



量子コンピュータシミュレーション ～「富岳」を使って 量子コンピュータ用アプリを 先行開発する～

研究・開発機関 : [理化学研究所 計算科学研究センター](#)
[離散事象シミュレーション研究チーム](#)
 利用施設 : スーパーコンピュータ「富岳」
 計算規模 : 「富岳」49,152ノードを使った
 46qubits量子回路シミュレーションと、
 41,984ノード、40qubitsの回路を41組、合計1640 qubits 使った
 量子変分アルゴリズムシミュレーション
 利用ソフトウェア : braket (<http://github.com/naoki-yoshioka/braket>)

Before

- 「京」で65,536ノードを使った倍精度45qubits (quantum bit: 量子情報の最小単位)のシミュレーションは2019年発表当時、計算速度に関して状態ベクトル法による世界記録でした。
- しかし、1ゲートのシミュレーション処理に、44qubitsまでは1秒から2秒、45qubitsでは6秒程度を要していました。

After

- 状態ベクトルを一層効率的に格納するアルゴリズムの開発・実装を合わせることにより、「富岳」で49,152ノードを使った倍精度46qubitsのシミュレーションを実現しました。
- 40qubitsまでは1秒程度以下、46qubitsでは3.5秒で1ゲートのシミュレーションを実現し、また、量子系の変分計算への応用も実現しました。

背景と目的

研究・開発が加速してきた量子コンピュータ(QPU)は最適化をはじめ多くの問題に対し、これまでのスーパーコンピュータの限界を超える性能が期待されており、防災・安全をはじめ社会・経済の種々の課題への光明となると考えられています。これまでに実現されたQPUの性能はまだ実用化への途上で扱える量子ビットの数や安定な動作を確保できる環境は限られていますが、多くの人知と資源とが集約されればQPUの実用化も案外近いとも考えられます。

その際、これまでのスーパーコンピュータの開発と同様、何のためにどういうQPUを使うのかという明確なビジョンの確立を同時進行で進める必要があります。そのためにはQPUなしでQPUの動作を再現するシミュレーション技術が不可欠です。

このシミュレーションを現在のコンピュータで実現するためには、N個の量子ビットを表す 2^N 個の複素数を効率的に扱う必要があります。そこで、大規模データを高い信頼性で効率的に処理できるスーパーコンピュータの活用に挑戦してきました。「京」で世界記録級のシミュレーションを実現した経験を活かし、「富岳」の限界を実現するシミュレーションソフトウェアを開発し、実用が期待されている量子多体系の状態計算に応用しました。

利用成果

「京」を使って開発した並列計算機用量子コンピュータシミュレーションフレームワーク「braket」では、使用するノード数が2のべき乗個かつ各ノードに収納するデータの数が2のべき乗個に限られていました。このため利用できるのは、例えば「京」では $2^{16}=65,536$ ノードを使って各ノードに8GB (倍精度29qubits) 分のデータを配置したシミュレーションに限られ、倍精度で45qubitsの量子回路が最大でした。

一方、「富岳」では同様な手法でも $2^{17}=131,072$ ノードを使い、各ノードに16GB分 (倍精度30qubits分) を格納して47qubitsのシミュレーションが可能でした。この制約をさらに緩和するデータ格納アルゴリズムを開発し、braketに実装して実行に必要なノード数の削減を実現しました。

図1に46qubitsまでの量子ゲート回路について、1ゲート当たりの「富岳」での平均処理時間を示します。3色のそれぞれは、データの収納方法が異なる3通りの場合を示しています。赤と緑の場合、40qubitsまでは1秒程度以下、46qubitsでも3秒前後と、「京」(45qubitsで6秒程度を要した) から半減しています。緑の場合、赤よりもノード当たり多くのデータを収納しています。例えば45qubitsの場合、赤で示した収納方法では32,768ノードを使っていますが、緑では24,576ノードで済んでいます。「富岳」を20時間使った場合、2万から20万ゲート程度までを処理できるようになります。また、これは倍精度複素数を使った場合の結果ですが、シミュレートする量子回路で必要とする精度が有効数字1~2桁の場合は、回路の深さが10万程度であれば単精度複素数で十分なので、シミュレートできる最大量子ビット数は1つ増えて49qubitsになります。同様に半精度あるいはバイト精度複素数で済む回路の場合は50~51qubitsまで扱えるようになります。

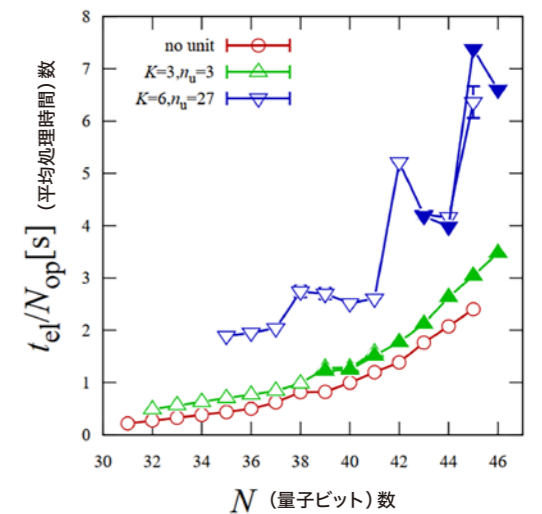


図1 量子回路の量子ビット数 N を増やした際の、1ゲートのあたりの処理平均時間 (秒)。3種類のデータ格納方法での結果を示す。

このシミュレータによる処理結果を図2に示します。量子スピン系の基底状態を量子変分法(VQE)により求める問題を、「富岳」によるパラメータ最適化とbraketによる量子状態計算とを交互に繰り返して収束させるというもので、最大40スピンからなる量子ハイゼンベルクスピン鎖について、40qubitsの量子回路を41組、異なる変分パラメータでシミュレートし、回路間の物理量期待値を求めています。全部で40qubits×41回路=1640qubitsを状態ベクトル法によりシミュレートしたことになります。

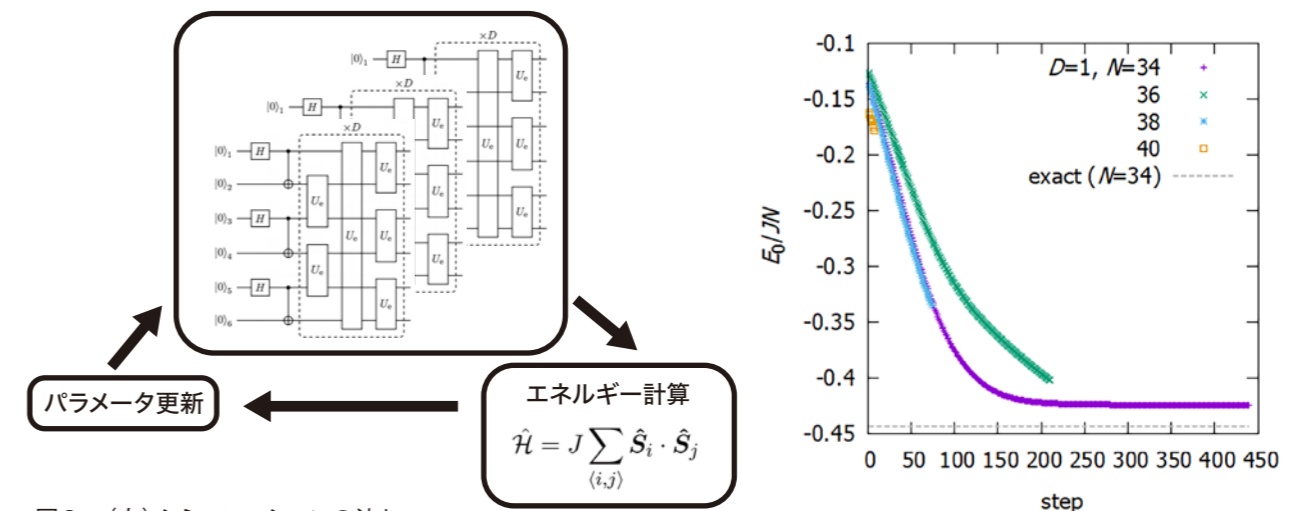


図2 (左) シミュレーションの流れ (右) 34から40スピンのスピン1/2量子ハイゼンベルクスピン鎖の基底状態のエネルギーの量子変分計算が収束する様子。Nはスピンの数を表す。

文責 理化学研究所 伊藤 伸泰