

<PCCC22パネルディスカッション>  
『量子コンピュータとポスト富岳の連携』

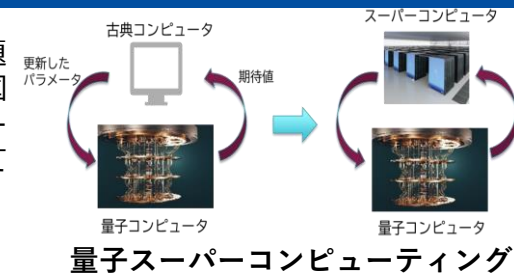
2022.12.6

慶應義塾大学 天野英晴

# 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）

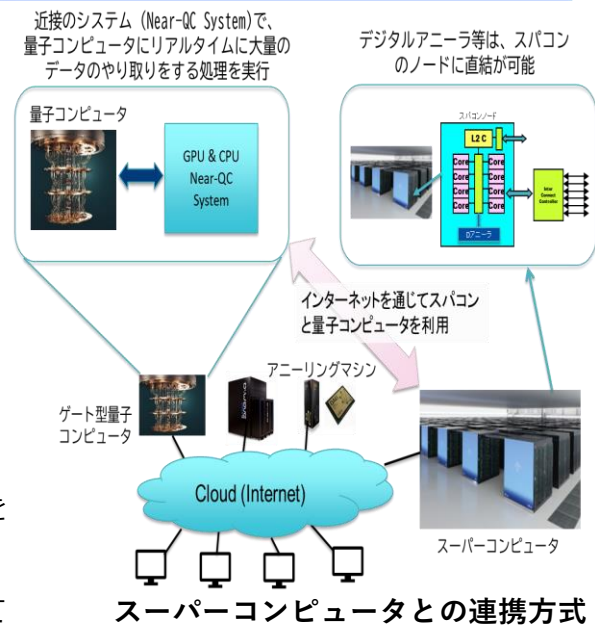
- 量子コンピュータのプログラミング環境、システムソフトウェアを調査し、スーパーコンピュータとの統合環境について検討する。また、スーパーコンピュータによる量子コンピュータのシミュレーションについて調査し、将来の方向性を検討する。

### 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

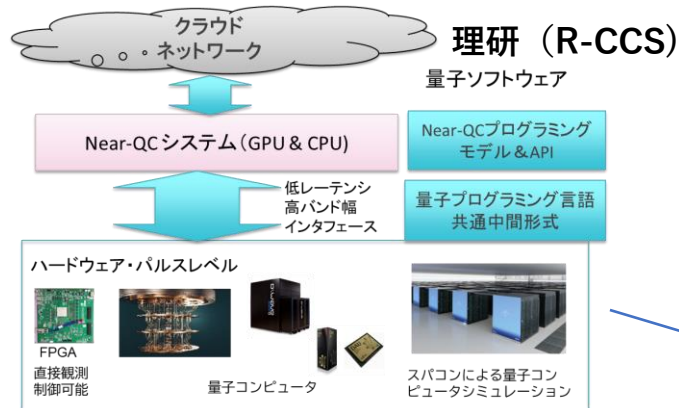


## スケジュール

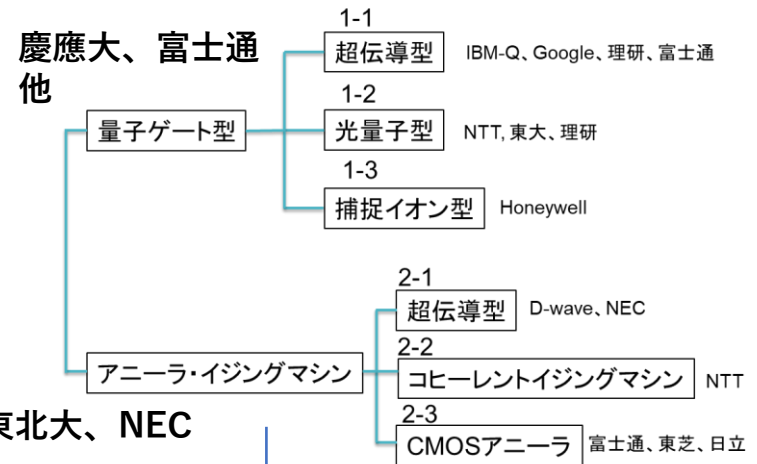
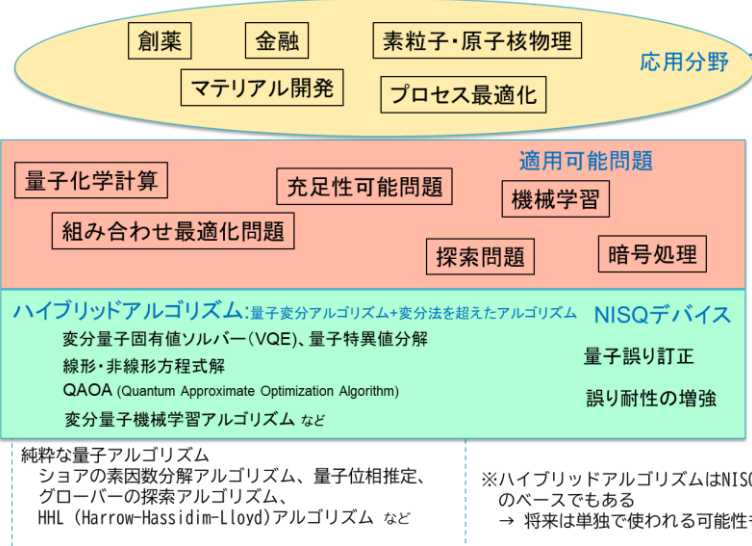
初年度（2022年8月～2023年3月）は現状調査中心、2023年度はスーパーコンピュータとの融合に関する調査研究センター

# 初年度の取組内容（慶應義塾大学：新計算原理）

量子コンピュータのアーキテクチャは右の図に示すように多岐にわたっている。このうちアニーラは、日本の各社が取り組んでおり、商用化が進んでいる。一方、量子ゲート型は、様々な方式が試みられているが、特に量子ゲート型の発達が急速で、これに関連して、アルゴリズムの発達、システムソフトウェア、プログラミング言語の発達も急速である。初年度は、スーパーコンピュータとの関係を考慮しつつ、多方面からこれらを調査し、最終的に評価マトリックスを作る。



理研 (RQC)、九州大学



東北大、NEC

- 評価項目
- A) 性能、量子超越性
  - B) データ量
  - C) 利用可能性
  - D) 将来の発展
  - E) 消費電力

将来の技術発展のスピードも要考慮  
量子ゲート数との関係

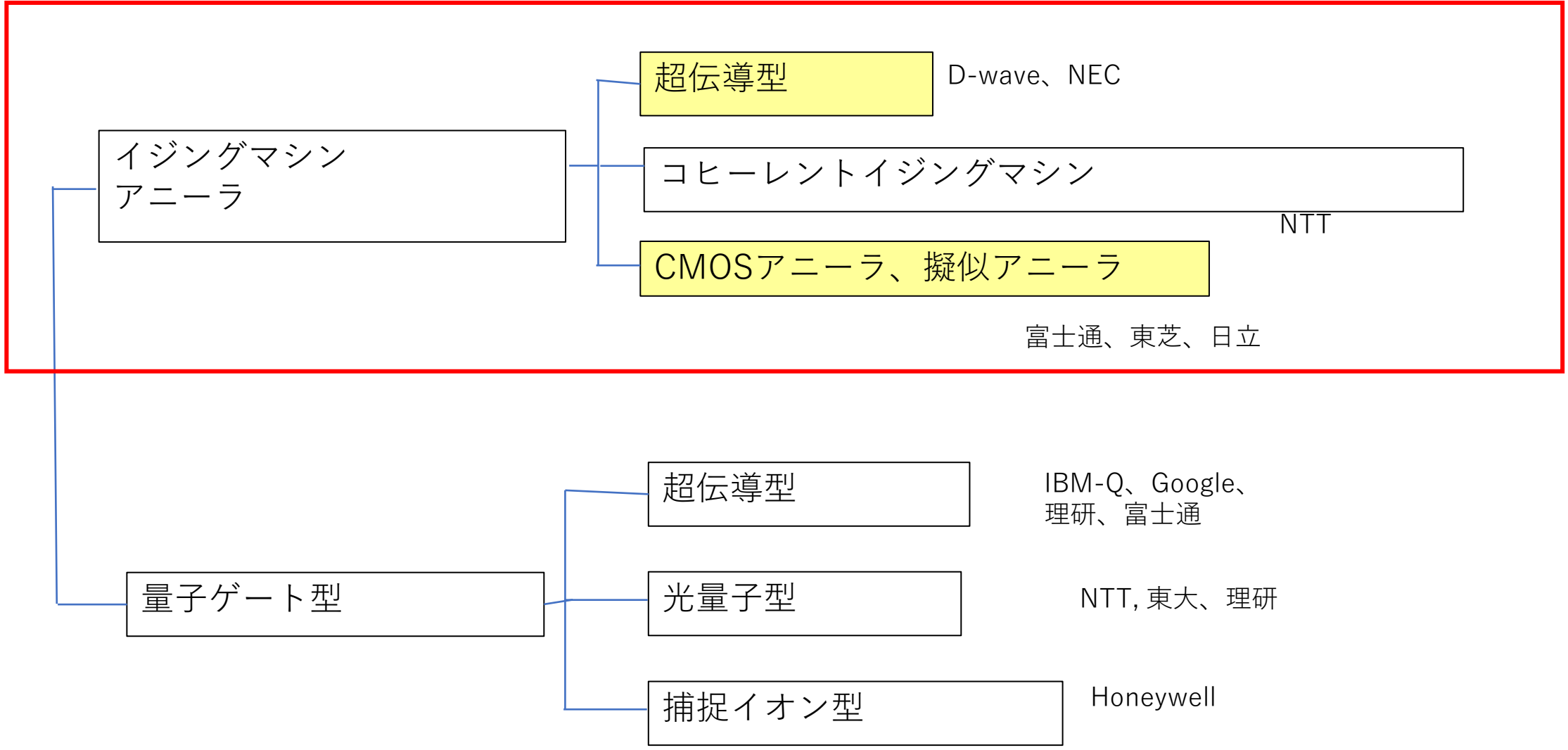
- 適用可能問題
- ①量子化学計算
  - ②組み合わせ最適化問題
  - ③充足性可能問題
  - ④探索問題
  - ⑤機械学習
  - ⑥暗号処理

量子コンアーキ (システム)

	①	②	③	④	⑤	⑥
1-1	Aj... Bj...	Aj... Bj...				
1-2						
1-3						
2-1						
2-2						
2-3						

評価マトリックスを作り、来年度につなげる

ターゲットを明確にして議論しよう：まずアニーラ



# 量子アニーリング方式調査報告 東北・NECグループ

国内・国外の量子および疑似量子アニーリングマシンの調査

Machines	Hardware	Max # bits	# bits fully	Connectivity	Bit precision	Services
D-wave 2000Q	Quantum circuit QPU	2048	64	Chimera graph	Analog 5 bits	Cloud
D-wave Advantage	Quantum circuit QPU	5,760	124	Pegasus graph	Analog 5 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	GPU	100,000+	100,000+	Fully	Digital	Cloud

- ビット数
  - 量子アニーリングマシンD-wave 2000QやAdvantageは数千ビット
  - 疑似量子アニーリングマシンは数万~1千万ビットまで達成
- ビット精度
  - 量子アニーリングマシンは数ビット程度(と言われている)
  - 疑似量子アニーリングマシンは32ビットや64ビットが主流
- 実用の観点では、疑似量子アニーリングマシンが優勢

## いろいろ疑問

- 超伝導型アニーラ（D-Wave）はメリットがあるのか？
  - マシン単体では優位性があるかもしれない。通信に掛かる時間を含めた実際はどうか不明
  - 超伝導型アニーラ単体をスパコンに接続するのは、性能的に意味がなさそう
    - 現状GPU単体と勝負しているので、
- アニーラ専用のDSAをスパコンのアクセラレータとして装備する価値はあるのか？
  - アニーラ専用DSAはエッジ分野では有効、しかしスパコンのアクセラレータとしてならば、GPUなどの汎用アクセラレータの方が有利？
    - 汎用アクセラレータの方が他の用途にも使える
  - ならばアニーリングは、汎用アクセラレータ上のアルゴリズムとして考えた方がいいの？
- スパコンの各ノードのアクセラレータで巨大並列アニーリングを行うといいことがあるのか？
  - 単純に並列数を稼ぐ
  - ハイパーパラメータ調整を並列に行う
  - 適応型アルゴリズムの可能性
  - 上記により、スパコンの各ノードのアクセラレータを使って巨大並列アニーリングを行うプログラムは、評価用のプログラムとしてあり得るかもしれない
- アニーラがポスト富岳（2030年くらい）までに大発展を遂げる可能性はあるのか？
  - エッジ用のチップは続々開発されているが、スパコンの相手としては可能性が低いのでは？
  - しかしこれはわからない
- 現時点で早急に答えを出さず、東北大ーNECグループのさらなる評価を待ちたい。

ターゲットを明確にして議論しよう：次は量子ゲート型

イジングマシン  
アニーラ

超伝導型

D-wave、NEC

コヒーレントイジングマシン

NTT

CMOSアニーラ、擬似アニーラ

富士通、東芝、日立

量子ゲート型

超伝導型

IBM-Q、Google、  
理研、富士通

光量子型

NTT、東大、理研

捕捉イオン型

Honeywell

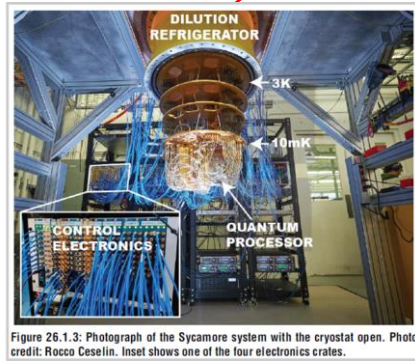
# 使える量子コンピュータへの道

使える量子コンピュータの時代は  
本当に来るのか？

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

Googleの路線  
AIの利用



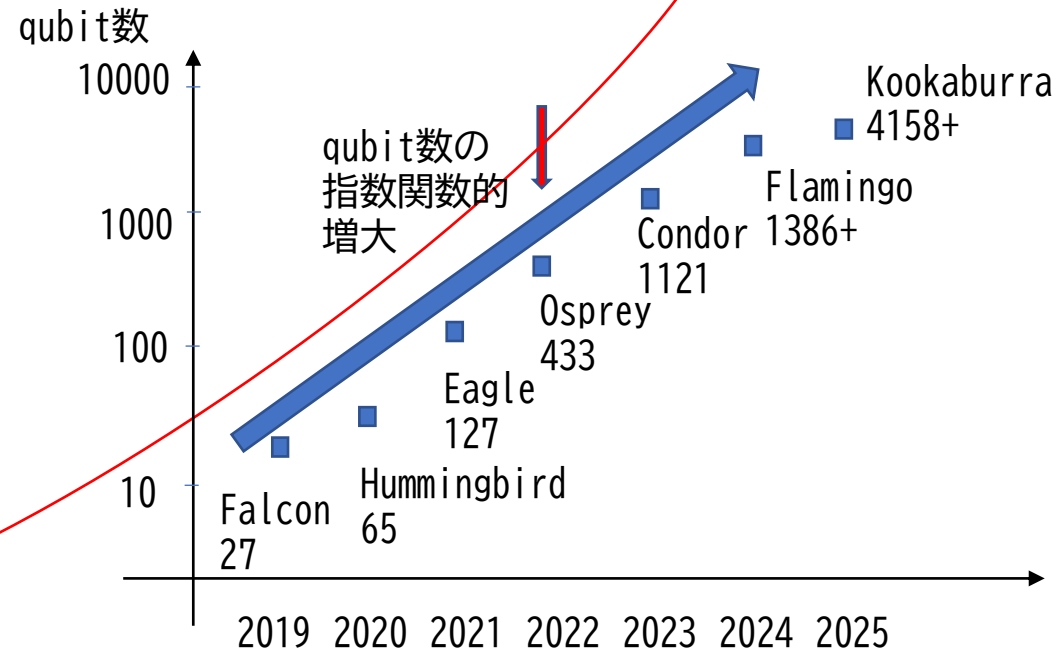
NISQアルゴリズムとFTQC  
アルゴリズムは分離してきている

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



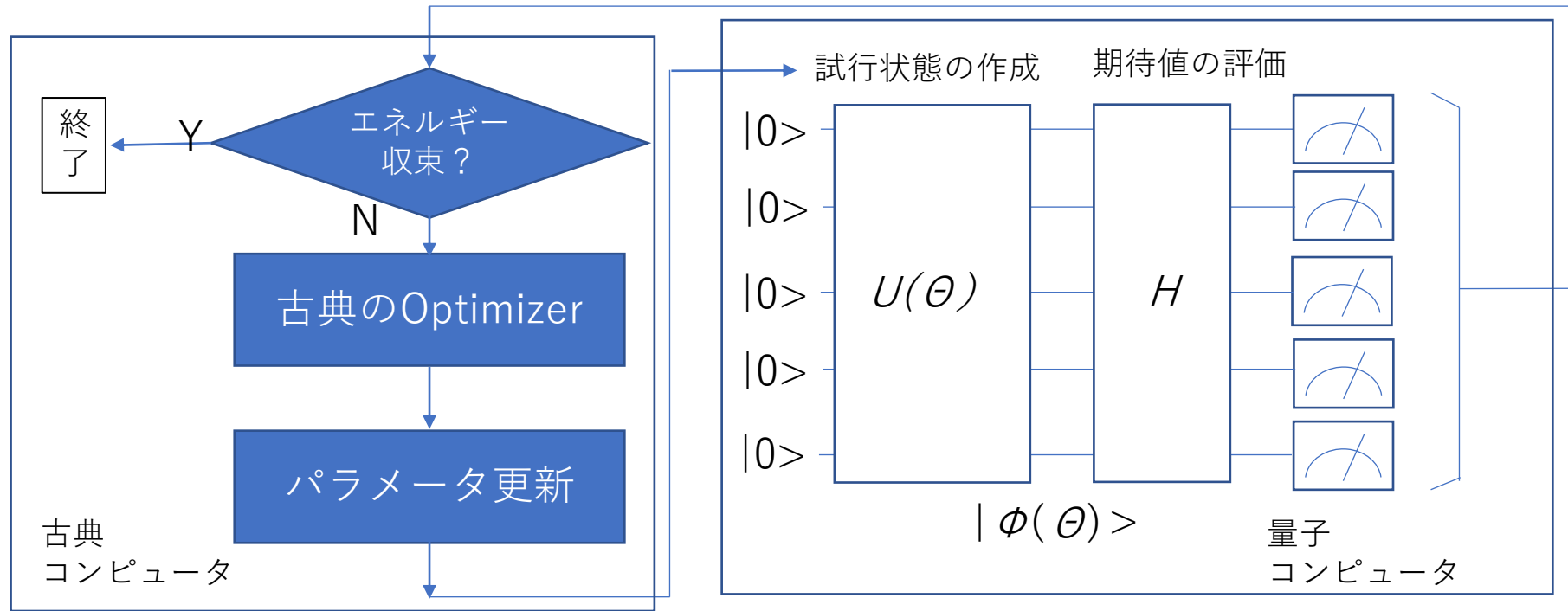
IBMのロードマップ (2022) より



# NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) コンピュータ 九大G

ノイズや操作のエラーを前提にした中規模量子コンピュータとそのアルゴリズム

- 現実的、漸進的なアプローチ
  - 量子、古典のハイブリッドが有効
- VQE (Variational Quantum Eigensolver) アルゴリズム：量子と古典の実行を交互に繰り返して、ヒューリスティックな探索を行なう
- ハイブリッドの優位性 (例：量子化学計算)
  - 既存の古典の技術から導かれる結果を利用することによって、「イノベーションのジレンマ」を回避
  - 長いプログラムを短いプログラムの繰り返しに分解→正しく実行できるだけの命令数で効果的に利用
  - 少ない数の量子ビット数で表現できるが古典的には難しい問題 (化合物) を選ぶことができる
  - 小さな化合物であっても、古典で計算した基底状態のエネルギーは実験で観測した値より非常に大きくなっているため、分かりやすい成功の指標がある



# アプリケーションの調査 理研RQC G

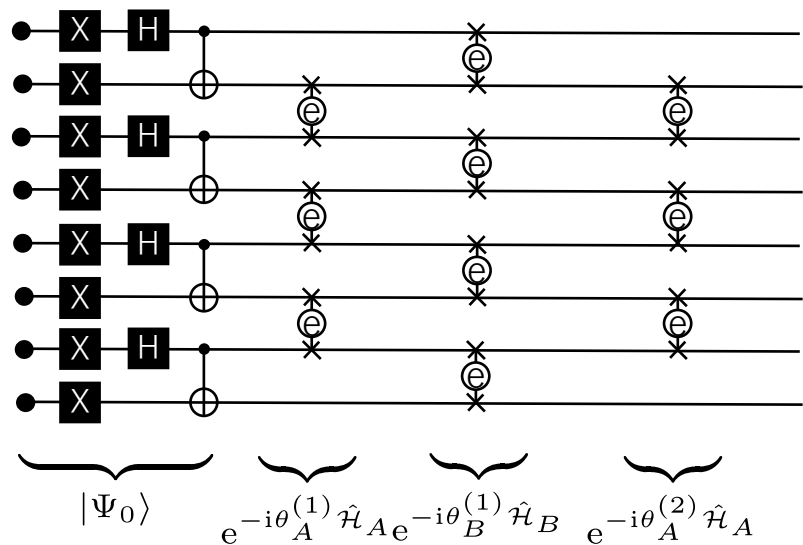
## 量子-古典ハイブリッド計算においてキラーアプリとなりうるアプリケーションの調査

量子多体問題や量子最適化問題で有用とされている QAOAの量子-古典ハイブリッド計算を実行するためのプログラムを作成

モデル： 量子多体問題（ハイゼンベルグ模型など）

使用言語・ライブラリ： Python・Qiskit

回路の例：

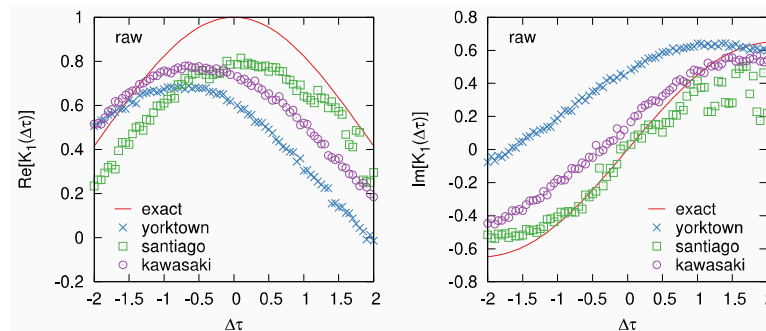


実機での計算例： IBM-Q@yorktown, @santiago, @kawasaki

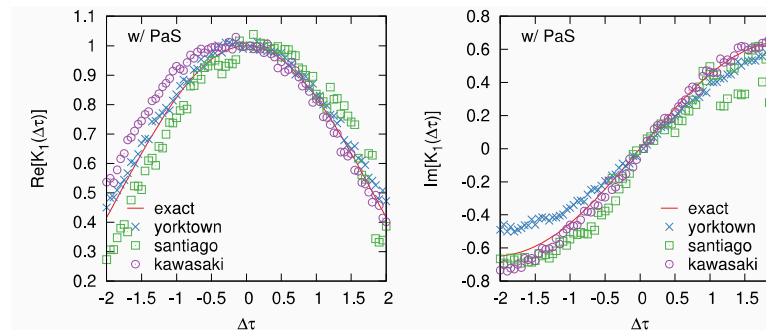
$$K_1(\theta_A^{(1)}, \theta_B^{(1)}) = \langle \Psi_0 | e^{-i\theta_A^{(1)}} \hat{H}_A e^{-i\theta_B^{(1)}} \hat{H}_B | \Psi_0 \rangle$$

$$K_1(\Delta\tau) = K_1(\theta_A^{(1)} = \Delta\tau, \theta_B^{(1)} = \Delta\tau)$$

Error mitigation なし

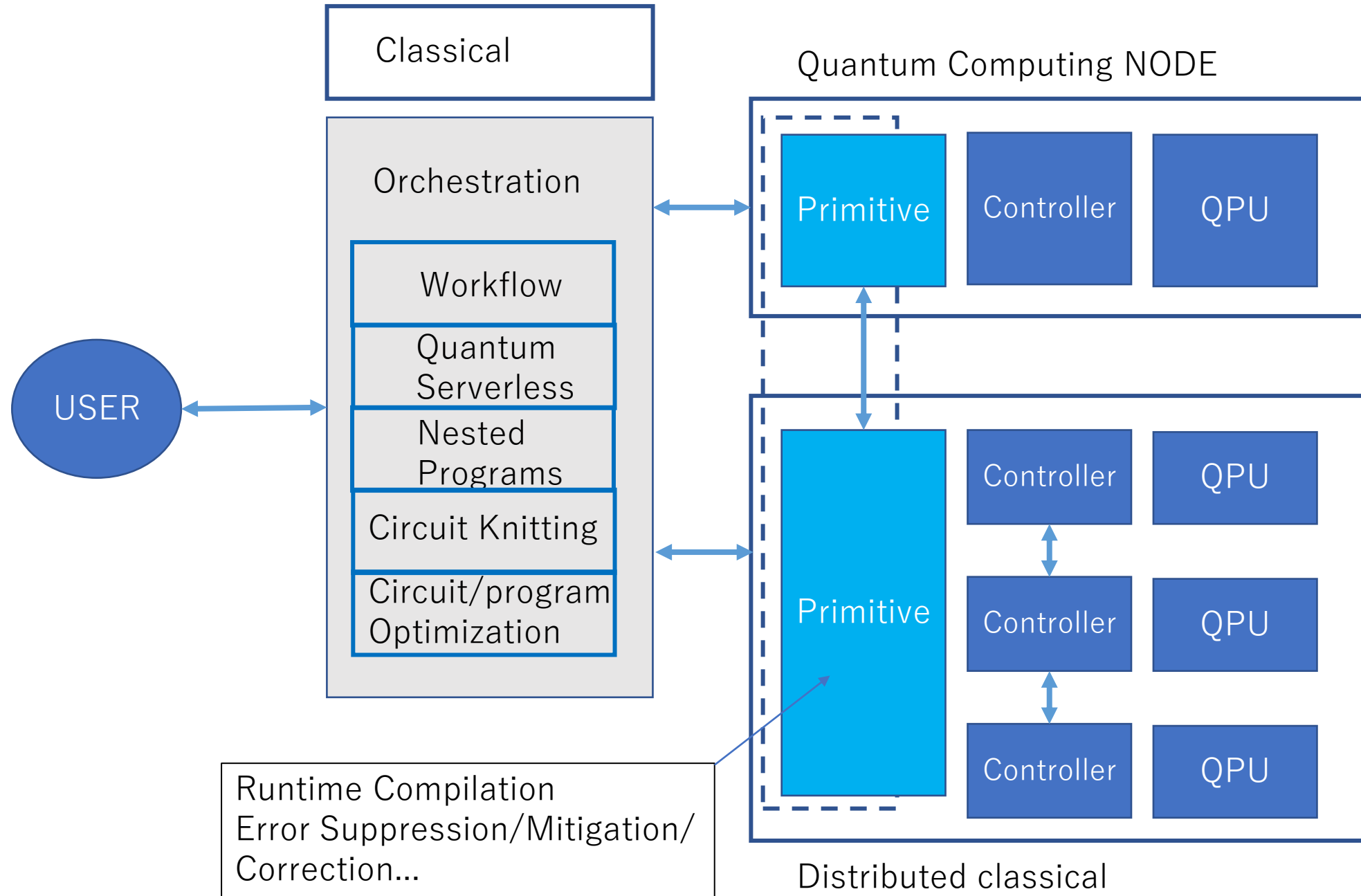


Error mitigation あり



## エラー緩和 / 複数量子コンピュータの利用

- Error Mitigation
  - 量子コンピュータのControllerの近くで、結果の精度を上げる方法
  - Probabilistic Error Cancellation
    - 様々な向きでエラーを測定し、「重力」を打ち消す
  - Zero noise extrapolation
    - 量子回路を深くすることでノイズを増やし、逆方向に補間することでノイズのない状態を求める
- 複数の量子コンピュータを利用
  - Circuit Knitting
    - 大規模な回路が局所的に動く場合、小規模な回路を様々なパターンで動かした結果を繋ぎ合わせることで、大規模な回路の結果を得る方法→複数の量子コンピュータと古典コンピュータの利用
  - Entanglement forging
    - 電子構造問題をN-Qubitで解く回路をN/2に分解
    - 複数回量子コンピュータを働かせ、結果から基底エネルギーを合成



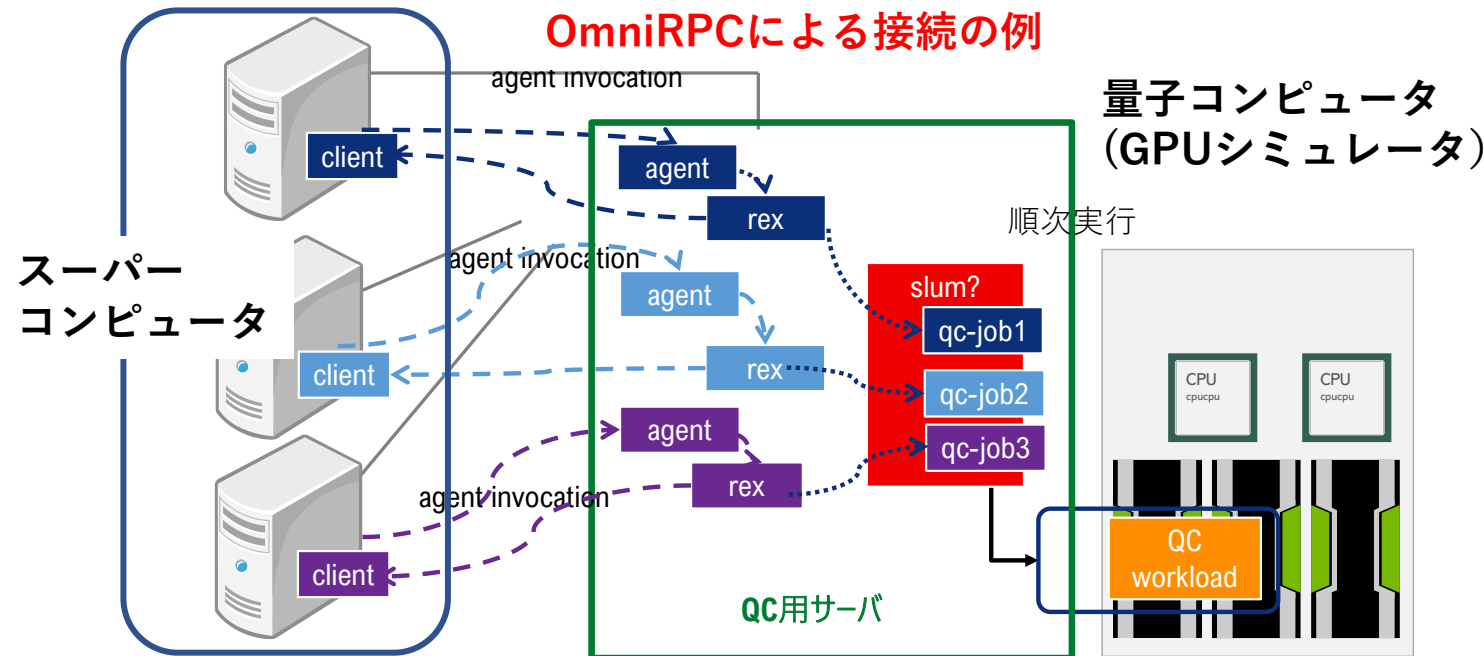
## 量子スーパーコンピューティング向けシステムソフトウェアの調査・検討

### ● 量子コンピュータ (QC) のためのプログラミング言語の調査

- ✓ IBM Q Qiskitの調査
  - 新川崎 QIIのIBM Qへアクセスし、実機にて調査中
- ✓ Qibo QCプログラミング環境の調査
  - 開発元のミラノ大学 Stefano Carrazza やシンガポールIHPCの研究者との議論を行い、調査。
- QC用アセンブラ言語QASMの調査
  - 低レベルのQC用の共通コードに用いるアセンブラ言語QASMを調査。

### ● 量子コンピュータ (QC) とスーパーコンピュータ (SA)の統合のためのミドルウェアの調査・検討

- ✓ RPC(OmniRPC)で、接続する方法を調査・検討、QCに対するAPIを設計
- ✓ REST APIで外部から接続利用する方法を調査



# 楽観的な理由

- NISQアルゴリズムの進展、FTQCの開発共にqubit数の増大、忠実度の改善が必要
  - 超伝導ゲート型の量子コンピュータの発達はIBMのロードマップに乗っている
    - 2022年Osprey 433 qubit
    - qubit数、忠実度は毎年改善されている
    - ロードマップ通りに行けば、2030年には10000qubitに達し、FTQCがある程度は可能になる
      - もちろん障壁はある、どこで表面符号の誤り訂正を使うのか？など
      - 超低温半導体、光ネットワークの利用、FPGAの利用が必要
    - その前にNISQアルゴリズムで現実的な問題が解けるようになる可能性がある
  - Error Mitigation技術も進歩するだろう
  - 回路分割、統合の技術も進歩するだろう
- **時間の問題だが、どこの時点になるかは努力次第**
  - しかし、2030年ではまだまだ現実的な量子コンピュータに手がかかるかどうかの時代だと考えられる
    - 量子コンピュータをポスト富岳のライバルとして考える必要はないだろう
    - 量子コンピュータがあるからホスト富岳は要らない、ということにはならない
- 協調の方式
  - NISQ：データをやり取りしながら一つの問題を解く
  - FTQC:量子コンピュータをスパコンのアクセラレータとして使う

## ではスパコンと繋ぐ意味はあるのか？

- 現在、NISQアルゴリズム（VQE、QAOAなど）の研究者は、量子-古典融合環境を使っていない
  - 量子コンピュータが混雑していて使うまでの時間が長い
  - 古典コンピュータ部分の計算量が小さい
    - 多くは自分のPCを利用している
- では、繋ぐ環境を作る必要はないのか？
  - 現在、環境がないからアルゴリズムができないだけ、潜在的には存在するので、まずは繋いで、量子-古典間を一体して動作させる環境が必要
  - 計算量が大きい問題もある
    - Classical Shadow
- 量子-古典間のデータ転送量、必要とされる遅延は？
  - アルゴリズムにもよるが、現状はさほどデータ量は大きくはない
  - Orchestrationのレイヤならば、遅延も通常のヘテロジニアスサーバ環境同様に接続できれば良いのでは？
- では富岳（ポスト富岳）とつなぐ必要はあるのか？
  - Orchestrationのレイヤは相当な計算能力が必要だが、フラグシップスパコンでなければならないかというところでもない。
  - FTQCが現実的になれば、ポスト富岳のアクセラレータとして使える可能性が生じる
    - インパクトが大きい

今回の話題ではしよったのは、

- FTQCに向けて
  - エラー訂正アルゴリズム
  - 数万というQubitをどのように扱うか
- 量子コンピュータシミュレータ
  - スパコンに対する期待としてもっとも高い
  - 状態ベクトル方式は必要メモリ量が大きく、アクセス局所性がないのでスパコン向きの問題