程式碼架構

<u>察構</u>:本次作業將題目編碼為組合最佳化問題,在假設最多需要m個邏輯閘的情況下,給予每個量子位元選擇0-control、1-control、NOT 邏輯閘或三者皆非的複製位元之機率,藉由KNQTS 演算法搜尋出合法的最佳電路,表 1 為KNQTS 演算法流程,其參數定義為:g表示目前的世代數, P_{total} 表示每一代所產生的解(電路)數目,delta則為在KNQTS 演算法中,用來調整機率矩陣的自適應參數值。

KNQTS 演算法流程

- 1. 初始化世代數g←0
- 2. 初始化機率矩陣 Q(g)
- 3. 初始化歷史最佳解 gb 與歷史最差解 gw
- 4. while (尚未達成終止條件) do
- 5. $g \leftarrow g + 1$
- 6. 根據 Q(g-1)測量產生解
- 7. 修復不合理的解 (一個量子邏輯閘中具有多個 NOT 者)
- 8. 計算適應值
- 9. 找出當代最佳解 sb、當代最差解 sw 並更新歷史最佳解 gb、歷史最差解 gw
- 10. 計算出 sb 與 sw 的漢明距離
- 11. 調整delta值
- 12. 依據歷史最佳解 gb、歷史最差解 gw 更新機率矩陣 Q(g)
- 13. end while

表 1: KNQTS 演算法流程

編碼: 假設一個 n-bit 的電路最多由m個量子可逆邏輯閘所組成,而 G 代表m個邏輯閘中所有可能的 廣義 Toffoli 邏輯閘之集合。因為是 n-bit 的電路,所以每一個廣義的 Toffoli 邏輯閘均由 n 顆量子位元所組成。而每顆量子位元皆為 0-control、1-control、NOT 邏輯閘和複製位元(非控制位元與目標位元者)的疊加狀態。

使用公式

$$|q\rangle \equiv |q\rangle_{12} \equiv |q\rangle_1 \otimes |q\rangle_2 = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle$$

將兩顆單顆量子位元表示成一組量子位元 $\left|q^{p}_{ij}\right|$,其中i表示一個邏輯閘中的第i顆量子位元,j表示一組 電 路 中 的 第 j 個 邏 輯 閘 , p 则 表 示 在 一 個 世 代 中 的 第 p 組 電 路 。 其 中 $i=1,2,3,...n,j=1,2,3...m,p=1,2,3,...P_{total}$ 。

根據量子的特性,測量前的量子位元會是所有可能的疊加態,而測量過後就會陷落在特定的狀態,為了方便區分,編碼時我們將測量前的量子位元稱為 $\left|q^{p}_{ij}\right\rangle$,測量後的量子位元稱為 c^{p}_{ij} 。 KNQTS 演算法會對每一組 $\left|q^{p}_{ij}\right\rangle$ 做測量,如圖 1 所示,每組量子位元都各自有 $\|\alpha\|^{2}$ 、 $\|\beta\|^{2}$ 、 $\|\gamma\|^{2}$ 、 $\|\delta\|^{2}$ 的機率陷落到 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、 $|11\rangle$ 的狀態,將這些狀態表示成十進制的話則可分別代表「0」、「1」、「2」、「3」。當 $c^{p}_{ij}=0$ 時,代表 0-control 的控制位元; $c^{p}_{ij}=1$ 時代表 1-control 的控制位元; $c^{p}_{ij}=2$ 時代表無作用的複製位元;而 $c^{p}_{ij}=3$ 時則代表 NOT 邏輯閘。

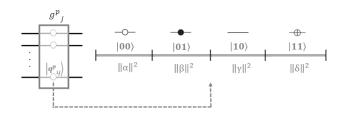


圖 1:量子位元編碼示意圖

對電路中的邏輯閘編碼時,會將第 j 個邏輯閘編碼為 $g^p_{j}(c^p_{1j},c^p_{2j},...c^p_{ij}...,c^p_{nj})$,其中 $g^p_{j}\in G,c^p_{ij}\in\{0,1,2,3\}$ (圖 2)。

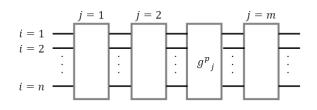


圖 2: 電路編碼表示圖

程式碼流程

● <u>相關參數設定</u>:此處主要為 KNQTS 演算法所需的相關參數,以及一些實驗的相關設定。Q表示演算法中的機率矩陣,而 X 為每個世代所產生的所有電路, fit 則是用來記錄每組電路的適應值。

```
// parameter for KNQTS and Exp
#define rand_seed 114
#define population 100 // population 100
#define loop 5000 // generation 5000
#define test 50
#define delta 0.002
#define delta 0.002
#define mMAX 70
#define mMAX 70
#define mMAX 10
#define FunctionNum 1

int m = 30, n = 7;

bool changeBest = false;
/* about 0 matrix */
double Q[mMAX][mMAX][mMAX] = {0};

int x[population][mMAX][mMAX] = {0};

/* about fitness */
double fit[population] = {0};
int best = 0, worst = 0; // population of best and worst
double b = 0.0, w = 100;
int best = 0, worst = 0; // population of best and worst
double b = 0.0, w = 100;
int bestAns = 20000000; // Find the best ans in the 50Exp

vector<int> output;
int allgb[mMAX][mMAX] = {0};
int mingb[mMAX][mMAX] = {0};
int mingb[mMAX][mMAX] = {0};
int mingb[mMAX][mMAX] = {0};
int mingb[mMAX][mMAX] = {0};
int last_ham = NNT_MAX;
double adaptive_delta = delta;
```

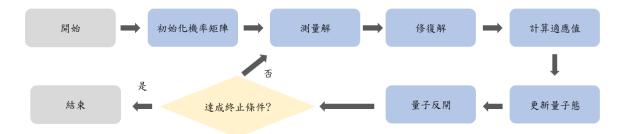
註:前文中的Ptotal在程式碼中為參數 population

重函式: 首先可以藉由輸入函數來選擇要找的函數和預設的m值。

```
int main()
{
    input_target();
    srand(rand_seed);
    int total = 0;
    int generation = 0;

    cout << "m = ";
    cin >> m;
}
```

接下來便是 KNQTS 演算法的主要流程,全部流程如下圖所示,後面會一一解釋各個步驟。



> 初始化機率矩陣

概念: 首先,我們需要初始化一個 $n \times m$ 的機率矩陣 Q(0)(圖 3),裡面的每一個元素 $Prob_{ij} = [\|\alpha_{ij}\|^2 \|\beta_{ij}\|^2 \|\gamma_{ij}\|^2 \|\delta_{ij}\|^2 \|\beta_{ij}\|^2 \|\beta_{ij}\|^$

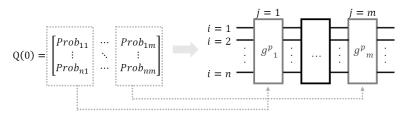


圖 3:機率矩陣 Q(0)與電路的對應

此外,在初始化階段時會將 $\|\alpha_{ij}\|^2$ 、 $\|\beta_{ij}\|^2$ 、 $\|\gamma_{ij}\|^2$ 、 $\|\delta_{ij}\|^2$ 初始化為0.25,表示選中0.1,2,3的機率皆相等。

程式碼:

```
void init()
{
    /* initialize Q matrix */
    for (int i = 0; i < n; i++)
    {
        for (int j = 0; j < m; j++)
        {
            for (int k = 0; k < 4; k++)
              {
                 Q[i][j][k] = 0.25;
              }
        }
    }
}</pre>
```

▶ 測量(產生)解

概念: 再來我們會產生 P_{total} 組亂數矩陣,用以代表隨機產生的電路。對每組電路我們會隨機產生 $n \times m$ 個範圍在[0,1]之間的隨機變數 r^p_{ij} ,而其測量結果如下所示。

$$c^{p}_{ij} = \begin{cases} 0, & 0 \leq r^{p}_{ij} \leq \|\alpha_{ij}\|^{2} \\ 1, & \|\alpha_{ij}\|^{2} < r^{p}_{ij} \leq \|\alpha_{ij}\|^{2} + \|\beta_{ij}\|^{2} \\ 2, & \|\alpha_{ij}\|^{2} + \|\beta_{ij}\|^{2} < r^{p}_{ij} \leq \|\alpha_{ij}\|^{2} + \|\beta_{ij}\|^{2} + \|\gamma_{ij}\|^{2} \\ 3, & \|\alpha_{ij}\|^{2} + \|\beta_{ij}\|^{2} + \|\gamma_{ij}\|^{2} < r^{p}_{ij} \leq 1 \end{cases}$$

程式碼:

▶ 修復解

概念:在上一步隨機生成電路時,我們可能產生一個邏輯閘中有不只一個目標位元的不合法現象(圖4),此步驟中會參考機率矩陣 Q 中的機率分布來修復。首先,會先挑出此類邏輯閘中所有選中 NOT 元件的位元,接著比較它們選中 NOT 元件的機率,將機率最大的保留,並將剩餘的替換為除了 NOT 元件之外,選中機率最高的元件。



圖 4: 測量解時產生的不合理邏輯閘

程式碼:

Procedure Repair

```
begin
```

```
初始化所有選中 not 位元的c^p_{ij}裡選中 not 機率最高的 maxProbIndex ← -1
初始化所有選中 not 位元的c^p_{ij}裡選中 not 機率最高的 maxProb \leftarrow 0
for all c^p_{ij} \in g^p_i do
      if c^p_{ij} = 3 then
             if \|\delta_{ij}\|^2 > \max \text{Prob then}
                          if maxProbIndex \neq -1 then
                 c_{maxProbIndexi} \leftarrow
Prob_{ij} + \max \left\{ \left\| \alpha_{maxProbIndexj} \right\|^2 \right\}
                                                                                     \|\beta_{maxProbIndexj}\|^2、\|\gamma_{maxProbIndexj}\|^2} 的方
                            maxProbIndex \leftarrow i
                            maxProb \leftarrow \|\delta_{ii}\|^2
             else
                                       c^{p}_{ij} \leftarrow Prob_{ij}中 \max\left\{\left\|\alpha_{ij}\right\|^{2}, \left\|\beta_{ij}\right\|^{2}, \left\|\gamma_{ij}\right\|^{2}\right\}的索引值
             end else
             end if
   end if
```

橘色字體部分是在尋找目前選中 NOT 元件機率最高者

綠色字體部分則是此位置選中 NOT 的機率不是最高的,所以會被換成除了 NOT 之外機率最高者

▶ 計算適應值

end for

概念: 適應值函數為 KNQTS 演算法中幫助我們更有效率找到最佳解的關鍵。而在本次作業中主要研究在給定的條件下,如何以最小成本完成電路,故我們必須考慮一個電路的正確性及其成本代價。

此處將第 p^{th} 個電路的適應函數分為 fit_1^p 和 $fit_2^p \circ fit_1^p$ 用來判斷目前電路的正確程度,定義如下: $fit_1^p = \mathrm{COP}/2^n$

其中 $COP(Correct\ Output\ -bits)$ 代表電路和可逆函數值做比較後的正確輸出數目,而 2^n 表示可逆函數的總輸出數,例如 3-bit 的電路會有 $2^3=8$ 個輸出。

而 fit_2^p 用來判別解的好壞,在量子可逆電路中,若一個邏輯閘不具有目標位元 NOT,便無法構成一個量子邏輯閘,我們將邏輯閘的數目加總後稱為 WG(Wire Gate),並定義 fit_2^p 為:

$$fit_2^p = WG/m$$

代表在假設最多需要m個邏輯閘的情況下,有WG個邏輯閘是沒有作用,可以被消除的。因此僅需要m-WG個邏輯閘便可完成電路。

接著我們會將 fit_1^p 和 fit_2^p 合併成適應函數 Fit_1^p ,其定義為:

$$Fit^p = fit_1^p + W^p \times fit_2^p$$

程式碼:

```
void fitness()
{
    for (int i = 0; i < population; i++)
    {
        double fit1 = 0.0, fit2 = 0.0, w1 = 1, w2 = 0.0;
        int COP = cntCOP(i);
        int gate = cntGate(i);
        int WG = m - gate;

        fit1 = (double)COP / (double)pow(2, n);
        if (fit1 == 1)
        {
            w2 = 0.4;
        }

        fit2 = 0.0;

        /* count fit2 */
        if (gate == 0) // not correct -> change to a big number
        {
                 fit2 = (double)(1 - WG);
            }
        else
            {
                      fit2 = (double)WG / (double)m;
            }
            fit[i] = w1 * fit1 + w2 * fit2;
        }
}
```

這裡的 cntCOP 作法是:將 $0\sim2^n$ 依序作為輸入到電路(透過 $correct\ function$)中,再判斷輸出結果是否與最初輸入的 $output\ deline$ 相同。

```
int cntCOP(int indexOfx)
{
    int cnt = 0;
    for (int i = 0; i < pow(2, n); i++)
    {
        if (correct(indexOfx, i, output[i])) // is correct
        {
            cnt++;
        }
    }
}
return cnt;
}</pre>
```

 $\underline{\text{correct function}}$:將輸入的數字轉成 2 進制,透過程式模擬經過電路的過程,再將最後的輸出換成 10 進制來和 output 比對

註:紅框部分為模擬電路通過的過程

更新量子態

概念與程式碼:此步驟會先根據適應值選出當代最佳解 sb 和當代最差解 sw,並和歷史最佳解 gb 與最差解 gw 進行更新。

$$\begin{cases} gb = sb & if \ Fit^{sb} \ge Fit^{gb} \\ gw = sw & if \ Fit^{sw} \le Fit^{gw} \end{cases}$$

再來會根據上一步所選出的歷史最佳解與歷史最差解,使用參數delta更新機率矩陣 Q(g)。首先我們會計算出 sb 和 sw 間的漢明距離,並和上一代的漢明距離做比較。此處將漢明距離簡稱為HD,如下方公式所示,若此代的距離較上代大,代表目前整體較不收斂,會對參數delta乘以一個比 1 大的數字 μ ;反之,若此代的距離較上代小,代表目前整體趨於收斂,會對delta乘以 $(2-\mu)$ 以減少參數delta的值。另外,當此代漢明距離與前一代相同時,則維持相同的delta值。

```
\begin{cases} delta = delta \times \mu & if \ HD_g > HD_{g-1} \\ delta = delta \times (2 - \mu) & if \ HD_g < HD_{g-1} \\ delta & if \ HD_g = HD_{g-1} \end{cases}
```

調整完delta後,再來會用它更新機率矩陣 Q(g)的值。我們會比較歷史最佳解 gb 與歷史最差解 gw 的每一顆量子位元 $c^{gb}{}_{ij}$ 與 $c^{gw}{}_{ij}$,由於我希望選中最佳解的機率可以越高越好,而選中最差解的機率可以越低越好,所以若 $c^{gb}{}_{ij} \neq c^{gw}{}_{ij}$,則增加 Q(g)中 $Prob_{ij}$ 選中 $c^{gb}{}_{ij}$ 的機率並減少選中 $c^{gw}{}_{ij}$ 的機率。

註:更新機率矩陣時可能會將最差解的機率扣到變成負的,這會導致在第二步中的測量出現問題,所以在這邊如果扣完的機率小於0,就會做修復機率的動作,將選中 c^{gw}_{ij} 的機率改成0,而為了確保相加完的機率等於1,所以會同時將選中 c^{gb}_{ij} 的機率改成1-其他機率。

▶ 量子反閘

概念:由於我希望選中最佳解的機率可以越高越好,所以當目前 Q 矩陣裡選中 c^{gb}_{ij} 的值不到 0.25 的時候,會對 $Prob_{ij}$ 中的機率做量子反閘,將裡面最高的機率值和 c^{gb}_{ij} 互換,同時將裡面的機率最小值和 c^{gw}_{ij} 互換。

程式碼:

```
if (Q[i][j][gb[i][j]] < 0.25) // NOT
{
    /* find max */
    int maxIndex = 0, minIndex = 0;
    double max = Q[i][j][0], min = Q[i][j][0];
    for (int k = 1; k < 4; k++)
{
        if (Q[i][j][k] > max)
        {
             max = Q[i][j][k];
            maxIndex = k;
        }
        else if (Q[i][j][k] < min)
        {
             minIndex = k;
        }
}

/* swap the Prob. of gb and max */
        double tmp = Q[i][j][maxIndex];
        Q[i][j][maxIndex] = Q[i][j][gb[i][j]];
        Q[i][j][gb[i][j]] = tmp;

/* swap the Prob. of lw and min */
        tmp = Q[i][j][minIndex];
        Q[i][j][minIndex] = Q[i][j][gw[i][j]];
        Q[i][j][gw[i][j]] = tmp;
}</pre>
```

土黄框: 找目前最大和最小的機率

綠框: 做交換機率

劃出電路圖及真值表

判斷是矩陣裡面去決定印出來的 gate

這邊的條件判斷是印出中間的連接線

```
void getTheLines()
    for (int i = 0; i < bestAns; i++) // through m gates</pre>
        bool lineStart = false;
        int start = 0, end = 0;
        for (int j = 0; j < n; j++) // through n bits
            if (!lineStart)
                if (mingb[j][i] == 2)
                    start++;
                else
                    end = start;
                    lineStart = true;
                if (mingb[j][i] != 2)
                    end = j - 1;
        for (int j = start; j <= end; j++)</pre>
            line[j][i] = true;
```

這裡判斷 wire gate 時就不印出中間的連接線。

```
void TruthTable()
    int OutputLength = output.size();
    int tmp = OutputLength;
    int BitsNumber = 0;
    int tmpinput[nMAX][mMAX] = {0};
    while (tmp != 1)
       BitsNumber += 1;
       tmp /= 2;
    for (int i = 0; i < n; ++i)
       for (int j = 0; j < bestAns; ++j)
            tmpinput[j][i] = mingb[i][j];
    cout << endl
         << endl
         << "===== Truth Table =====\n";</pre>
    for (int i = 0; i < pow(2, BitsNumber); i++)</pre>
        string request = toBinaryString(i, BitsNumber);
       string output;
        int flag = 1;
        int notbit = 0;
        for (int j = 0; j < BitsNumber; j++)</pre>
            cout << request[BitsNumber - j - 1] << " ";</pre>
        cout << " -> ";
        for (int j = 0; j < bestAns; j++)
        { // 0 for 0 control,1 for 1 control, 2 for wire, 3 for not
            flag = 1;
            for (int k = 0; k < BitsNumber; k++)</pre>
                if (tmpinput[j][k] == 1 && request[BitsNumber - k - 1] != '1')
```

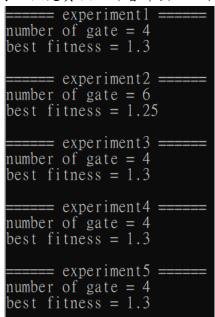
列印出該電路的真值表

程式使用說明

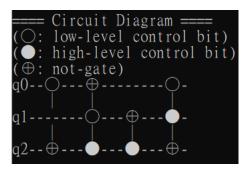
● 執行程式後,會顯示提示讓使用者輸入目標的可逆函數

■ 選取 C:\Users\user\Desktop\量子作業\期末報告\Quantu Input the target circuit: 7 0 1 3 4 2 6 5 Your Input:7 0 1 3 4 2 6 5

● 再來就會開始執行5次實驗,而每次做完實驗,都會印出此次找到的最少邏輯閘數目與適應值



● 在程式的最後會印出 5 次實驗裡所找到的最佳電路 (修改過電路圖)



● 並且印出電路的真值表

		===	Truth	Table =====
0	0	0	->	1 1 1
0	0	1	->	0 0 0
0	1	0	->	0 0 1
0	1	1	->	0 1 1
1	0	0	->	1 0 0
1	0	1	->	0 1 0
1	1	0	->	1 1 0
1	1	1	->	1 0 1