

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>

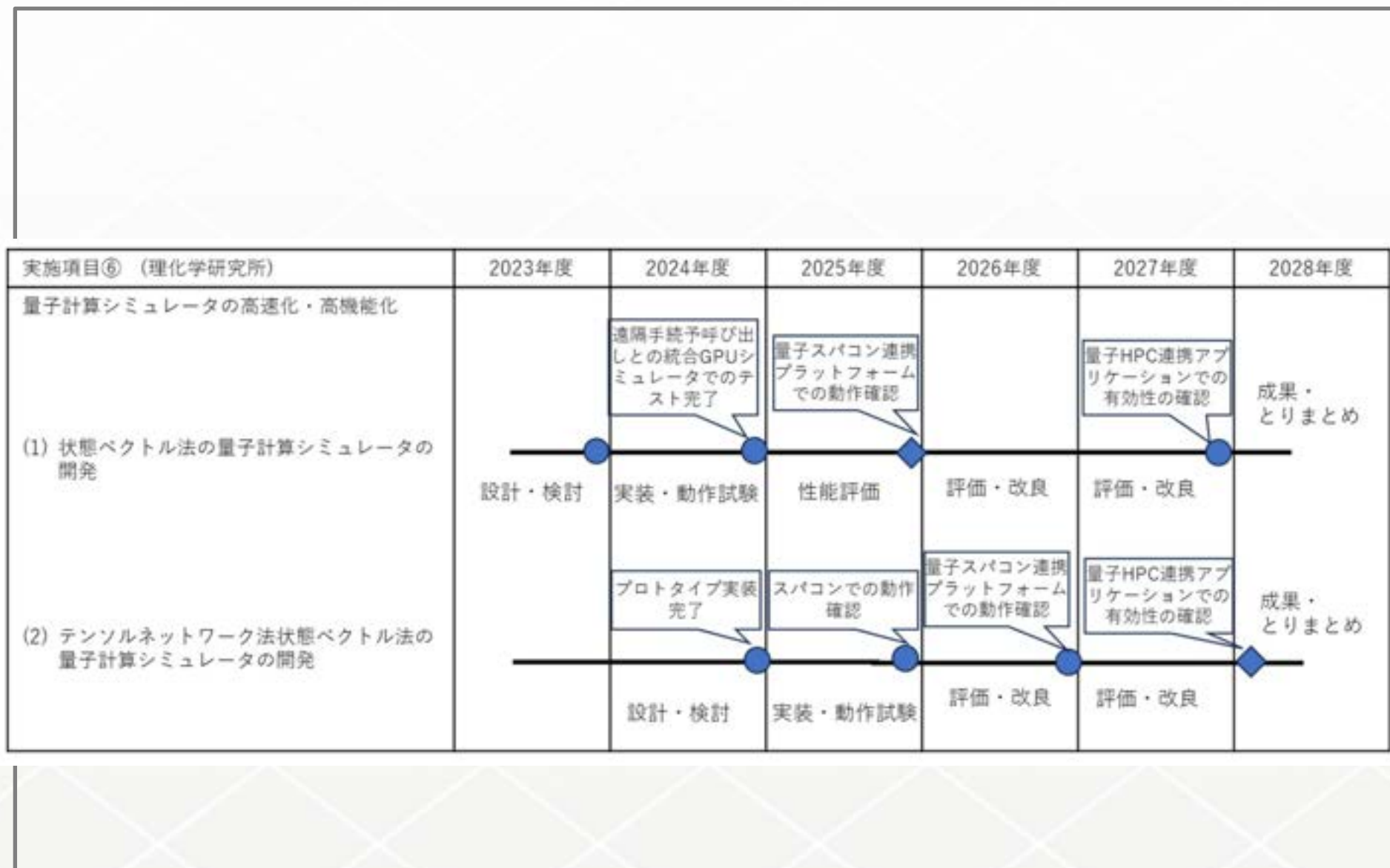
1. 状態ベクトル法シミュレーター

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



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

```
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
```

```
CIRCUITS 3
QUBITS 8

H 6
EZ 4 1.5707963267948966

BEGIN CIRCUIT 1
H 6
EZ 4 0.7853981633974483
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

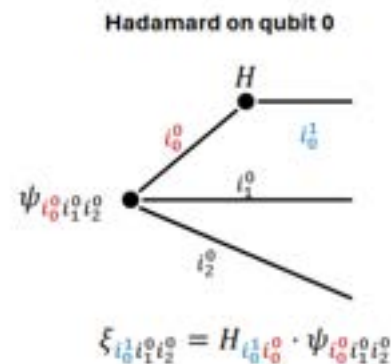
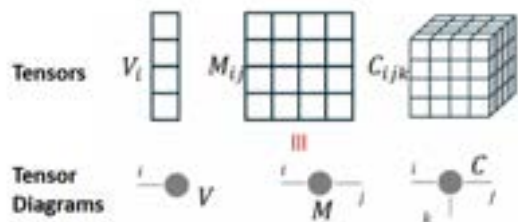
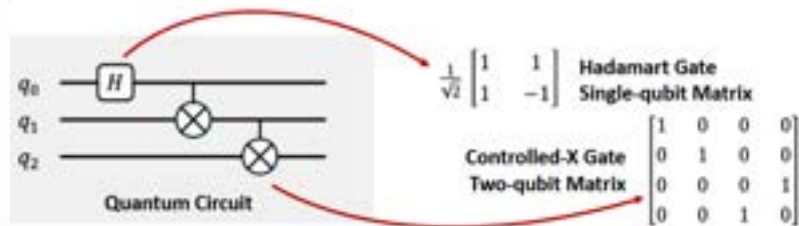
A100、Blackwell ではノード内（35qubits位まで）では「富岳」よりも一桁弱速い。

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。

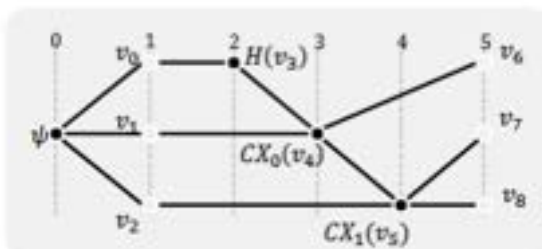
- データ転送の最適化に関わる知財申請中

近接中心性を使った回路分割によるメモリー転送最適化法C-3PQの提案



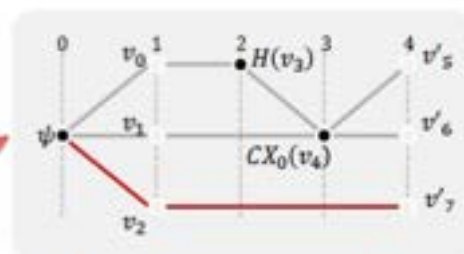
T.Popovici, A.Butko, N.Yoshioka and N.Ito, "C-3PQ: A Closeness Centrality-based Circuit Partitioner for Quantum Simulations", in preparation.

ROOT

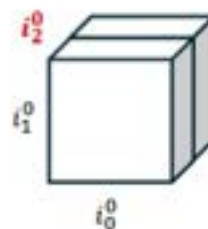
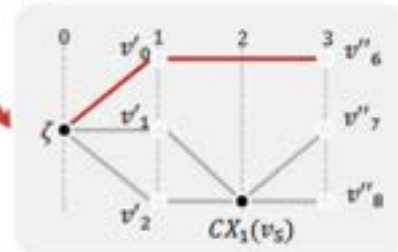


Pre-order Traversal of the Partitions

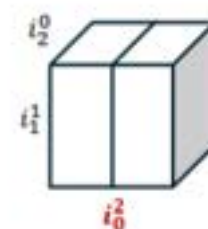
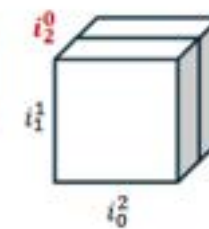
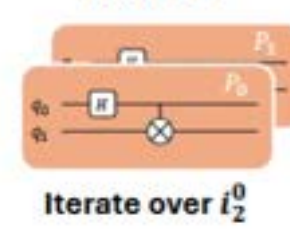
R0



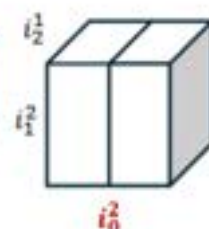
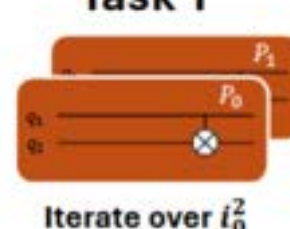
L0



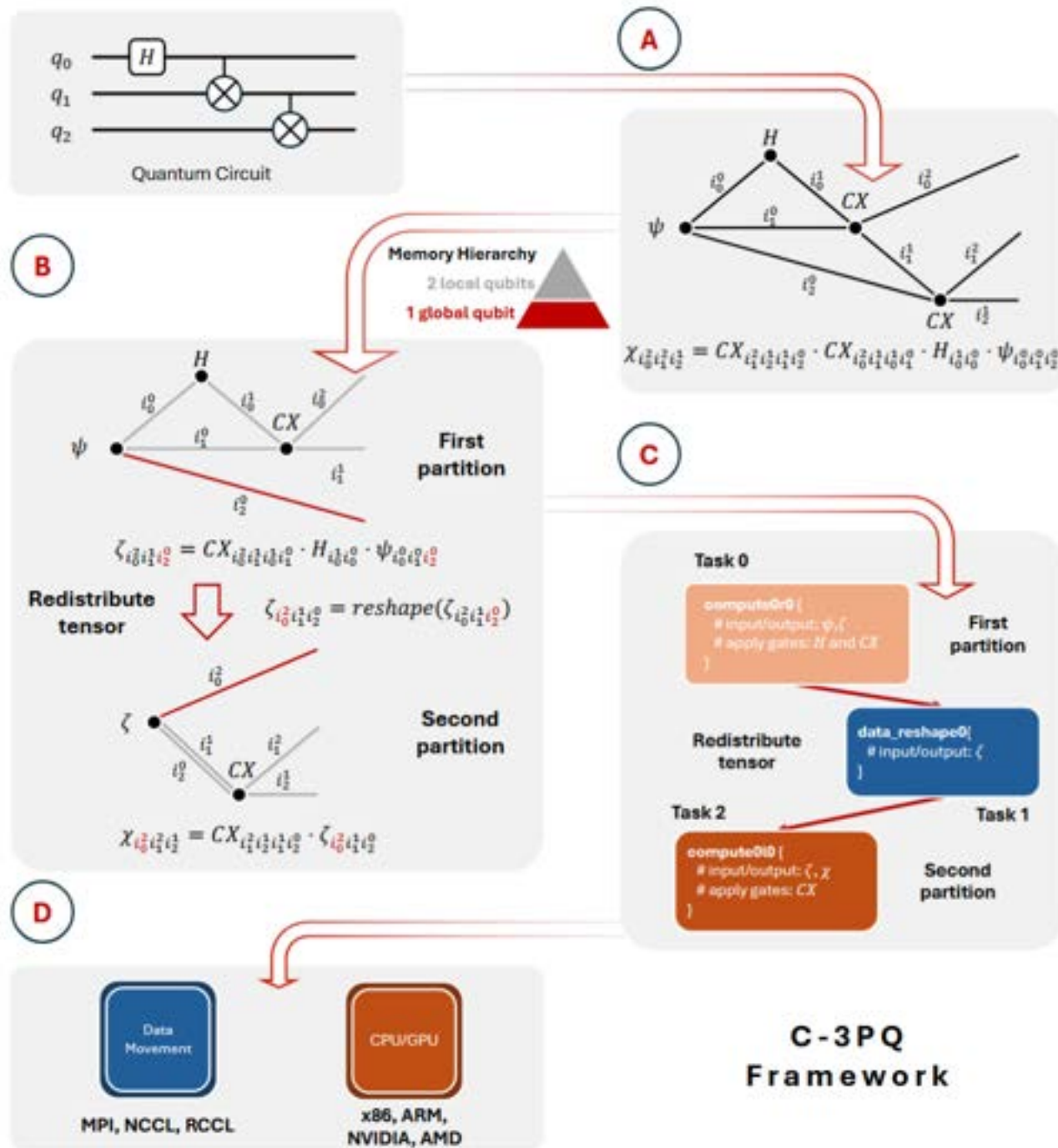
Task 0



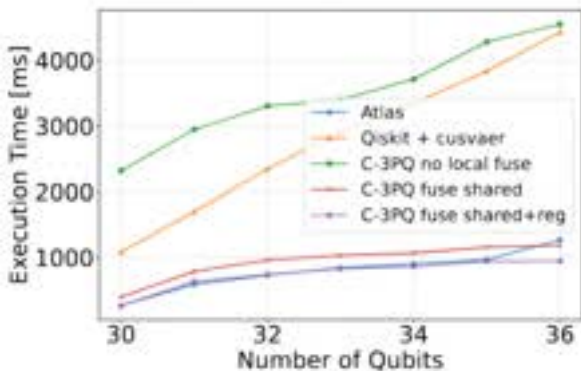
Task 1



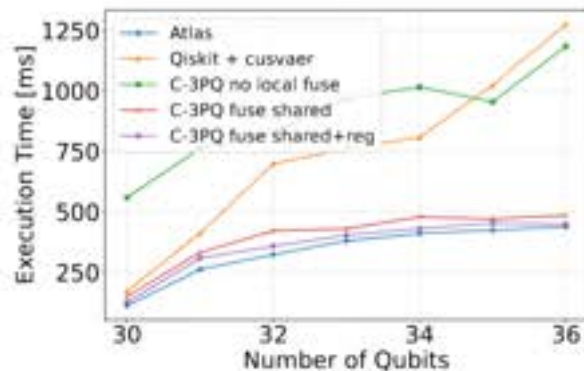
Translate Graph to Code



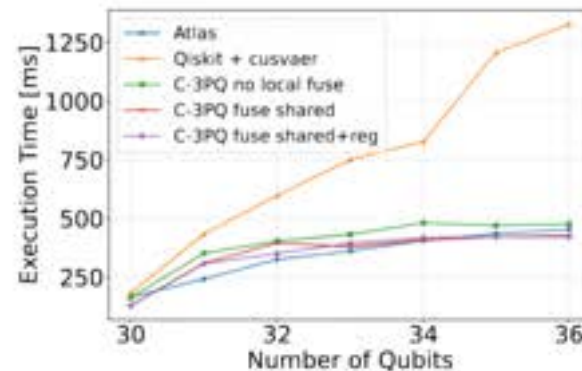
C-3PQ + ゲート融合によるシミュレーション高速化



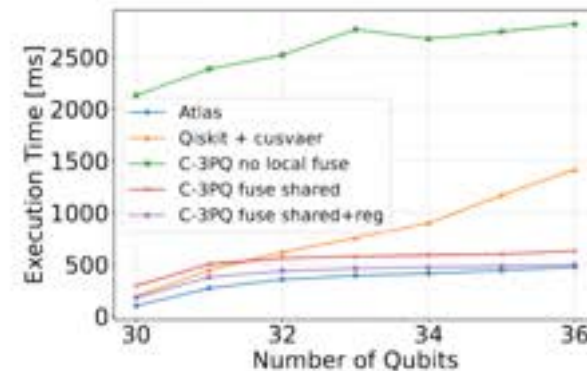
AE Algorithm



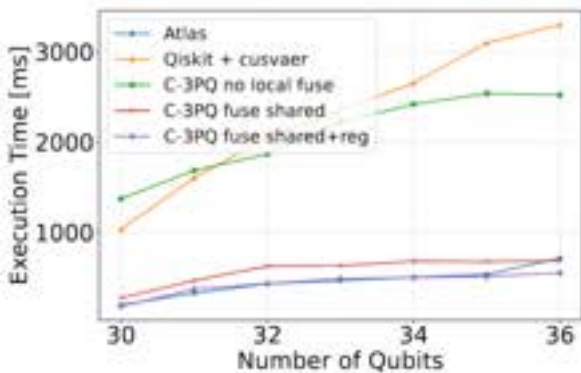
DJ Algorithm



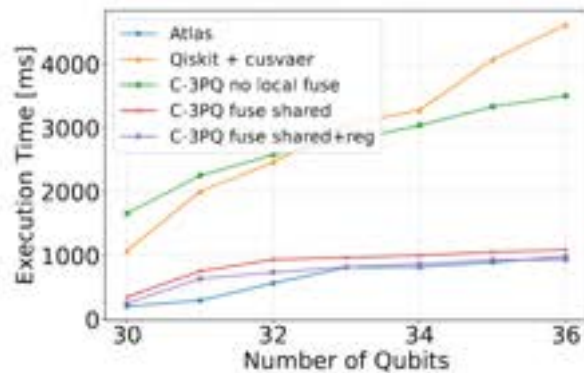
GHZ Algorithm



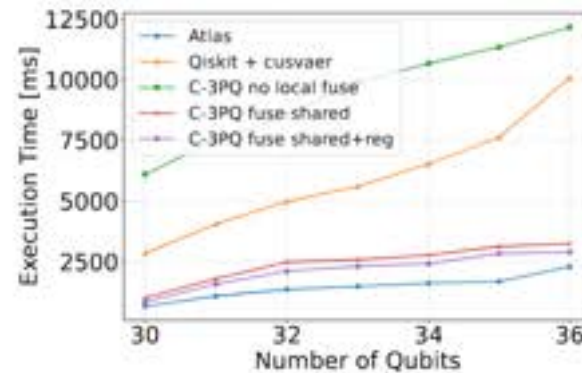
Ising Algorithm



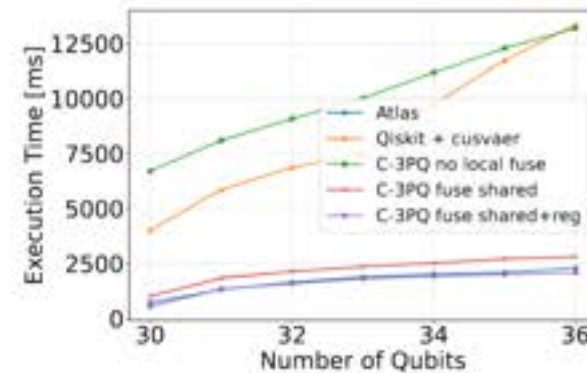
QFT Algorithm



QPE Exact Algorithm

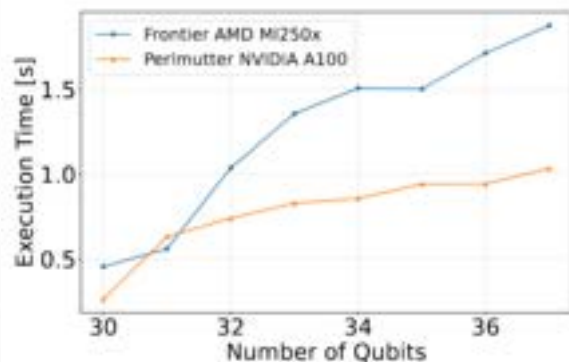


SU2 Random Algorithm

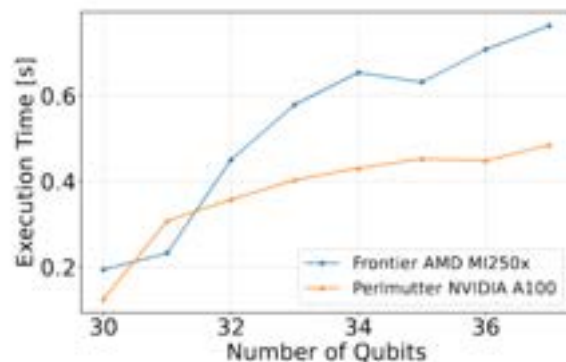


VQC Algorithm

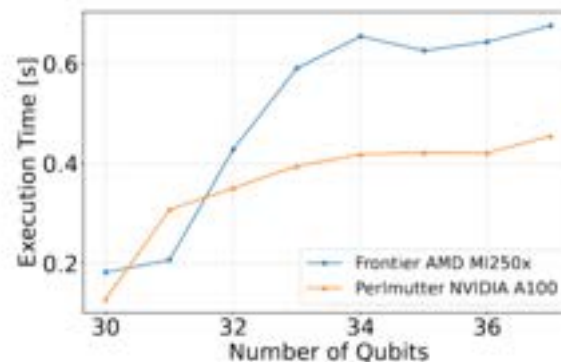
Frontier AMD MI250x と Perlmutter NVIDIA A100 とでの性能比較



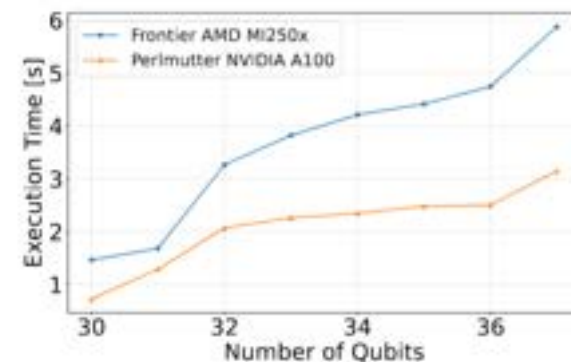
AE Algorithm



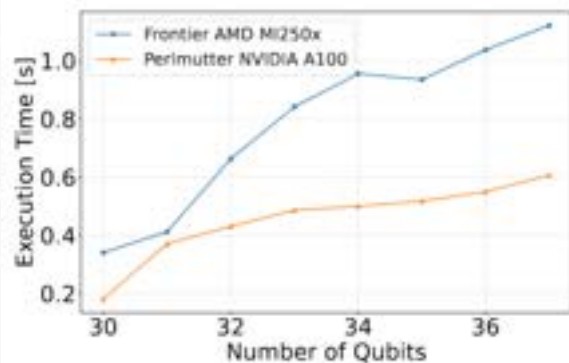
DJ Algorithm



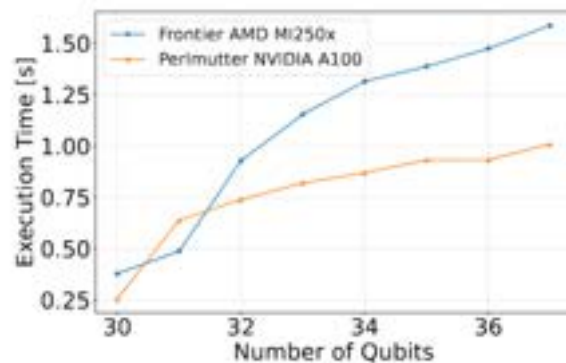
GHZ Algorithm



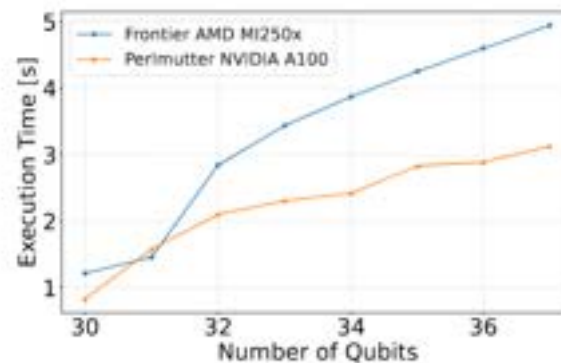
Ising Algorithm



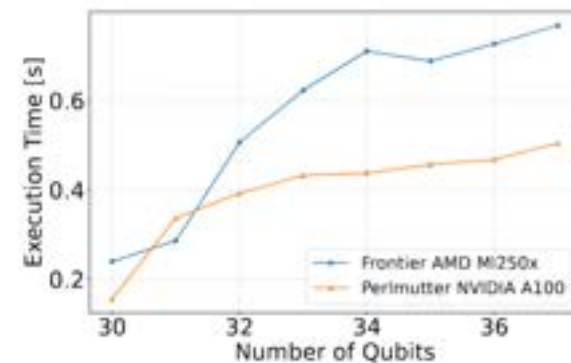
QFT Algorithm



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).