

時間依存密度行列繰り込み群法による量子アニーリングシミュレータの開発 —古典コンピュータで加速する量子コンピュータ開発—

1. 背景

半導体デバイスの微細化技術の限界から「ポストムーア時代」に差し掛かった現在、量子コンピュータの発展はその「ポストムーア時代」を担う第一候補とも考えられる。しかしながら、量子アニーリング方式については、例えば量子ビット数に対応して一般的には小さくなるエネルギーギャップに対してどのように対策するか等、その技術的課題はまだ多数存在する。このような問題点に対して、その詳細や解決策を計算機シミュレーションを通じて明らかにすることは、量子アニーリング分野における今後の発展に対し非常に大きな意義があるものと考えられる。

2. 目的

本プロジェクトの目的は、量子アニーリング技術を用いたハードウェア設計者、および当該分野の研究者をメインターゲットとした量子アニーリングシミュレータを開発することであり、量子アニーリング分野の技術的発展を後押しすることを目標にするものである。そのために、量子アニーリングの結果得られる基底状態のみではなく、量子アニーリングの実時間シミュレーションによる適切なタイムスケジューリング等を追求する実時間シミュレーション、また量子アニーリングの安定性に寄与する基底状態と第一励起状態間のエネルギーギャップ等について量子アニーリングの中間状態を含めた計算が可能な量子アニーリングシミュレータを作成することを目的とする。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは、量子アニーリング技術を用いたハードウェア設計者、および当該分野の研究者をメインターゲットとした量子アニーリングシミュレータとしての機能を持つ量子アニーリングシミュレータを開発した。量子アニーリングで取り扱う系は、いわゆる量子多体系であり、系に内包されるスピンの多体問題のため、取り扱うスピンの数に対し系の自由度は指数関数的に増大する。そのため、数値的に厳密な取り扱いにおいては、実際に取り扱い可能なスピンの数は非常に限定される。そこで、本プロジェクトでは開発する量子アニーリングシミュレータの数値的手法として物性物理分野で発展した量子多体系の計算手法である密度行列繰り込み群法を採用した。この手法は、計算の目的となる状態に注目し、その状態を表現するために重要な基底のみで系を表現することにより、実際には系のサイズに対し指数関数的に増大する系の自由度を一定の範囲に留める。これにより、数値的厳密な手法では到底取り扱いが不可能な巨大な系の取り扱いを可能にする。本プロジェクトで取り扱う量子アニーリングでは、その(準)断熱過程において理想的な条件下では常にある時刻での時間に依存するハミルトニアンの

基底状態となる。この事情は、密度行列繰り込み群法の立場からは一般的な基底状態計算と同様であり、量子アニーリングシミュレータとして密度行列繰り込み群法を用いることは適当であると考えられる。さらに、量子アニーリングでは一般的に終状態は古典モデルの基底状態となるため、ただ一つの基底でその状態が記述される。したがって、より終時刻に近づくにつれ、密度行列繰り込み群法による取り扱いの計算精度が向上することを意味する。したがって、密度行列繰り込み群法による量子アニーリングの扱いは適切なものであると考えられる。また、本プロジェクトで取り扱う系は密度行列繰り込み群法が一般的に適用される最近接スピン間のみの相互作用で与えられる一次元系ではなく、多次元の系である。本プロジェクトでは、多次元系に対する密度行列繰り込み群法として一般的に用いられる一次元系の密度行列繰り込み群法の計算に長距離相互作用を導入する多次元密度行列繰り込み群法を採用し、量子アニーリングシミュレータを作成した。

本プロジェクトにおける量子アニーリングシミュレータは単に与えた Ising 模型の基底状態の計算のみではなく、量子アニーリングの実時間シミュレーションや、その過程におけるエネルギーギャップの計算などをその機能として含める。そのため、実時間シミュレーションのための時間依存密度行列繰り込み群法、エネルギーギャップの計算のための動的密度行列繰り込み群法をその機能を満たす手法として含める。

図 1 に本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータに実装されている計算手法とそこから得られる計算結果の関係の概要を示す。開発された量子アニーリングシミュレータは、密度行列繰り込み群法による計算に加え、モンテカルロ法によるシミュレーティッドアニーリングによる計算を付加機能として加えている。このモンテカルロ法による計算は、密度行列繰り込み群法の実行で用いるものと同様のハミルトニアンの設定等の入力ファイルから実行される。また、波及効果として、本プロジェクトで開発された量子アニーリングシミュレータはより一般的な量子スピン系の基底状態、および量子ダイナミクスの計算や量子論理ゲート方式の量子コンピュータについても、任意に演算子を波動関数に作用させることが可能であることから、そのシミュレータとして用いることも可能である。

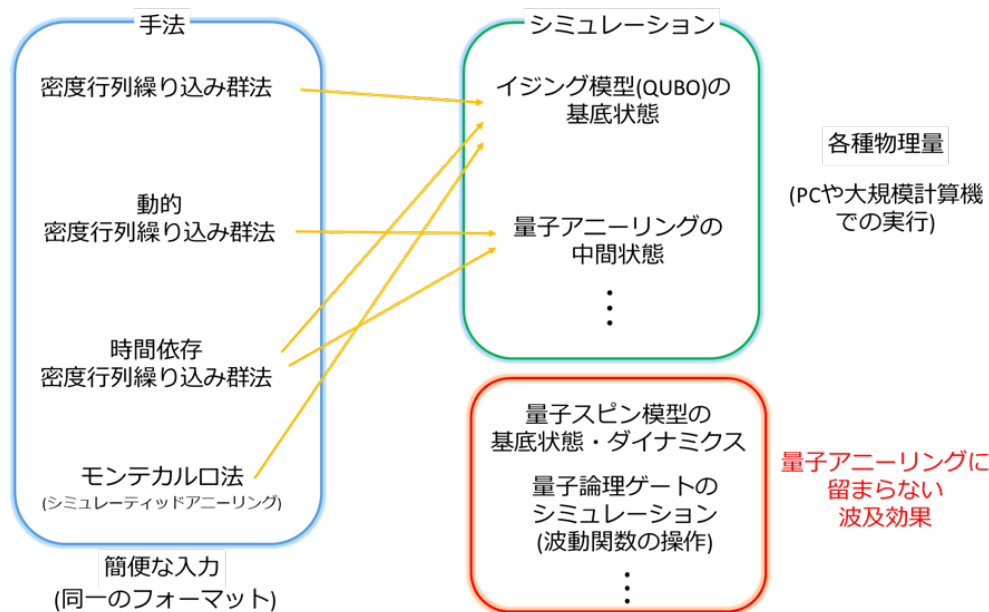


図 1 本プロジェクトで開発された量子アニーリングシミュレータ「QUARTZ」の概要図。

また、エネルギーギャップの大きさなど、今後量子ビット数を増加させるにつれ顕著になると考えられる問題点の解決策を見つけるため、本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータではこれまでの量子アニーリングの範疇を超えた量子スピン系の取り扱いを可能にしている。さらに、本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータでは、格子点の自由度や各種演算子の定義、またニスピン間を超えた多スピン間の相互作用などへの変更や拡張を容易にできるよう設計されているため、今後の本研究分野の進展に合わせてさらなるシミュレータの拡張も容易である。

本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータはその手法として上述の通り物性物理分野で発展した密度行列繰り込み群法を基本としている。そこで、本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータが密度行列繰り込み群法の詳細を知らなくても容易に利用できるような工夫を行った。まず、開発した量子アニーリングシミュレータは利用者がソースコードを改変することなくその機能を利用できるよう、別に用意した入力ファイル、またはプログラム実行時のオプションを通じて行うことを可能にしている。

また、本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータは大規模並列計算に対応している。ノード内並列は OpenMP によるスレッド並列、ノード間並列は MPI による並列のハイブリッド並列の方式を採用している。ノード間の並列については、これまで本プロジェクト実施者が開発した大規模並列密度行列繰り込み群法の方式を採用している。この大規模並列化では MPI コミュニケータを 3 つに分割し、特に all to all の通信を必要とする大規模並列計算でボトルネックと成り得る部分について、局在化された通信のみでの大規模並列計算が実現する。

さらに、本プロジェクトの量子アニーリングシミュレータで取り扱う多次元密度行列繰り込み群法と系の特性上、多数の長距離相互作用を取り扱うことが期待されるため、この部分についても MPI 並列化を行うことで各プロセスが各項を対応する演算子も含めて独立に取り扱うことを可能にし、その大規模並列計算を高効率に行うことを可能にしている。また、計画には挙げていなかった成果としてプログラムの GPU 化も行われており、GPU を使ったハイパフォーマンス計算にも対応している。

本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータは「QUARTZ」と命名した。これは、「QUAntum computing Returns To Zero」より命名したものであり、将来の量子計算を正常に終了させることを意図している。この「QUARTZ」は、バイナリ形式、また必要に応じてソースファイルを提供することで広く一般に公開する。

4. 新規性・優位性

密度行列繰り込み群法による量子アニーリングシミュレータの開発例は他に存在せず、本プロジェクトで開発したものが初めてである。本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータは、単に与えた Ising 模型の基底状態を計算することに留まらず、量子アニーリングの中間状態も含めたエネルギーギャップや各種物理量などの機能を有しており、量子アニーリング技術に対する議論も可能にする。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクトで開発された量子アニーリングシミュレータは、量子アニーリング技術を用いたハードウェア開発者や本分野の研究者らとその利用のメインターゲットとしている。量子アニーリングを議論する上で必要と考えられる各種機能を備えており、また今後の量子アニーリング技術の発展に対しての系の拡張性など、既存の量子アニーリングマシンには含まれていない機能も有している。したがって、本プロジェクトで開発した量子アニーリングシミュレータは、量子アニーリング技術の今後の発展に向けた計算と議論を可能にするものであり、本分野の今後の発展を促進することが期待される。

6. 氏名（所属）

柚木 清司(理化学研究所計算科学研究センター)

曾田 繁利(理化学研究所計算科学研究センター)

(参考) 関連 URL

<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/QUARTZ.html>