[JHPCN シンポジウム]

令和6年度 JHPCN 採択課題ポスター紹介

令和6年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センター利用課題のポスター 6件をご紹介します。

・jh240009 「環境因子を考慮した非電離放射線ばく露における体温上昇評価」 研究代表者 小寺紗千子(名古屋工業大学)

・jh240013 「線状降水帯の気象場変化に対する応答の解明: WRF アンサンブル計算を用いて」 研究代表者 平賀優介(東北大学)

・ jh240049 「NISQ 時代を見据えたバッチ型量子回路シミュレータの開発」
 研究代表者 高橋慧智(東北大学)

· jh240058 「Study on the real effect of non-blocking collective communications」
 研究代表者 南里豪志(九州大学)

・jh240072 「メニーコア CPU, GPU の最適なリソース割り当てに関する研究」
 研究代表者 河合直聡(名古屋大学)

・jh240076 「直交格子法を用いた複雑な境界を含む大規模流体解析および工学応用」 研究代表者 川本裕樹(東海大学)



▶ 電磁界解析プログラムのMPI化

電磁界解析コードのMPI化によるAOBA-Sへの実装お よび最適化について検討を行う。分解能0.1mmの解剖学 的人体数値モデルを用いた電磁界解析は、概算で 384,900万点の逐次計算を行う必要がある。また、空間分 解能要件が異なる電磁界一熱解析間における最適デー タ伝達方法について検討を行う。 様々な暑熱環境課を想定した全身ばく露深部体温解析 様々な暑熱環境を想定した、全身ばく露における電磁 界ドシメトリ評価および温度上昇解析で行う。全身ばく露 における準ミリ波帯以上の報告は、電磁界ドシメトリ評価 に関してもほとんどないため、国際ガイドラインにおいて 有用なデータとなる。



参考文献:

-14 -

¹⁾ Hiraga Yusuke: Response of Band-shaped Rainfall to Changes in Atmospheric Moisture in Tohoku, Japan- Implications for PMP studies -, AOGS 2024, Korea

²⁾ Ryotaro Tahara and Hiraga Y.: Climate Change-induced Thermodynamic Effects on Localized Heavy Precipitation: August 2022 Senjo-kousuitai Event in Tohoku, Japan, AOGS 2024, Korea. 3) Hiraga Yusuke, Tahara R., Kazama S.: Sensitivity of simulated heavy rainfall in Northern Japan to WRF physics parameterization schemes, Under Review, 2024.

Project ID: jh240049

NISQ時代を見据えたバッチ型量子回路シミュレータの開発

高橋 慧智1,森 俊夫2

1東北大学 サイバーサイエンスセンター <u>keichi@tohoku.ac.jp</u>
 2 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター (QIQB) <u>t.mori.giqb@osaka-u.ac.jp</u>

研究目的

ノイズ耐性量子アルゴリズムや変分量子アルゴリズムの研究開発に資 する、**多数の量子回路を同時にシミュレート可能なバッチ型量子回 路シミュレータ**の開発を目的とする.量子計算への注目にともな い、古典計算機上で量子計算機を再現し、量子アルゴリズムの開発や 評価を可能とする量子回路シミュレータが活発に開発されている.シ ミュレート可能な量子ビット数を拡大するため、様々な工夫が行われ ているが、これらのシミュレータのほとんどはノイズが存在しない理 想的な量子計算機を再現するものである.

ー方,量子計算は萌芽期にあり,短期的にはノイズが大きく量子ビット数も限定的な量子計算機しか実現できないNoisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)時代が続くと考えられている.我々は,NISQ時代の量子計算機を対象とした量子アルゴリズムの開発には,次の理由から多数の量子回路を効率的にシミュレートするバッチ型シミュレータが有用であると考える.



ノイズを有する量子計算機のシミュレーション

NISQ量子計算機を実用化するためには、量子誤り訂正や誤り耐性ア ルゴリズムなどノイズの影響を抑制するための手法の開発が不可欠で ある.そのためには実機の量子計算機におけるノイズを再現する必要 があるが、従来の密度行列に基づくノイズのシミュレーション手法は 時間および空間計算量が大きい.一方、近年提案されたモンテカル 口法に基づくシミュレーション手法では、それぞれ異なるノイズを注 入した多数の量子回路のアンサンブルにより密度行列を推定する.こ のような手法の効率的な実装には、多数の回路をシミュレーション することが必須である.

変分量子アルゴリズムの評価

Variational Quantum Algorithm (VQA) は量子・古典ハイブリッドア ルゴリズムの一種であり、NISQ量子計算機でも古典計算機に対する 優位性を実証できる可能性が期待されている. VQAではパラメータ化 された量子回路を繰り返し実行するため、パラメータが異なる多数 の量子回路をシミュレートする必要がある.





研究計画

本課題では、NEC SX-Aurora TSUBASAシステム向けに多数の量子回路を同時にシミュレート可能なバッチ型量子回路シミュレータを開発する.具体的には、以下の研究項目に取り組む.

1. バッチ型計算に適する並列化・ベクトル化方式の検討

単一の量子回路のシミュレーションでは状態ベクトルに対する行列ベ クトル積を並列化するの一般的だが、多数の量子回路をシミュレー ションする場合は、さらに回路レベルでの並列性も利用可能である. これら2階層の並列性を活用し、SX-Aurora TSUBASAのアーキテク チャに適する並列化およびベクトル化方式を検討する. さらに、状態 ベクトルのメモリレイアウトも検討する.



2. 多数の量子回路を効率的に表現するためのAPIの設計

ノイズのシミュレーションでは、回路毎に回路中の異なる場所に「ノ イズゲート」と呼ばれるゲートを挿入する.また、VQAで用いるパラ メータ化量子回路では、回路ごとに量子ゲートのパラメータ(回転ゲー トの回転角度等)を異なる値に設定する.このように多数の回路につい て、少しずつ異なる回路構成を保持する必要がある.回路間で一致す る部分を抽出・共通化して保持するなど、ユーザビリティの高さ、メ モリ効率の高さ、並列計算方式との親和性等を可能な限り並立できる APIやデータモデルを設計する.

	<pre>from qulacs import QuantumCircuit, QuantumState n=3 circuit = QuantumCircuit(n) circuit.add_H_gate(1) circuit.add_RX_gate(2, 0.1) state = QuantumState(n) circuit.update_quantum_state(state)</pre>	<pre>from qiskit import QuantumCircuit from qiskit_aer import AerSimulator qc = QuantumCircuit(2) qc.h(0) qc.cx(0, 1) qc.save_statevector() simulator = AerSimulator(method="statevector") implication = AerSimulator(method="statevector") </pre>
		<pre>state = simulator.run(qc).result().get_statevector()</pre>
阪大QulacsのAPI		IBM QiskitのAPI

3. NISQ向け量子アルゴリズムを用いた性能評価

予備的調査 [1]において単一ゲートレベルやランダム量子回路による動 作確認と基礎的な性能評価は完了しているが、実際に研究されている NISQ向け量子アルゴリズムを用いた性能評価が必要である.本課題で はVQAの一種である,量子サポートベクトルマシンや量子ニューラル ネットワークなどの量子機械学習アルゴリズムを用い,開発するシ ミュレータの性能評価を実施する.



[1] <u>Keichi Takahashi</u>, Toshio Mori, Hiroyuki Takizawa, "Prototype of a Batched Quantum Circuit Simulator for the Vector Engine," *Fourth International Workshop on Quantum Computing Software* held in conjunction with SC23: The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis, Nov. 2023. -16 -

Study on the Real Effect of Non-Blocking Collective Communications

Takeshi Nanri (Kyushu U.), Kengo Nakajima (U. Tokyo), Richard Vuduc (Georgia Tech.), Takeshi Fukaya (Hokkaido U.), Hiroyuki Takizawa (Tohoku U.), Osamu Tatebe (U. Tsukuba), Daisuke Takahashi (U. Tsukuba), Toshihiro Hanawa (U. Tokyo), Shinji Sumimoto (U. Tokyo), Maddegedara Lalith (U. Tokyo), Rio Yokota (Tokyo Tech.), Takahiro Katagiri (Nagoya U.), Keiichiro Fukazawa (Kyoto U.), Susumu Date (Osaka U.), Takashi Soga (Osaka U.), Yoshiyuki Morie (Teikyo U.), Richard Graham (NVIDIA), Martin Schulz (TUM), Bengisu Elis (TU Munich), Dennis Herr (TUM), Hari Subramoni (Ohio State U.), Aamir Shafi (Ohio State U.), Kaushik Kandadi suresh (Ohio State U.), Nathaniel Shineman (Ohio State U.), Benjamin Michalowicz (Ohio State U.), Tu Tran (Ohio State U.), Shulei Xu (Ohio State U.), Bharath Ramesh (Ohio State U.), Felix Wolf (TU Darmstadt), Gerhard Wellein (NHR), Gerardo Cisneros-Stoianowski (NVIDIA), Brody Williams (NVIDIA), Yong Qin (NVIDIA), Fabian Czappa (TU Darmstadt), Ayesha Afzal (NHR), Takeo Narumi (Kyushu U.)

Motivation

- Collective communication is the significant causes of scalability degradation in HPC.
- NBC (Non-Blocking Collective communication) is expected to be a means to overlap this collective communication with computation and hide the communication time, but its use is currently limited to a small number of applications.
- This project provides programmers with correct knowledge about the usage and performance characteristics of NBC and the effect of communication hiding in real applications.

Topic 1: Available progress methods for NBC on each system

- 4 progress methods for NBC will be examined on the following 8 JHPCN supercomputers.
- Documents of the usage will be released for each available method.

Method	AOBA-S	Wisteria- Oddysey	TSUBAME 4.0	Flow I	Flow II	Camphor 3	SQUID	GENKAI (2024.7 ~)
SHARP	in study	NG	ОК	NG	NG	in study	in study	
Tofu Barrier	NG	in study	NG	in study	NG	NG	NG	
Assistant core	NG	ОК	NG	ОК	NG	NG	NG	
Progress thread	ОК	ОК	ОК	ОК	ОК	ОК	ОК	

HPC-X NoSharp

Topic 2: Trends of the effect of overlapping by NBC 16 nodes 1 PPN

- Effect of overlapping by NBC depends on various conditions such as interconnect, progress method, PPN (number of processes per node), etc.
- Preliminary results
 - Overlapping ratio on TSUBAME 4.0
 - (OSU Micro-benchmarks, MPI Iallreduce)
 - Other available methods will be examined on each system
- In addition to the overlap ratio, the effects on the total execution time will be investigated with another benchmark.

2K ze (byte) Topic 3: Investigation of communication hiding algorithms with NBC

8

60 Overlap

20

Description

Krylov subspace iterative methods, like Conjugate Gradient (CG), are essential in scientific computing for solving largescale linear equations with sparse matrices from FEM, FDM, and FVM. Efficient execution and minimized communication are crucial for large-scale parallel computing. Research on Communication-Computation Overlapping (CC-Overlapping) has led to pipelined methods that reduce communication overhead by overlapping communications and computations. Pipelined CG changes the sequence of Krylov iterations using recurrence relations, allowing collective communication for dot products to overlap with heavier computations. Implemented on Intel Xeon Phi systems, pipelined CG achieved a 40% speed-up over original CG. This project evaluates the performance on NVIDIA SHARP systems and aims to develop stable algorithms for lower precision computing. Future plans include developing GPU versions and optimizing collective communications for applications like FFT.



Overlap (%) 60

40

20

16 nodes 2 PPN

Schedule

- (FY.2024) Evaluations on supercomputers with SHARP using CPU, Pipelined algorithms with mixed/lower precision
- (FY.2025) GPU version of the codes, Evaluation/improvement of pipelined algorithm with mixed/lower precision
- (FY.2026) Evaluations on supercomputers with SHARP using CPU/GPU



JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第16回 シンポジウム 2024年度 一般共同研究課題 jh240076

直交格子法を用いた複雑な境界を含む大規模流体解析および工学応用

川本 裕樹 (東海大学)

目的

- 複合的な形状を有する物体,狭い隙間や薄い物体,自由表面を有する流れの現象把握
- 様々な問題に適用可能な固気液混相流解析ソルバの開発および工学分野の諸問題への応用

研究体制

- 代表者: 川本 裕樹 (東海大)
- ・ 副代表者: 佐々木 大輔 (大阪公立大), 滝沢 寛之 (東北大 サイバーサイエンスセンター), 落合 成行 (東海大)
- 共同研究者: 平井 克樹 (東海大),山崎 佑人 (東海大),大崎 歩乃花 (大阪公立大),船田 光星 (大阪公立大)

研究の特色

- ・ 非圧縮性Navier-Stokes方程式を直交格子法により計算
- 符号付き距離関数(Level set法)により物体および気液界面を定義
- Ghost cellを用いた埋め込み境界法で物体近傍の境界条件を決定
- 気液界面にはGhost fluid法を適用し液膜や液滴が混在する流れを考慮
- 自動車部品など機械の高効率化に向けた実問題へ応用
- ・ 流体構造連成により変形を伴う物体を考慮
- MPIとOpenMPによる並列計算への対応





変形する柔軟膜翼周りの流れ

今年度の研究内容

- ・ ジャーナル軸受隙間内へのマイクロバブルの混入による摩擦低減効果の検討
- 軸受の表面テクスチャを考慮した隙間内における潤滑剤の挙動予測

自動車エンジン内のピストンリング周辺の混相流解析

- 相変化を伴うヒートパイプ内部の気液二相流解析
- 平板翼に配置された複数の突起の影響調査および流れのメカニズムの検討
- ・ 流体構造連成解析による柔軟膜翼の空力性能予測

参考文献

- S. Takahashi et al., Journal of Applied Mathematics, 252478, 2014
- Y. Kawamoto et al., Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing, 14(6), 2020
- D. Sasaki et al., 14th International Conference on Flow Dynamics, 2023

