

量子 HPC 連携プラットフォームの構築について

幸 朋矢¹⁾, 内田 崇¹⁾, 三浦 信一¹⁾, 中野 裕貴¹⁾,
辻 美和子^{1),2)}, 児玉 祐悦¹⁾, 小野寺 民也¹⁾ 佐藤 三久^{1),3)}

1) 理化学研究所 計算科学研究センター

2) 筑波大学 3) 順天堂大学

tomoya.yuki@riken.jp

Building the Quantum-HPC Hybrid Platform

Tomoya Yuki¹⁾, Takashi Uchida¹⁾, Shin'ichi Miura¹⁾, Yuki Nakano¹⁾,
Miwako Tsuji^{1),2)}, Yuetsu Kodama¹⁾, Tamiya Onodera¹⁾, Mitsuhisa Sato^{1),3)}

1) RIKEN R-CCS

2) University of Tsukuba 3) Juntendo University

概要

本稿では、理化学研究所計算科学研究センターにおいて構築・運用中である量子 HPC 連携プラットフォームの、主に環境構築・運用面について報告する。本プラットフォームでは複数の量子コンピュータおよびスーパーコンピュータを接続し、協調して使えるような環境を整備している。その際課題となるスケジューリングや認証、利用環境などについて議論する。

1 はじめに

近年量子コンピュータの発展は著しく、一部のアプリケーション領域においては実用化を見据えた研究が盛んに行われている。用途が限定的な量子アニーリングに対しより汎用的なゲート方式の量子コンピュータも多く開発され、量子ビット数も年々増加傾向にある。一方で、現在の量子コンピュータは誤り訂正機能を持たない NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) と呼ばれるものであり、使いこなすためにはエラー抑制・低減といったテクニックが必要となる。このような処理は従来型のコンピュータ(ここでは量子コンピュータに対し古典と呼ぶこととするが、現在主流のコンピュータのことを指す)で行われる。そのため、現存する量子コンピュータを単に使うという目的であっても、古典コンピュータでのプリ/ポスト計算は重要となってくる。

現在、多くの研究機関はスーパーコンピュータに代表される古典計算リソースを使い数々の研究課題に取り組んでいる。ここに将来より実用的に

なった量子コンピュータを組み込むことを想定すると、量子コンピュータ単体での利用に加え、スーパーコンピュータとの協調利用というものが挙げられる。量子コンピュータは現在のコンピュータを完全に代替するものではないものとされている。一方で、量子コンピュータの量子ビット数が増えエラー率も下がると、古典コンピュータに対し非常に高速に計算できる領域が存在する。よって、基本的な計算処理は古典コンピュータで従来通り行うが、一部計算のみ量子コンピュータにオフロードすることで全体の計算速度の向上が見込める。スーパーコンピュータ側から見ると、量子コンピュータは巨大なアクセラレータという立ち位置として扱うことが想定される。

このような未来を見据え、理化学研究所計算科学研究センターでは量子 HPC 連携プラットフォームを構築する JHPC-quantum プロジェクト[1]を進めている。構築したプラットフォーム上において、量子 HPC 連携アプリケーションを開発、その有効性について実証することを目的とする。

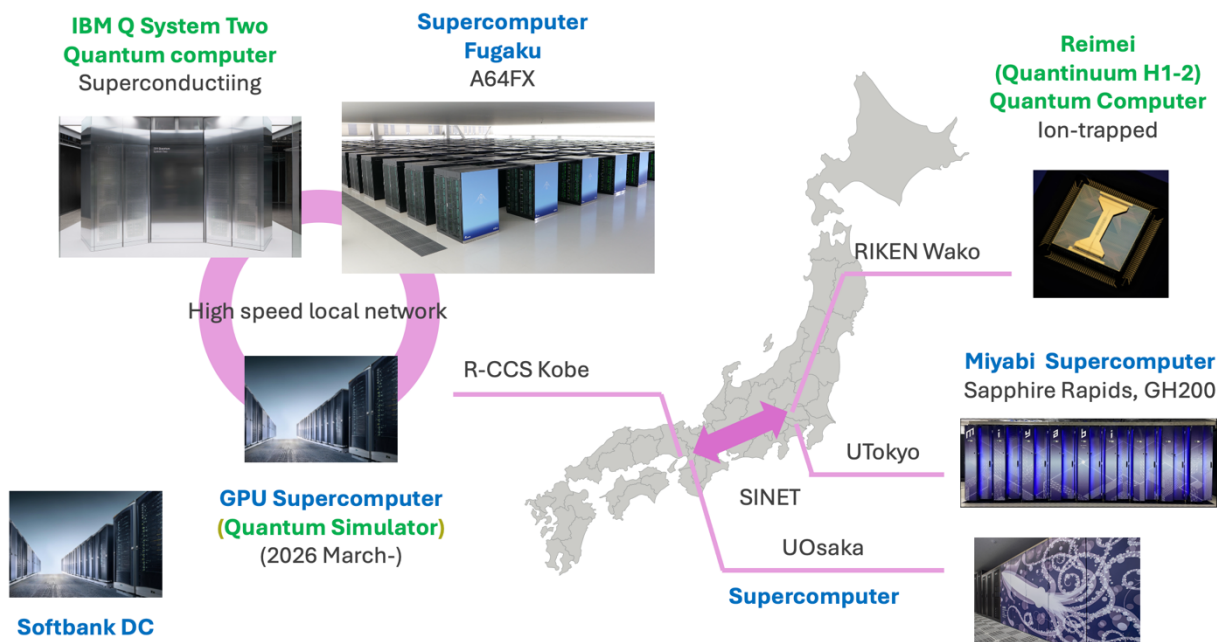


図 1. JHPC-quantum 量子 HPC 連携プラットフォームのシステムと立地

2 量子 HPC 連携プラットフォーム

2.1 システム概要

量子 HPC 連携プラットフォームでは、複数の量子コンピュータを複数のスーパーコンピュータと接続し、統一的に利用可能な環境を提供する。本プラットフォームに含まれるシステム・立地を図 1 に示す。理化学研究所計算科学研究センターにおいて運用中のスーパーコンピュータ富岳および IBM 社の量子コンピュータ IBM Quantum System Two (ibm_kobe) [2]、さらに来年導入予定の量子コンピュータシミュレータとしての GPU スーパーコンピュータ(名前未定)は全て神戸にある計算科学研究センターに置かれ、相互に高速ネットワークで接続される。また理化学研究所和光キャンパスには Quantinuum 社の量子コンピュータ黎明[3]が既に稼動中である。ibm_kobe は超伝導型に対し、黎明はイオントラップ型と、複数の量子コンピュータのタイプが利用可能となっている。これに加え、東京大学と大阪大学のスーパーコンピュータシステム、ソフトバンクのデータセンターを接続し、それぞれのサイトから量子コンピュータを使えるよう環境調整を行っている。

尚、本プラットフォームは現在開発中の項目も多く含むため、最終的なプラットフォームとして細かい差異がある可能性には注意されたい。

2.2 認証

ここでは本プラットフォームにおける認証環境の整備について議論する。本プラットフォームには複数のシステムが存在し、それぞれにおいて認証・アカウント管理が必要となる。一方で、複数システムを同時に協調して利用する際には統一した認証基盤が求められる。そこで本プラットフォームにおいては単一の IdP を用意し各システムはシングルサインオン (SSO) できるように環境整備を行う。各システム、特に 2 つの量子コンピュータおよび量子シミュレータースーパーコンピュータ (GPU システム) については、後述するワークフローエンジンなどからの利用も想定し、アクセストークンによるジョブ実行を可能とするよう、調整を進めている。認証の流れそのものは通常の OAuth2.0 のフローに従っているだけではあるが、オンサイトの量子コンピュータ利用に対するアクセストークンの発行/検証、GPU スパコンに搭載予定のジョブスケジューラ Slurm に対し REST API でジョブを投入する際のトークン検証など、種々の新規開発を行っている。

2.3 マルチサイトコーディネーター

複数のサイト(複数のスーパーコンピュータ)からプラットフォーム上の量子コンピュータを使えるようにすると、当然 1 つの量子コンピュータに対するジョブ実行リクエストが複数サイトから

同時に来ることが想定される。この時、量子コンピュータとスーパーコンピュータを同時に使う“量子 HPC ハイブリッドジョブ”の優先度を上げ、各システムのリソースが無駄にならないよう調整している。複数のサイトから特定の量子コンピュータへのジョブが投入された際、同時に実行可能なジョブを1つとするよう、ジョブスケジューラをカスタマイズしている。また、常に量子コンピュータの状態が現在利用可能かどうかを応答する REST API サーバーも用意し、各スケジューラはここに問い合わせることで実行の可否を判断する。より効率的なジョブアロケーションも考えられるが、現状は1つのみ通すというシンプルな実装としている。マルチサイトのジョブスケジューラを連携させるコスケジューラの研究はプロジェクトメンバーである東京大学で行われている。

2.4 利用環境

本プラットフォームは複数の利用方法を整備・提供している。スーパーコンピュータから量子コンピュータを使うプログラミングモデルとして SQC[14]が開発されている。また、スーパーコンピュータにも量子コンピュータにもジョブが投げられるワークフローエンジンとして Prefect, Xcrypt, Tierkreis を用意し、さらにソフトバンクが Web ベースのワークフローエンジンを新規開発している。

量子コンピュータのユーザーは必ずしもスーパーコンピュータの使い方に慣れているというわけではない。よって、そういったユーザーに対し簡便な利用方法を提供するために Open OnDemand[4]環境が存在する。こちらは Web ページからスーパーコンピュータへジョブが投げられたり、ローカルマシンとスーパーコンピュータのファイル共有など、様々な操作が Web ブラウザベースで簡単にできるフロントエンド環境となっている。この Open OnDemand 上のひとつのアプリケーションとして、量子ソフトウェア・SDK がプリインストールされた JupyterLab 環境を本プラットフォームのために整備している。ここではユーザーが Qiskit[5], TKET[6], Qibo といった量子ソフトウェアを自分で環境を整えることなくそのまま使うことができる。こういった利用環境の整備により、スーパーコンピュータに詳しくない量子コンピュータユーザーも簡単に開発を開始することが可能となっている。

3 課題

3.1 セキュリティ

現在、認証に使われる認証トークン・アクセストークンに含まれる内容は非常にシンプルなものに留まっているが、セキュリティの観点からペイロードの内容を再検討する必要がある。また、リフレッシュトークンを導入することによりさらに安全な認証フローを用意する必要があると考えている。

3.2 コスケジューラの効率化

前述した通り、現在マルチサイトからのジョブを捌くコーディネーターは高優先度のハイブリッドジョブについては1ジョブのみ通すという構成になっている。これに対し、各サイトのジョブ投入状況を深く見ながらより効率的な全体のスケジューリングをするような機構が求められる。

3.3 GPU システムの運用方法

現在調達中である量子シミュレータ用スーパーコンピュータ (GPU システム) について、古典側と量子側両方の動きができるため、ハイブリッドの運用として、より効率的な使い方を考える必要がある。また今回このシステムについてはソフトウェアスタックをベンダー任せにせず自由に調整できるため、こういった運用方法がベストかも合わせて見極めていく必要がある。

4 他機関のハイブリッドプラットフォーム

理化学研究所以外にも、こういった量子 HPC ハイブリッドプラットフォームの構想を進めている組織は現時点で複数存在する。産業技術総合研究所では量子・AI 融合処理向け大規模クラウド基盤 ABCI-Q が開発されており、Oak Ridge National Laboratory では DOE の戦略として同様のプラットフォーム構想が存在する[7][8][9]。また、欧州においては仏 CEA と GENCI を中心として複数の量子コンピュータを導入し、Très Grand Centre de Calcul du CEA (TGCC) によって運用するプロジェクト[10]、独 LRZ やミュンヘン工科大学などを中心とするプロジェクト[11]、独 JSC を中心とするアニーラーも含めた量子 HPC 環境[12]、芬 CSC の LUMI と複数の量子コンピュータを接続するプロ

ジェクト[13]などが存在する。欧州全体では EuroHPC Joint Undertaking (EuroHPC JU) が量子-HPC 統合を推進しており、既存スーパーコンピュータへ量子計算機を統合する計画が段階的に進んでいる。

5 おわりに

本稿では、理化学研究所で構築・運用中の量子HPC 連携プラットフォームについて解説した。今後も量子コンピュータの発展が続いていくと、いずれこういったハイブリッドプラットフォーム構築の取り組みが本格的に必要となる時期が来る。それまでに構築や運用のノウハウを溜め、ソフトウェアスタックを整備しておくことが重要である。また量子だけでなく AI 向けのシステムなども今後多く出現することを想定すると、異種システムが混在するプラットフォーム向けのリソースマネジメントやワークフローについて研究を進めておくことは、量子の文脈以外にも有意義だと思われる。

謝辞

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (JPNP20017) の結果得られたものです。

参考文献

- [1] JHPC-quantum, <https://jhpc-quantum.org>.
- [2] IBM-Q-System-Two, <https://www.ibm.com/quantum/technology/#ibm-quantum-system-two..>
- [3] Quantinuum System Model H1, <https://www.quantinuum.com/products-solutions/quantinuum-systems/system-model-h1>.
- [4] Open OnDemand, <https://openondemand.org>.
- [5] Qiskit, <https://github.com/qiskit>.
- [6] TKET, <https://github.com/CQCL/tket>.
- [7] Beck, T., Baroni, A., Bennink, R., Buchs, G., P'erez, E. A. C., Eisenbach, M., da Silva, R. F., Meena, M. G., Gottiparthi, K., Groszkowski, P., Humble, T. S., Landfield, R., Maheshwari, K., Oral, S., Sandoval, M. A., Shehata, A., Suh, I.-S. and Zimmer, C.: Integrating quantum computing resources into scientific HPC ecosystems, Future Generation Computer Systems, Vol. 161, pp. 11–25 (online), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.future.2024.06.058> (2024).
- [8] Mikael P. Johansson a*1, Ezhilmathi Krishnasamy b*2, N. M. c. C. P.: Quantum computing—a European perspective, Future

- Generation Computer Systems (2021).
- [9] Schulz, M., Ruefenacht, M., Kranzlmüller, D. and Schulz, L. B.: Accelerating HPC With Quantum Computing: It Is a Software Challenge Too, Computing in Science & Engineering, Vol. 24, No. 4, pp. 60–64 (online), DOI: 10.1109/MCSE.2022.3221845 (2022).
- [10] Quandela and Attocube systems AG selected by EuroHPC and EuroQCS-France to supply Europe's most powerful photonic quantum computer, <https://www.cea.fr/english/Pages/News/quandela-attocube-systems-AG-photonic-quantum-computer.aspx>.
- [11] Munich Quantum Valley, <https://www.munich-quantum-valley.de/>.
- [12] Cavallaro, G., Riedel, M., Lippert, T. and Michielsen, K.: Hybrid Quantum-Classical Workflows in Modular Supercomputing Architectures with the Julich Unified Infrastructure for Quantum Computing, IGARSS 2022 - 2022 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium, pp. 4149–4152 (online), DOI: 10.1109/IGARSS46834.2022.9883225 (2022).
- [13] LUMI, artificial intelligence and quantum computing, https://events.ncbj.gov.pl/event/141/contributions/858/attachments/337/509/LUMI_Presentation_09_2022_Warsaw_TM-final.pdf.
- [14] Miwako Tsuji, "HPC-oriented Design of Quantum-HPC Hybrid Computing Platform", ISC24 Focus session, 2024