

項目 6 量子計算シミュレーターの高速化・高機能化

伊藤伸泰 吉岡直樹 青木尚登 柚木清司 白川知功 Rongyang Sun

RIKEN Center for Computational Science

Collaboration with Anastasiia Butko(LBNL), Thom Popovici(LBNL), Artur Garcia Saez(BSC)

braket: A open-source quantum computer simulator for parallel computer coded with C++
<https://github.com/jhpc-quantum/RIKEN-braket>

1. 状態ベクトル法シミュレーター

- 1-1. 「富岳」はじめ大並列スーパーコンピューター用“RIKEN braket”の開発
 - ・高速化・高機能化
 - ・ユーザーとのコラボレーション

1-2. GPUクラスター用シミュレーターの開発

2. テンソルネットワーク法シミュレーター

実施項目⑥ (理化学研究所)	2023年度	2024年度	2025年度	2026年度	2027年度	2028年度
量子計算シミュレータの高速化・高機能化						
(1) 状態ベクトル法の量子計算シミュレータの開発	設計・検討	実装・動作試験 遠隔手続き予呼び出しとの統合GPUシミュレータでのテスト完了	性能評価 量子スパコン連携プラットフォームでの動作確認	評価・改良	評価・改良 量子HPC連携アプリケーションでの有効性の確認	成果・とりまとめ
(2) テンソルネットワーク法状態ベクトル法の量子計算シミュレータの開発		プロトタイプ実装完了	スパコンでの動作確認 量子スパコン連携プラットフォームでの動作確認	評価・改良 量子HPC連携アプリケーションでの有効性の確認	評価・改良	成果・とりまとめ

1. 状態ベクトル法シミュレーター

1-1. 「富岳」はじめ大並列スーパーコンピューター用 “braket” の高速化・高機能化

- ・ゲート融合の開発・実装
- ・回路分割法の開発
- ・オブザーバブル評価の実装着手
- ・ユーザーとのコラボレーション

- Gate fusion
- Multi circuits
- Classical variables
- Expectation value
- Labels and jump operations

```

CIRCUITS 3
QUBITS 8

BEGIN FUSION
H 9
CU1 9 8 1.5707963267948966
CU1 9 7 0.7853981633974483
H 8
CU1 9 6 0.39269908169872414
CU1 8 7 1.5707963267948966
CU1 9 5 0.19634954084936207
CU1 8 6 0.7853981633974483
:
END FUSION

BEGIN CIRCUIT 1
H 6
EZ 4 1.5707963267948966
END CIRCUIT

BEGIN CIRCUIT 2
H 6
EZ 4 0.39269908169872414
END CIRCUIT

```

1-2 GPUクラスター用シミュレーターの開発

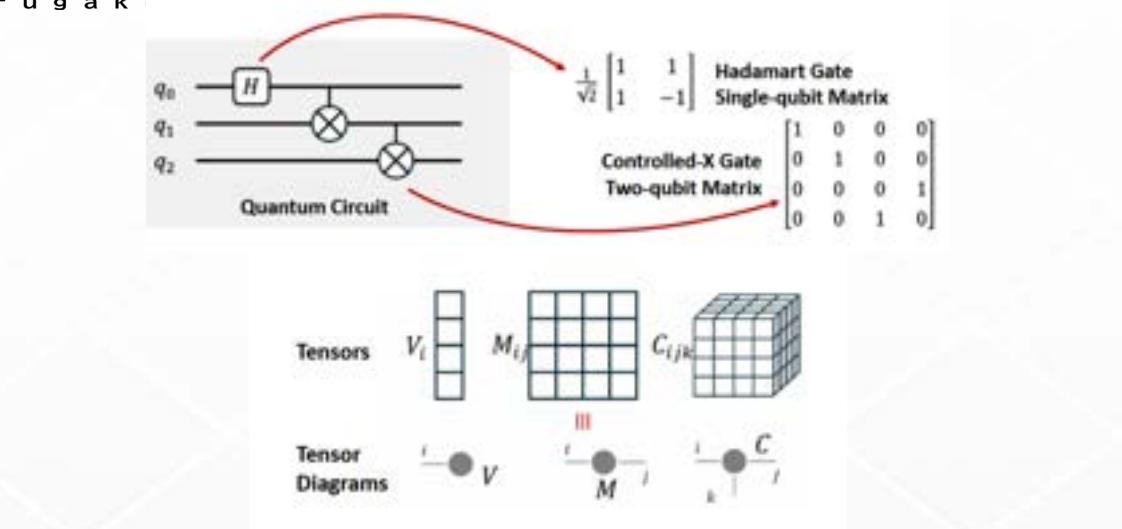
- ・基本的なゲートを実装、QASM3での動作

A100、Blackwell ではノード内（35qubits位まで）では「富岳」よりも一桁弱速い。

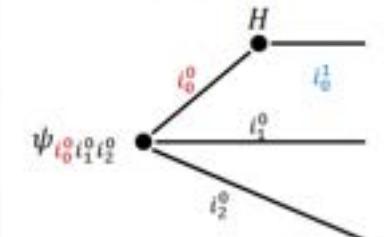
InfiniBandでの複数ノード（35qubits位をこえる）では「富岳」が相当に速い。

特に40qubits当たり以上で大きな差。

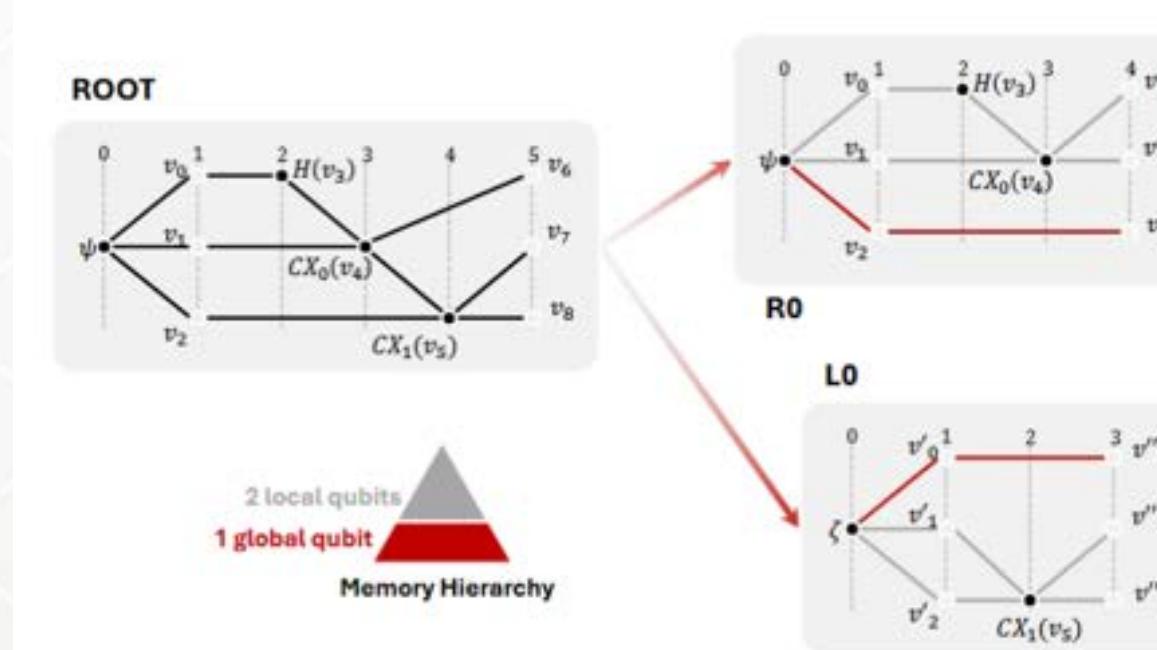
- ・データ転送の最適化に関わる知財申請中



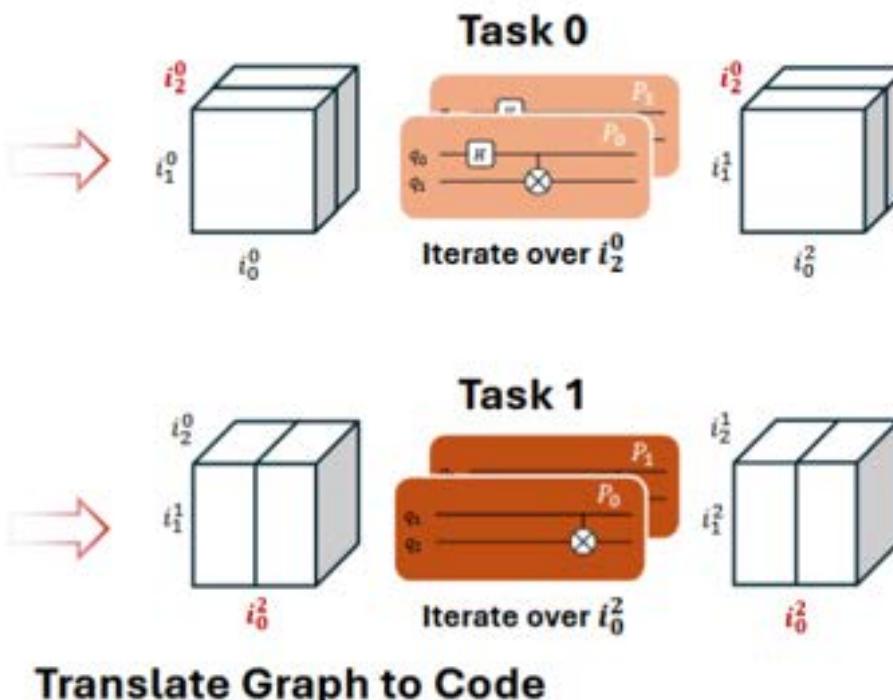
Hadamard on qubit 0

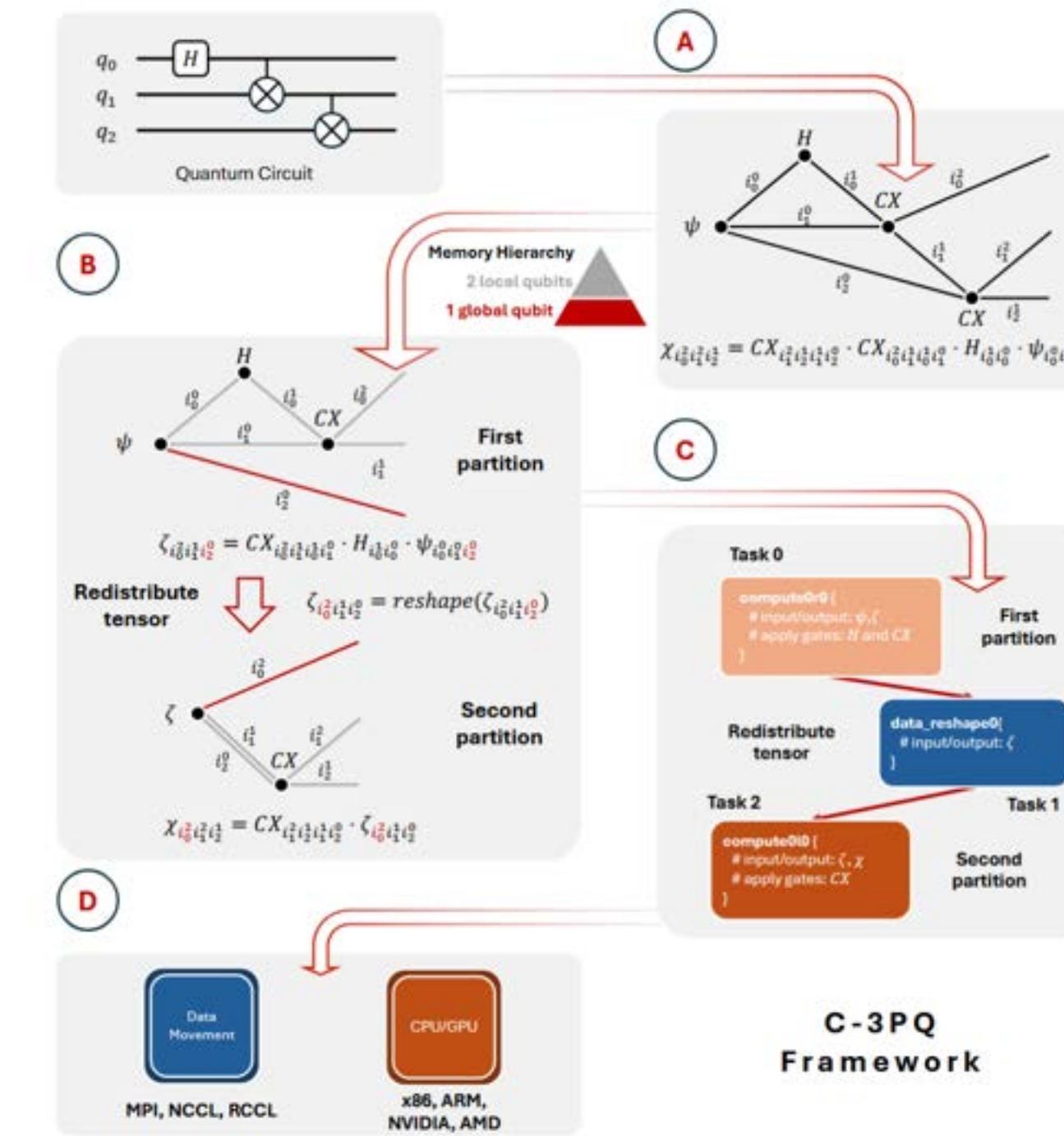


T.Popovici , A.Butko, N.Yoshioka and N.Ito, "C-3PQ: A Closeness Centrality-based Circuit Partitioner for Quantum Simulations", in preparation.

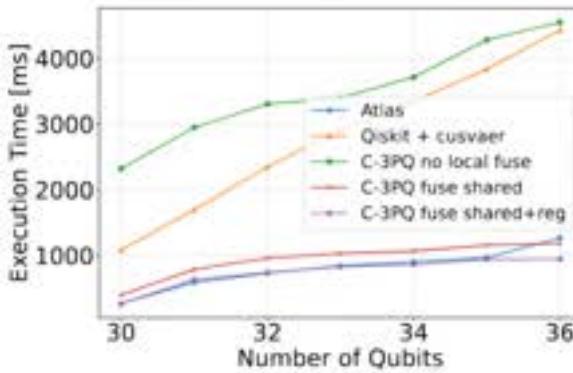


Pre-order Traversal of the Partitions

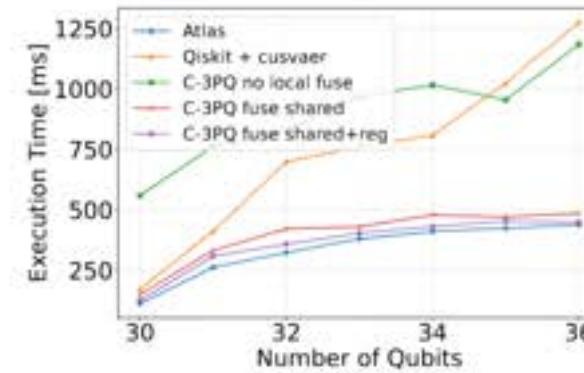




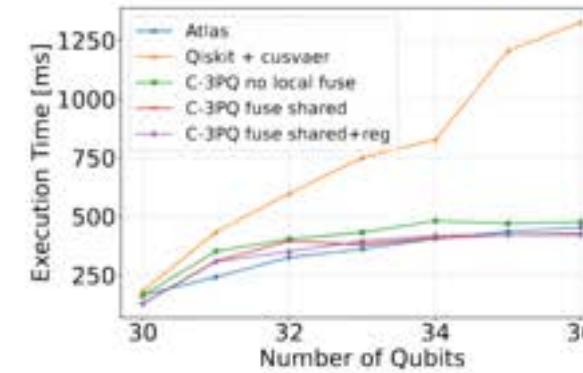
C-3PQ + ゲート融合によるシミュレーション高速化



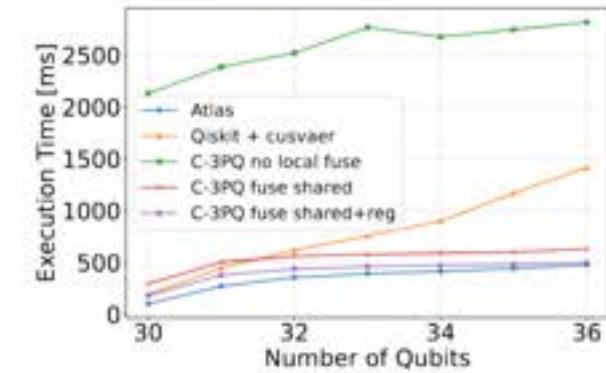
AE Algorithm



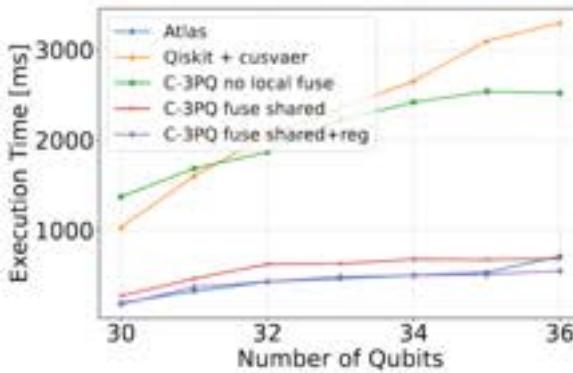
DJ Algorithm



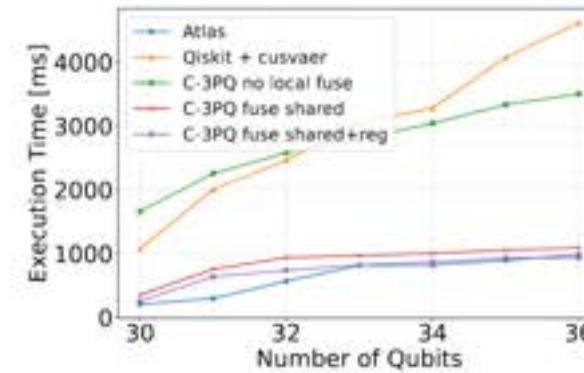
GHZ Algorithm



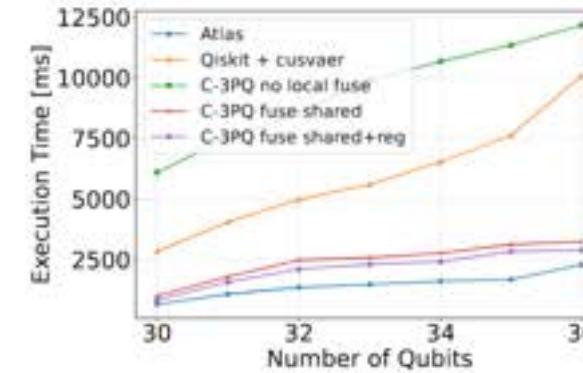
Ising Algorithm



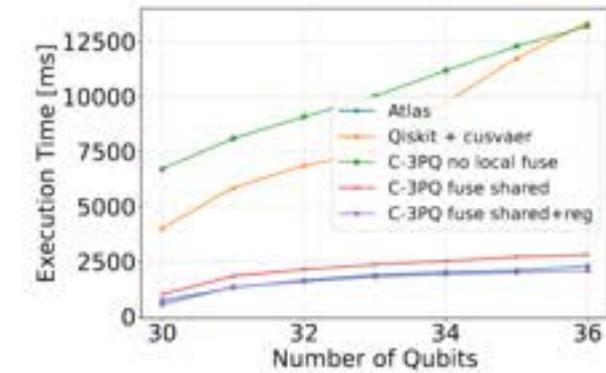
QFT Algorithm



QPE Exact Algorithm

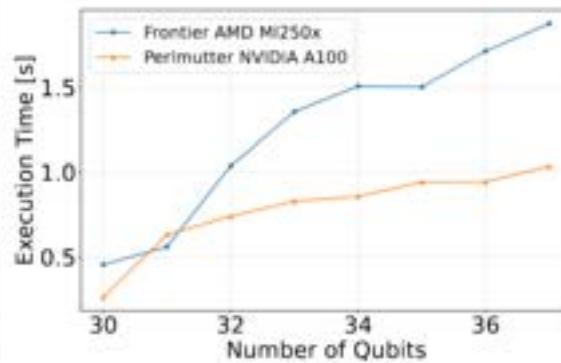


SU2 Random Algorithm

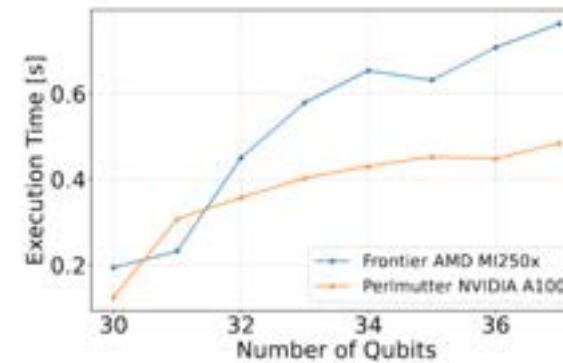


VQC Algorithm

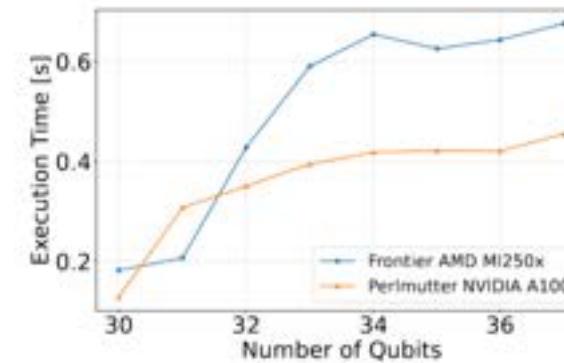
Frontier AMD MI250x と Perlmutter NVIDIA A100 との性能比較



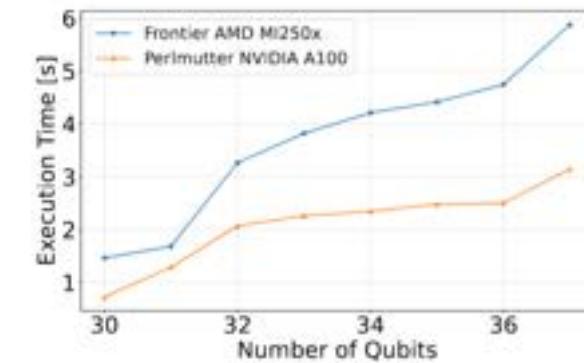
AE Algorithm



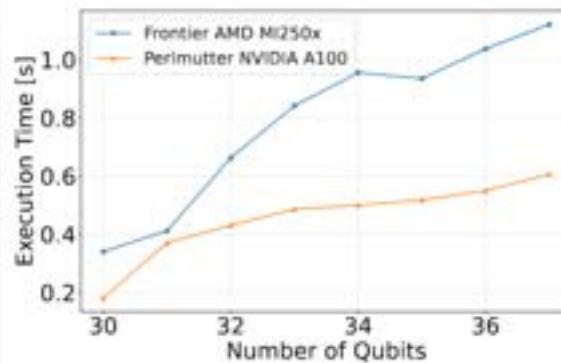
DJ Algorithm



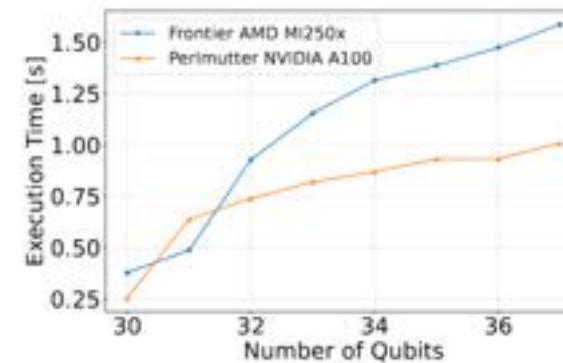
GHZ Algorithm



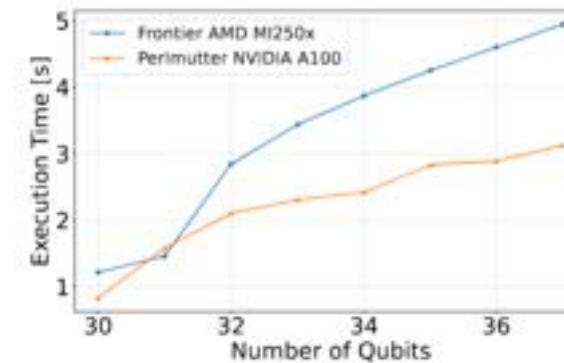
Ising Algorithm



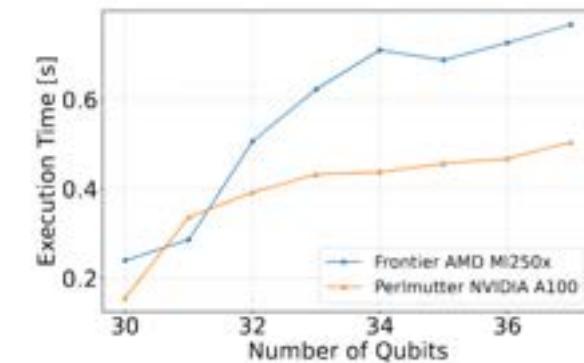
QFT Algorithm



QPE Exact Algorithm



SU2 Random Algorithm



VQC Algorithm

2. テンソルネットワーク法シミュレーター

- ・行列積状態法（MPS法）に基づくサンプルベースのシミュレーション法を開発、公開用コードの整備

量子回路で表される量子状態に対応するbit stringsをcomputational baseで生成

SQDのwork flowを全て古典計算機でシミュレーションする可能性。

これまでに扱った分子に対して量子回路のサンプルベースシミュレーションを実施。

- ・GPUを含むマルチプラットフォームに対応するテンソル演算ライブラリ “Tensor Computing Interface”の開発
ベンチマーク用のテストコードとして、TCIを用いた期待値計算用のアプリケーション開発。

情報発信

High Performance Computing(HPC2024) (Cetraro, Italy, June 23-27 2025)

- ・Nobuyasu Ito, "JHPC-quantum project: HPC and QPU hybrid challenge of RIKEN"(25/6/27)

1st Workshop on advancing scientific computing through quantum and HPC synergies at 39th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium(IPDPS2025) (Milano, Italy, June 4th 2025)

- ・Nobuyasu Ito, "JHPC-quantum project: HPC and QPU hybrid challenge of RIKEN" (Keynote).