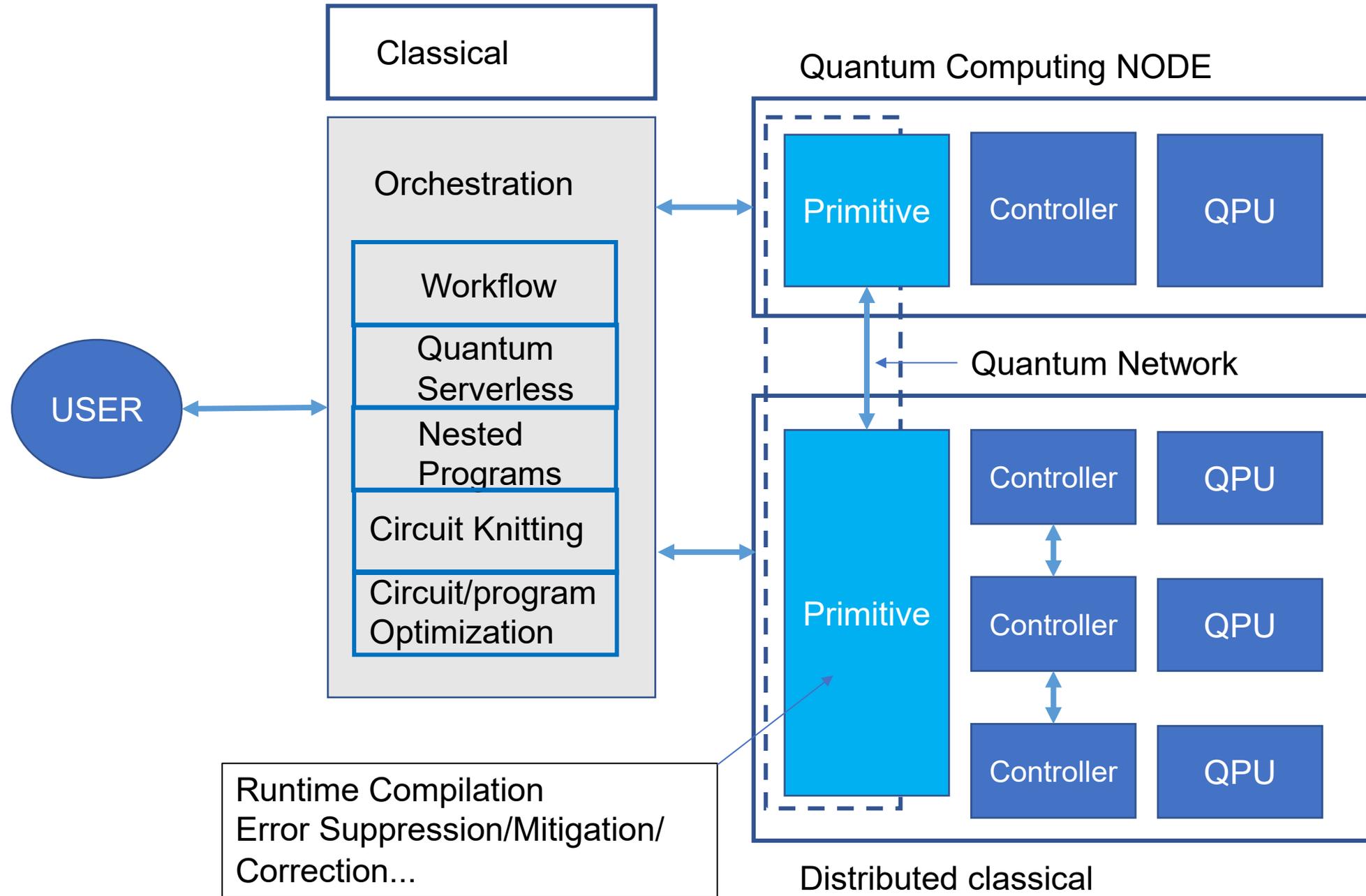
In the case of hybrid, the priority of queue is higher than others

ハイブリッド利用の現状

- 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。ハイブリッド利用、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
 - Fixstarsのクラウドは簡単らしい→現在ムーンショットでもクラウド接続中

The model of
IBM's Quantum-Classical Architecture

<https://arxiv.org/abs/2209.06841>

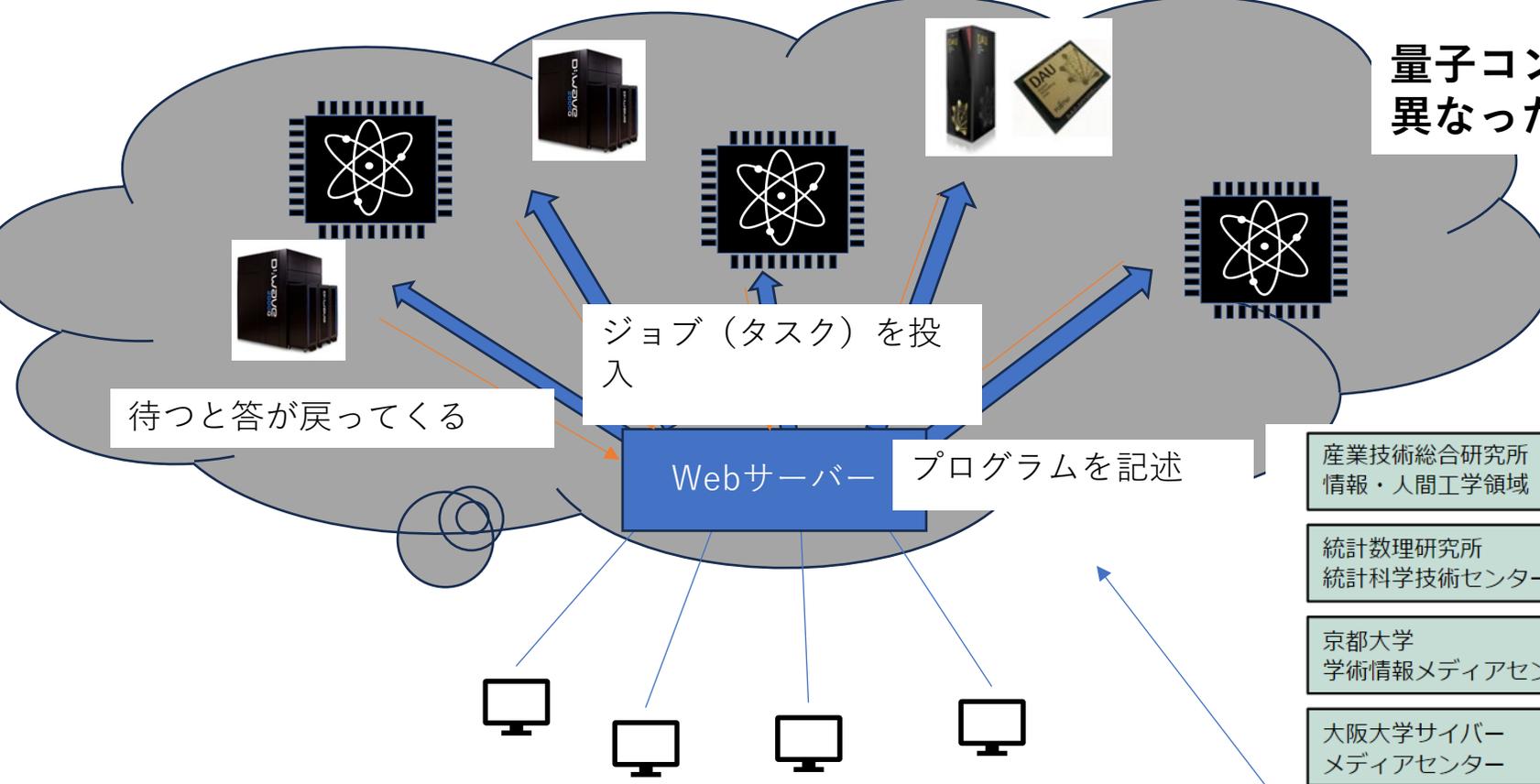


量子コンピュータとHPCとの違い、接続方法

	スーパーコンピュータ	量子コンピュータ
実行時間	ジョブによっては数時間	コヒーレント時間が短いので、本質的に短い。1000shotでも数msec～数秒
入出力データ量	ジョブによっては大量	パラメータと確率密度のみで少量
マルチユーザ	空間分割、時分割利用共に可能	時分割利用のみ

- 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
 - ネットワークを経由して接続：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？
→通常はないがこれで進む研究もある
 - 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？
 - 多分そこまでは必要ないがHPCは必要

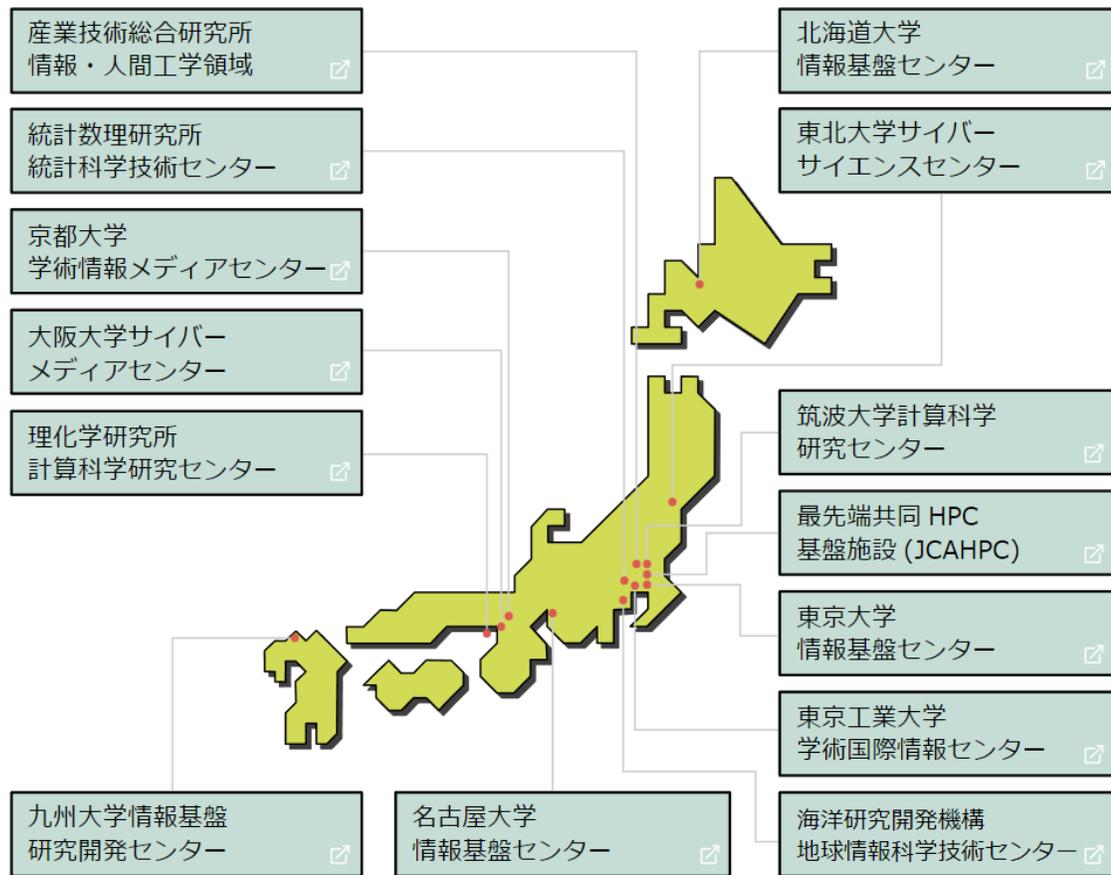
量子コンピュータとスーパーコンピュータは 異なった世界で使われている



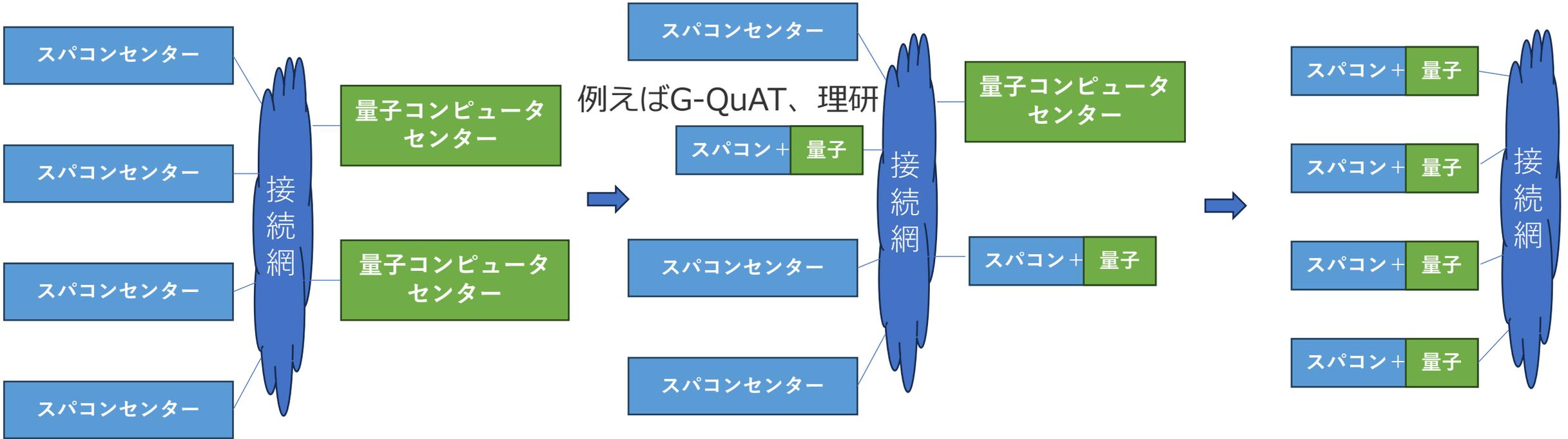
スーパーコンピュータは国の支援する
計算センターで運用し、HPCIなどで
利用する

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

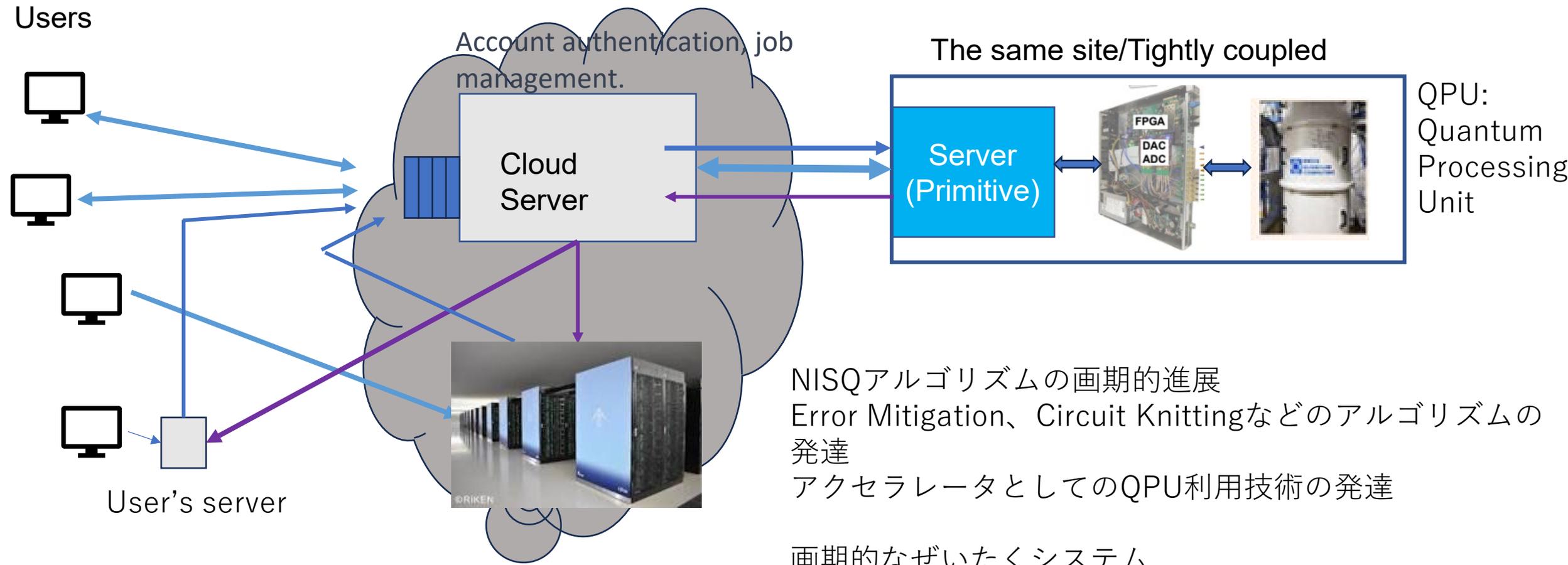
b)様々な構成のセンターを接続

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

スパコンと量子コンピュータの直結システム

The loop between Classical computer and Quantum computer is executed automatically.



JHPC-Quantum: 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

実施者	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
概要	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連携システムソフトウェアを研究開発し、これを用いてこれまでのスパコンのみでは困難だった領域の計算を可能とする量子・スパコン連携プラットフォームを構築する。既存のスパコンのみの計算に対し量子・HPC連携アプリの優位性を実証するとともに、この計算プラットフォームで実行される量子・HPC連携ソフトウェアをポスト5G時代のネットワークで提供されるサービスとして展開する技術を開発する。

1. 開発目的

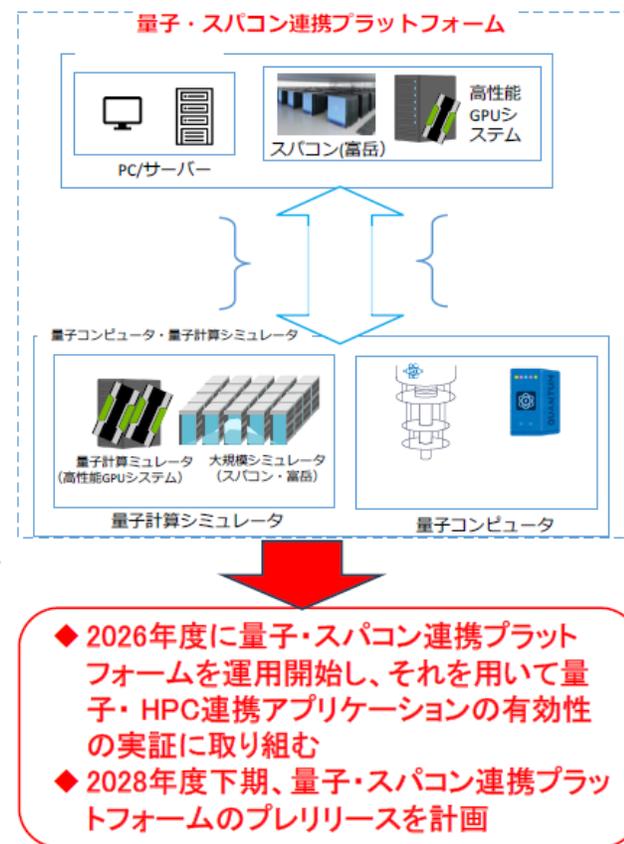
- 量子コンピュータは、従来のコンピュータと全く異なる原理で動作し、情報処理速度の劇的な高速化が期待されるが、現時点では、規模拡大と計算結果の誤り訂正の両立が困難であり、量子コンピュータ単独での実用化には時間を要する見込み。
- 一方で、デジタル化の進展により、情報処理能力の向上が急務であり、量子コンピュータの活用がいち早く求められているところ、古典コンピュータを組み合わせることで活用することが有望視されている。
- 本事業では、世界に先駆けて、量子コンピュータとスパコンを連携利用するためのソフトウェアやプラットフォーム、アプリケーションを開発・構築し、ポスト5G時代で提供されるサービスとして展開する技術としての有効性を実証していく。

2. 開発内容

- 量子・HPC連携ソフトウェア**：スパコンと量子コンピュータを連携させ、最適な計算資源をシームレスかつ効率的に利用するためのシステムソフトウェアを開発。
- モジュール型量子ソフトウェアライブラリ**：アプリ分野に合わせたモジュール型のソフトウェアを整備、量子コンピュータの特性に合わせたエラー緩和処理、回路最適化処理を実現する上位ソフトウェアライブラリを開発。モジュールとして組み合わせることで高度な量子アプリケーションを開発可能とする。
- 量子・スパコン連携PFのクラウド化技術**：事業展開を見据えて、量子アプリケーションの利用を支援するクラウド基盤ソフトウェアを開発。

3. 構築する量子・スパコン連携プラットフォームの構成

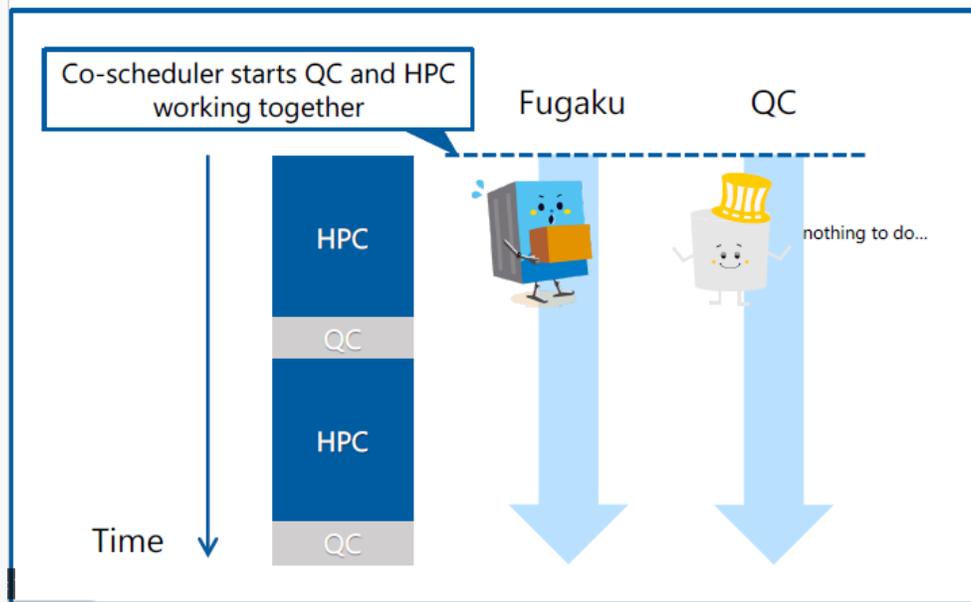
- 理研・計算科学研究センター（神戸）及び（和光）に特性の異なる2種類の量子コンピュータを整備。これらと富岳、及び東大・阪大スパコンと連携したプラットフォームを構築。



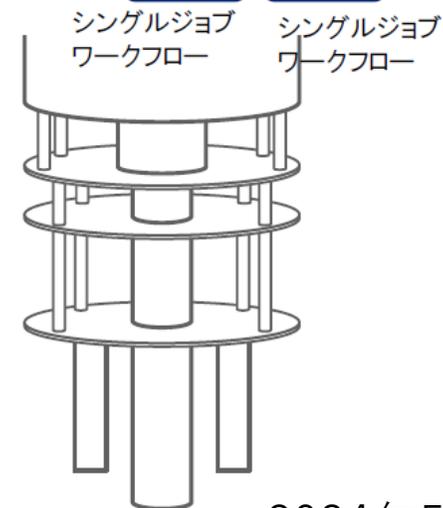
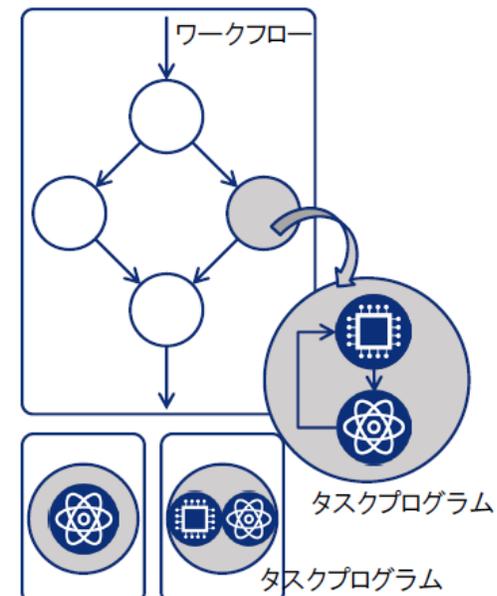
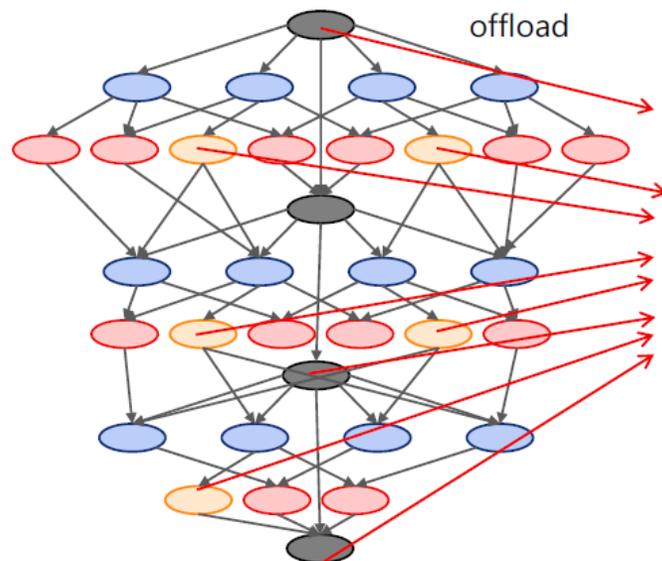
量子HPC連携プログラミングモデルとスケジューリング

- 量子HPC連携のための二階層プログラミングモデルとスケジューリング
 - (第一階層)スパコンおよび量子コンピュータのジョブをタスクとするワークフロー
 - 各々のジョブスケジューラにより各々のシステムの高い利用率が期待される
 - (第二階層)ジョブの内部での細粒度タスクプログラミング
 - 量子とHPCのより密な連携が必要な場合
 - こちらから量子コンピュータに投入されるジョブは最優先とする

粗粒度タスクの場合、コスケジューリング等でQC HPCを同時に開始するよりも個々のシステムのスケジューラに任せた方が高いスループットが期待できる(第一階層)



依存関係が複雑な細粒度タスクの場合、総実行時間やHPC側の待ち時間を軽減するため量子コンピュータへのオフロードは最優先で実行される

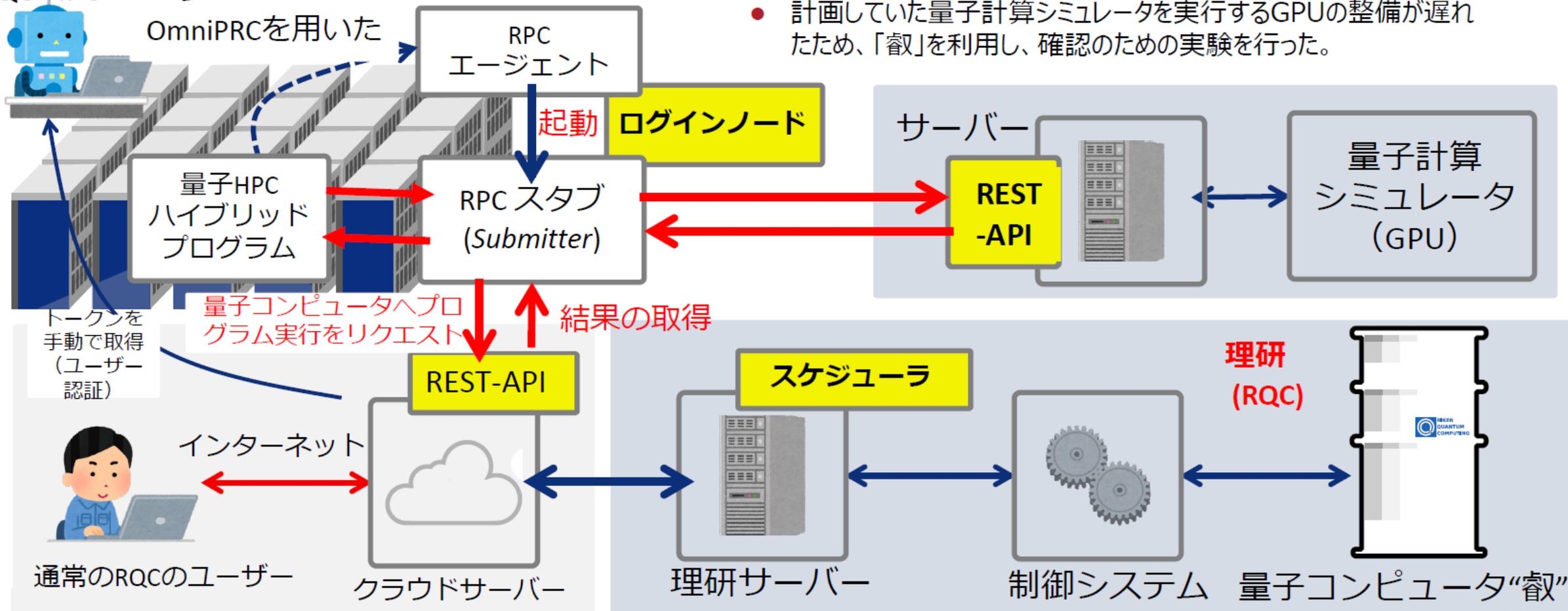


2024年5月報告会より

- 量子HPCハイブリッドプログラムのための遠隔呼び出しの試作を完了した。理研・筑波大が開発した遠隔呼び出しライブラリ(OmniRPC)を利用。

- 試作したライブラリを用いて、理研の量子コンピュータ「叡」の量子回路の実行ジョブを起動するためのREST API(web URLを用いたインターフェース)に接続し、富岳の計算ノードで実行した量子HPCハイブリッドプログラムから、「叡」を呼び出すことができることを確認
- 計画していた量子計算シミュレータを実行するGPUの整備が遅れたため、「叡」を利用し、確認のための実験を行った。

QC-HPC ユーザー



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

まとめ（個人的見解）

- FTQCのマイクロアーキテクチャが重要
 - ムーンショットG6のADとして多くの知識を注入されたためか？
 - 昨年度にも多くの技術が登場したので、報告書に入っていない
 - しかしポスト富岳の調査研究とは少し違う気がする
- JHPC-Quantum
 - チームのメンバが活躍し、役に立つシステムが構築されている
 - 富岳と叡（またはIBMやQuantinuumのQuantum computer）を接続して新しい実用的なプログラムができるかは疑問
- 量子アニーラ
 - 東北大で行われたThe future of computing perspectivesに参加して洗脳された
 - 量子ニューラルネットワーク、量子リザバーコンピューティングなど、量子アナログ計算の研究が面白い
 - 物理学上、トンネル効果による局所解からの脱出が可能なことは間違いない
 - だからと言って、D-Wave型の量子アニーラは、問題サイズのジレンマ（局所解からの脱出が重要になるような大きなサイズでは、トポロジの問題、有効ビット数の問題で動作できない。小さなサイズで他の方法が局所解に入って長時間の実行を必要とするものがあるのだろうか？）
 - 将来の量子アナログコンピューティングは、興味深く重要な研究分野である
- **フラグシップスパコンの調査研究とは独立に、量子コンピューティングを一種のスーパーコンピュータとして継続的に調査し、提言を行うことは必要である**