

量子AI技術開発に係る開発環境の整備と検証装置の整備
「量子融合イノベーション領域」における
研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>

官民研究開発投資拡大プログラム (PRISM)

「量子技術領域」

令和2年度成果

令和3年3月

文部科学省

資料1 「量子融合イノベーション領域」における研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>の概要

アドオン額: 180,000千円(文科省)

元施策・有/PRISM事業・新規/継続予定

課題と目標

- (課題) ゲート型量子コンピュータエミュレータおよび量子シミュレータ
- (目標) 開発環境を整備することで機械学習アルゴリズム開発・アルゴリズム検証・ライブラリ公開を目標とする。

「量子融合イノベーション領域の早期実行」の概要

■元施策: Q-LEAP量子情報処理(主に量子シミュレータ・量子コンピュータ)(R2年度: 1,122,000千円)

■PRISMで実施する理由: 社会実装に向けて、研究開発を加速/実装先を拡大するため。

■テーマの全体像:

Q-LEAP 量子情報処理領域

Flagship

超伝導量子ビットによる量子コンピュータの開発(H30年度~)

量子AI(R2年度~)

基礎基盤

量子シミュレータ、イオントラップ研究開発(H30年度~)

PRISM (量子AI技術)

アルゴリズム開発 (数値的検証)

量子超越のある50~100量子ビットの高速並列計算環境(ゲート型量子コンピュータエミュレータ)の整備
古典コンピュータ(GPU、FPGA等)で量子コンピュータ動作を模擬するハードウェア(エミュレータ)を整備
量子ビットの結合方式(アーキテクチャ)やノイズ割合を模擬

アプリケーション開発 (実験的検証)

多数の原子の同時制御技術を用いた物理検証用装置(様々な物質の量子状態を模擬し、量子化学計算結果を実験する装置)の整備
複数の原子・電子の量子状態を制御する技術を開発
量子コンピュータで算出した量子物理・化学計算結果を、実験により再現。結果の検証に活用。

量子アルゴリズム理論研究:

○ノイズ状況を模擬しながら量子超越のあるアルゴリズム開発を加速
量子優位性のある量子AIアルゴリズム理論研究に貢献

アーキテクチャ開発:

ハードウェア実装方式を検討し、実装可能なアーキテクチャ開発を加速
量子コンピュータへの実装に貢献

アプリケーション開発:

量子AIアルゴリズムによるアプリケーションを開発。大量データの高速度処理、パラメータ増によるAIの高精度化をいち早く実現
量子AIアプリケーションによる量子化学・量子物理の検索・推定の実証を前倒し
幅広い社会的課題への適用を促進・拡大

出口戦略

実問題への適用(学理・工学・医学・金融)を行い、社会実装を早期化する。

民間研究開発投資誘発効果等

AIの市場規模は、2016年度159億円規模から毎年約74%の成長を示しており、ICTの市場は、2015年度の2500億円から2022年度に3.2兆円に成長すると予想。量子AIへのPRISM投資によって、実機の開発を待たずして、高速にノイズも含めた実機のシミュレーションが可能となり、量子AIや材料・化学計算への応用のユースケース探索などをユーザー企業と早期に展開し、社会実装にむけた開発サイクルが加速される。さらに、ゲート型量子コンピュータの開発が進むとともに汎用的な計算の自動化を実現することにより、材料・化学計算への応用における競争優位性を確保する。量子AIは、従来AI技術では困難なビックデータの高精度化が可能であり、さらに大きな民間研究開発投資の誘発が期待される。

資料2 「量子融合イノベーション領域」における研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>の概要

アドオン（文科省）：180,000千円
 元施策名：（Q-LEAP（量子情報処理））1,122,000千円

Q-LEAPは、経済・社会的な重要課題に対し、
 光・量子技術を駆使して、非連続的な解決
 (Quantum leap)を目指す研究開発プログラム。

- Flagshipプロジェクト（超伝導量子ビットによる量子コンピュータの開発）：汎用量子コンピュータ等のプロトタイプを開発し、クラウドサービスによる提供等
- Flagshipプロジェクト（量子AI）：量子AIを活用した、量子ソフトウェアの研究開発
- 基礎基盤研究：量子シミュレータ、量子ソフトウェア等の研究



【PRISM】

- 量子ソフトウェアの研究開発を加速するための「アルゴリズム開発（数値的検証）」における、ゲート型量子コンピュータエミュレータの開発
- 量子ソフトウェア等の研究を加速するための「アプリケーション開発（実験的検証）」における、検証用実験装置（シミュレータ）整備

【開発のイメージ】

超伝導量子ビットによる量子コンピュータの開発

- 超伝導量子ビット開発、システム化
- アプリケーション開発

量子AIを活用した、量子ソフトウェアの研究開発

- 量子AIアルゴリズムの開発・検証
- (PRISM)量子コンピュータのシミュレーションの並列高速化アルゴリズムの開発(1月時点)
- (PRISM)ゲート型量子コンピュータエミュレータの開発(3月時点)

量子シミュレータ、イオントラップ研究開発

- 超高速量子シミュレータの開発
- 高機能量子シミュレータの開発
- (PRISM)多自由度量子シミュレータの実証
 「量子シミュレーション実験の高精度化・自動化」(3月時点)



資料3 「量子融合イノベーション領域」における研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>の目標達成状況

○施策全体の目標

研究開発の施設設備を整備し、研究体制を構築することで、企業との共同研究・民間投資拡大を促し、研究開発成果の社会実装を加速させる。

事業名等（個別に目標を設定している場合）	当年度目標	目標の達成状況
<p>量子AIフラッグシップ： 知的量子設計による量子ソフトウェア研究開発と応用</p>	<p>アルゴリズム開発（数値的検証）： 4000コアを超える高性能並列計算機を用いて、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・100量子ビットを超える浅い量子回路のシミュレーションコード開発 ・ノイズのシミュレーションの並列高速化 ・変分量子アルゴリズムの勾配計算の並列化高速化 <p>を行うことで、NISQのアプリケーション探索のためのシミュレーション時間を100倍から1000倍高速化</p>	<p>実行するタスクの並列化効率の高さ考慮し、主に1ノードあたり100コア程度からなるCPUサーバーによる構成として、計算機を発注した。</p> <p>並列して、既存の qulacs を拡張し、量子計算の分割によるMPI並列化を実行し、左に掲げる項目の高速化を行うためのコードを開発した。開発されたコードを、2ノードから構成されるテスト機上で検証し、並列化による高速化効果が認められた。1コアあたりのスレッド数などのチューニングによりピーク性能を引き出す条件だしを行なった。</p> <p>42ノード(4032コア)の計算機サーバーを稼働させ、MPI並列コードのベンチマークを取得し目標の高速化を達成。</p>
<p>基礎基盤研究： 量子シミュレータ、イオントラップ研究開発</p>	<p>アプリケーション開発（実験的検証）：</p> <ul style="list-style-type: none"> ・多数原子の同時制御技術を用いた物理検証用装置（様々な物質の量子状態を模擬し、量子物理計算結果を検証する装置）の整備 ・複数の原子の量子状態を制御・観測する技術の開発 	<ul style="list-style-type: none"> ・多数の原子を同時制御し、安定に物理検証を行うための装置（レーザー、波長計）を導入した。物理検証用装置の一部を動作させ、波長計の測定精度が十分高い（1MHz未満である）ことを確認した。 ・複数の原子の内部・振動状態を同時に観測する技術を開発し、ポラリトン状態の観測に適用した。

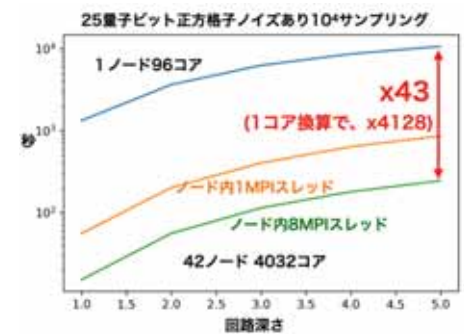
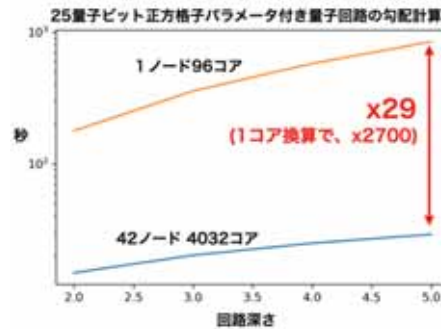
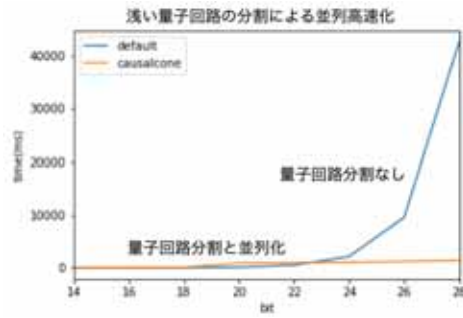
資料4 「量子融合イノベーション領域」における研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>の成果1/2

量子AIフラッグシップ：知的量子設計による量子ソフトウェア研究開発と応用

- ・4000コア(40ノード)のCPUを超える高性能並列計算機を整備(開発機11月、テスト機12月、4000コア計算機サーバー本体3月納品)
- ・ノード間でMPI並列を行うために、オープンソースである qulacs をベースに、**qulacs-osaka** を開発
- ・開発機を用いて、
 - (1) 浅い量子回路に対して量子回路分割を行うことで、100量子ビット以上の計算のシミュレーションを実行
 - (2) ノイズのシミュレーションを並列化することで、実機のノイズを再現したシミュレーションを高速化
 - (3) 変分量子アルゴリズムのパラメータ更新のための勾配計算を並列化することで、変分アルゴリズムのシミュレーションを高速化
 について、2ノードの開発機を用いて、その並列化効果を検証した。
- ・42ノード(1ノードあたり96コア、4032コア)の計算機サーバーを稼働させ上記の並列化コードのベンチマークを取得。最大で1ノード(96コア)での実行に対して約40倍、1core換算で、約4000倍の高速化を達成した。ノイズのサンプリングやVQEの性能評価が飛躍的に高速化。



42ノード、4032コアのCPU並列計算機サーバー



基礎基盤研究：量子シミュレータ、イオントラップ研究開発

- ・4個までの原子(イオン)を同時制御し、安定に物理検証を行う装置(レーザー、波長計)を導入した。物理検証用装置の一部を動作させ、波長計の測定精度が十分高いことを確認した(図-左側)。これを用いて半導体レーザー周波数をロックすることにより、従来よりも大幅に(2桁程度)安定となり、効率よく実験を行うことが可能となると予測される。
- ・複数の原子の内部・振動状態を同時に観測する技術を開発し、ポラリトン状態の観測に適用した。それにより、原子の振動状態と価電子状態が結合したポラリトン状態の安定な観測に成功した(図-右側)。

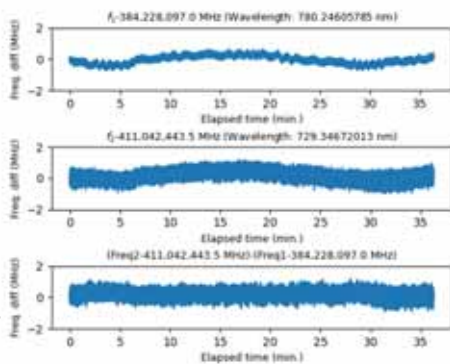


図 光源周波数精度の評価

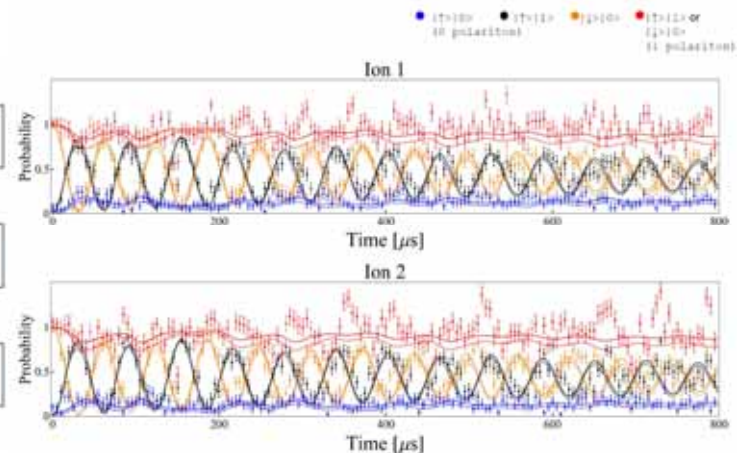


図 ポラリトンブロッケード観測実験の結果

量子AIフラッグシップ：知的量子設計による量子ソフトウェア研究開発と応用 補足資料参照

基礎基盤研究：量子シミュレータ、イオントラップ研究開発

- イオンを制御し量子シミュレーション実験を行うためのシステム（レーザー、波長計）を導入（図1）
- 波長計を稼働させ、基準レーザー光源2種（いずれも周波数揺らぎ <math>< 0.1 \text{ MHz}</math>）の周波数を測定。波長計による周波数測定の揺らぎが十分小さい（絶対周波数で1MHz以下、780nmレーザーと729nmレーザーの差周波数で0.1 MHz程度）ことを確認（図2）
 - これを用いて各種半導体レーザー（397, 866, 854 nm, 423nmなど）の周波数を基準レーザー（780nmレーザー）にロックすることにより、**いずれも0.1 MHz程度の精度で安定化が可能；従来（10 MHz程度）よりも安定度が向上、大幅に効率よく実験を行うことが可能となると期待**
- 本システムにより
 - 自動操作による長時間運用（実験の自動化・リモート化）
 - アプリケーション検証実験を高効率で行うことが可能に
- 代表的なアプリケーション
 - ジェインズ・カミングス・ハバード模型（スピン+ボソンモードの配列）
 - ハバード・ホルスタイン模型（電子+ボソンモードの配列） 固体・分子・生体中の現象へ応用



図1 導入した半導体レーザーシステム、精密波長計システム

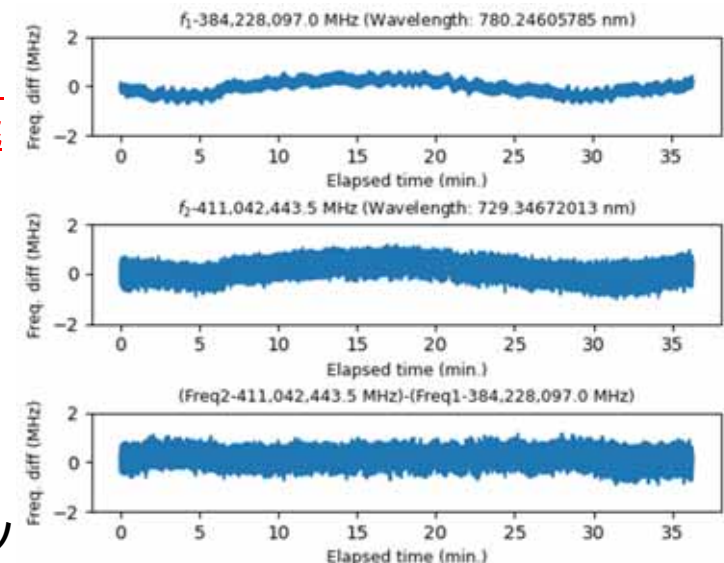


図2 光源周波数精度の評価

資料5 「量子融合イノベーション領域」における研究開発の加速(量子AI技術)<Q-LEAP>の民間からの貢献及び出口の実績(見込み)

○民間からの貢献額：NISQ型量子コンピュータの高速並列化シミュレータを活用した産学連携共同研究により、1億5千万円/3年

当年度当初見込み	当年度実績
<p>複数の企業との共同研究による量子AIやその材料・化学計算への活用方法の探索を実施し、産業界から量子コンピューティングおよび量子AI技術への投資を加速する。</p>	<p>共同研究実績： Q社(人員2人) F社(人員3人) M社(人員1人) H社(人員3人) A社(人員3人) E社(人員1人) N社(人員3人)</p> <ul style="list-style-type: none"> - 共同研究費総額：約800万 - 企業からの持ち出し(人数×人件費×エフォート率の総和)：4200万

○出口戦略：qulacsはオープンソースソフトウェアとして全世界に公開されている。その高速性が認められ、海外のベンチャー企業が提供するプラットフォームやライブラリのバックエンドとして利用されている。本PRISMによる支援では、それらオープンソースに対する我が国の産学連携活動の競争優位性を確保するために、当PRISM支援によって整備された並列シミュレータを活用する。クラウドで提供される量子コンピューティングサービスの高速シミュレータとして技術移転なども検討する。

