一次元アーキテクチャへの搭載に向けた量子回路設計支援アプリケーション

東京大学大学院　情報理工学系研究科　電子情報学専攻

長谷川研究室　修士1年　内藤壮俊

自己紹介

- プログラミング経験
  - 競技プログラミング (C++)
  - ゲーム開発 (Unity C#)
  - 研究，ウェブ開発 (Python, JavaScript)
- 量子コンピューティングの経験
  - 量子ゲート型：IBM Quantum Challenge 2020 に参加した程度
  - 量子アニーリング型：今回が初めて

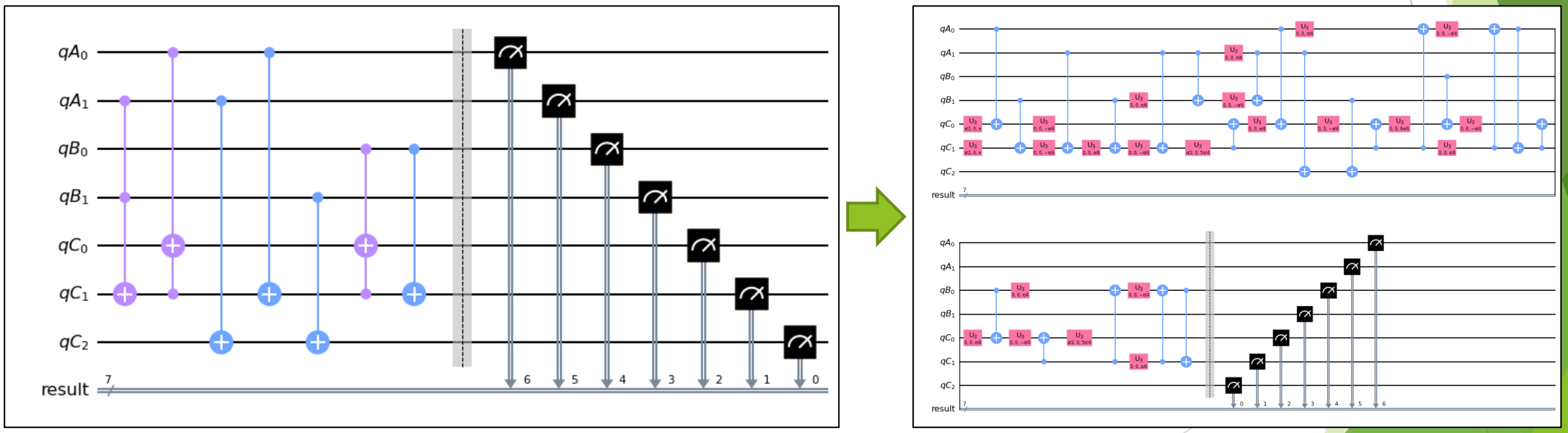
参加したきっかけ

- 量子アニーリングを使って，量子ゲートの回路設計を支援できないか？
  - コラボって感じがしてカッコいい
- 現存するゲート型量子コンピュータは数十ビット程度の規模なので，扱う問題の大きさとしてちょうど良い…？
  - アニーリングが先行している分だけ，アドバンテージが活かせそう

背景説明

量子ゲート型計算機

- ゲート通過による状態の変化を利用
- 任意の量子回路はU3ゲート(1入力，赤色)とCXゲート(2入力，青色)に展開可能



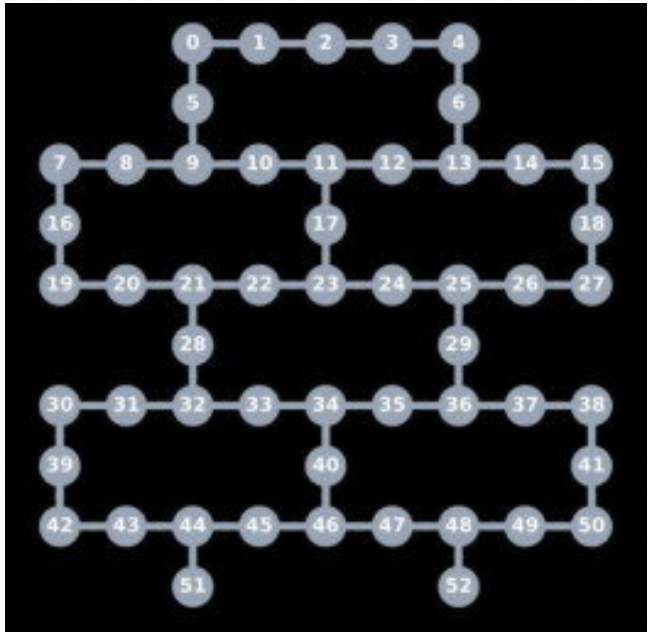
図：IBM Qにて作成した量子回路の例.
(左：回路設計段階における見た目.　右：U3ゲートとCXゲートに展開した結果.)

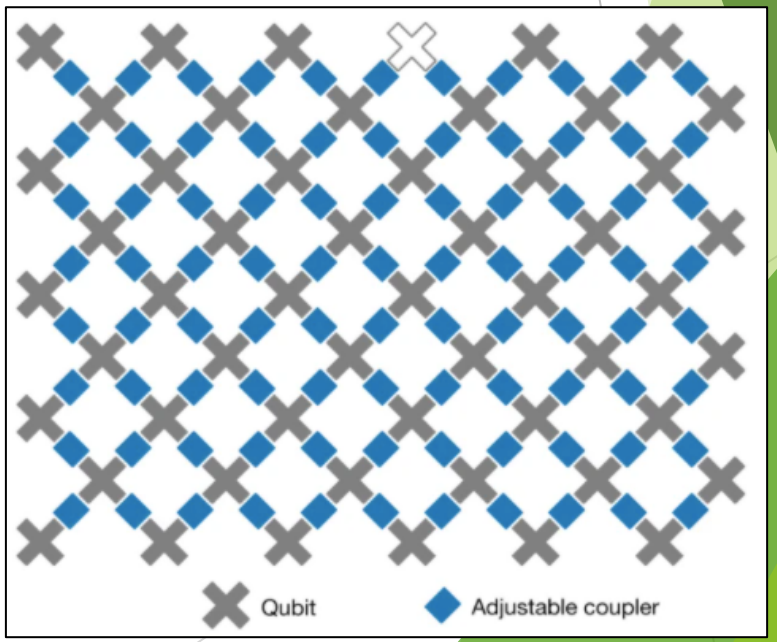
量子回路の実機搭載

- 「設計図上のビット」と「デバイス上のビット」の対応を考える必要がある
- CXゲートは物理的に隣り合う2ビットにしか作用できない
  - 離れている場合は？　→　SWAPゲートを使って入れ替える必要がある

左図：
IBM「Rochester」における
量子ビットの配置.

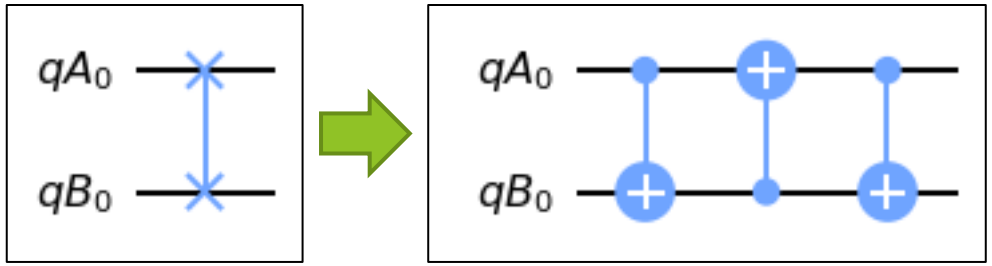
右図：
Google「Sycamore」における
量子ビットの配置.





量子回路のコスト

- 今回は，エラー率によってコストを見積もることとする
  - CXゲートのエラー率はU3ゲートの10倍程度
  - SWAPゲートはCXゲート3つから構成される

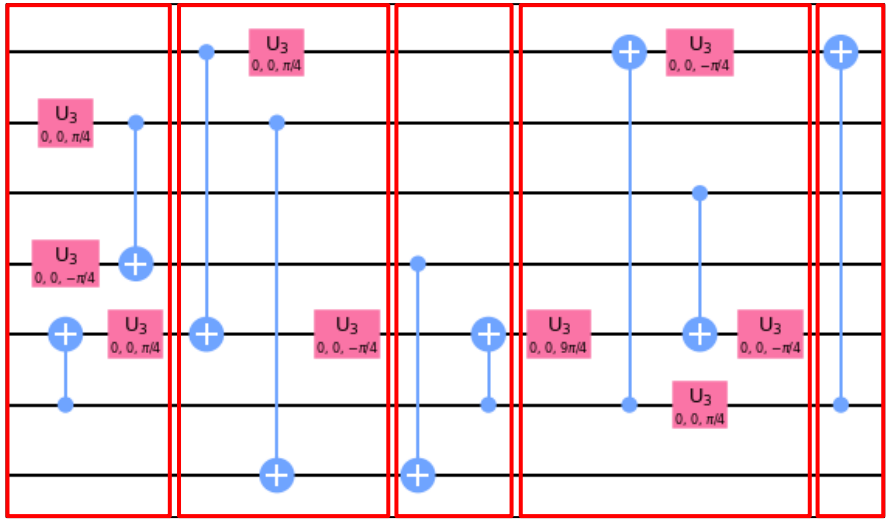


図：SWAPゲートの構成.

- CXゲートやSWAPゲートの個数が支配的
  - エラー率の比は U3ゲート：CXゲート：SWAPゲート = 1：10：30
  - SWAPゲートの個数をできるだけ減らしたい

扱う問題

- 量子ビットが一直線上に配置されたアーキテクチャにおいて，
  CXゲートを含むレイヤーのそれぞれに対し，量子ビットの配置を決定する
  - 制約：　　CXゲートは物理的に隣り合う2ビットにしか作用できない
  - コスト：　　レイヤー間に挿入するSWAPゲートの個数



図：レイヤーの構成.

古典的なアプローチ (動的計画法による高速化)

- 量子ビットの個数 N に対し，各レイヤーにおける配置は $N!$ 通り
- レイヤーの枚数 M に対して，全体の取りうる状態数は $(N!)^M$ 通り

- 配置に対する暫定的なコストを持っておくことで，
  空間計算量 $O(M \cdot N!)$，時間計算量 $O(M \cdot (N!)^2)$ で解くことができる

- $N = 10$ で $(N!)^2 \approx 1.3 \times 10^{13}$ なので，小規模の回路にしか適用できない.

背景説明　まとめ

- 実機搭載において，CXゲートは物理的に隣り合うビットにしか作用できない
- ビットが離れている場合，SWAPゲートでビットを入れ替える必要がある
- SWAPゲートのエラー率は非常に高いため，使う個数をできるだけ減らしたい
- 古典的解法は計算量が非常に大きく，小規模な回路にしか使えない

提案手法

バイナリ変数を用いた定式化

- 各レイヤーにおける量子ビットは $[0, 1, \cdots, N-1]$ の並び替えとなる
- $\boldsymbol{Q_{mnv}}$：「レイヤー m における n 番目は，設計図における v 番目に対応する」
  - MN^2 個の量子ビットが必要

- one-hot 制約
  - 「設計図におけるビットは1つのビットに対応する」：$\sum_{n=0}^{N-1} \boldsymbol{Q_{mnv}} = 1$
  - 「レイヤーにおけるビットは1つのビットに対応する」：$\sum_{v=0}^{N-1} \boldsymbol{Q_{mnv}} = 1$

- CXゲートによる制約
  - 作用させる2ビットは物理的に隣り合っていなければならない
  - ペナルティ関数：$\sum_{(a,b)\in[CX-gates]} \sum_{(i,j),|i-j|\geq 2} \boldsymbol{Q_{mia}}\,\boldsymbol{Q_{mjb}}$

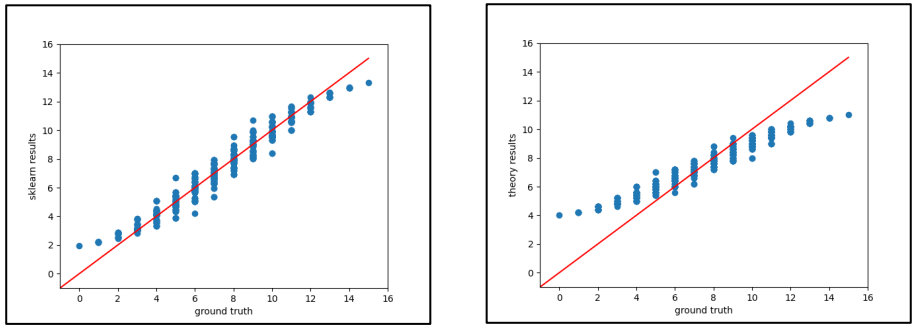
コスト関数の定式化 (初期案)

- $C_{ij} = 1 \leftrightarrow C[i] = j \leftrightarrow A[i] = B[j]$ を用意
  - 隣り合うレイヤー A, B 間において，シンボルが一致しているかどうか
  - $C_{ij} = \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv}\, B_{jv}$
- 転倒数 (= シンボルどうしが入れ替わった回数) を以下のように定式化
  - $cost = \sum_{0 \le i_1 < i_2 < N} \sum_{0 \le j_2 < j_1 < N} C_{i_1 j_1} \cdot C_{i_2 j_2}$

- しかし，うまくいかず…
  - 制約条件 $C_{ij} = \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv}\, B_{jv}$ は，2次多項式の形をしている
  - ペナルティの関数は $\underbrace{\left(C_{ij} - \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv}\, B_{jv}\right)^2}_{\text{2次式の2乗 = 4次式}} = 0$ となり，2次以下の多項式で表せない

転倒数の近似によるアプローチ

- 重回帰分析を試した結果
  - 10^{14} オーダーの係数が出てきてしまったが，まあまあ綺麗にフィットしていた
- 期待値による推定を行った結果
  - 係数は計算できるが，のっぺりした分布に…



図：重回帰分析，期待値による転倒数の推定結果．
横軸が正しい値，縦軸が推定値である．

- 驚くべきことに，両者は互いに一次関数の関係にあった
  - そのため，重回帰分析のフィッティング結果を生成できるように

転倒数の推定モデルの実装

- 期待値による推定：転倒数 $\approx \left\{\sum_{0\le i,j<N}\left(\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}\right)\cdot C_{ij}\right\}$
- 重回帰分析の結果へ変換： $\mathrm{y}=\frac{2N-2}{\mathrm{N}}x-\frac{(N-1)(N-2)}{4}$

- $\rightarrow$ 転倒数 $\approx \frac{2N-2}{\mathrm{N}}\left\{\sum_{0\le i,j<N}\left(\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}\right)\left(\sum_{v=0}^{N-1}A_{iv}\,B_{jv}\right)\right\}-\frac{(N-1)(N-2)}{4}$ と書ける
  - レイヤー $m,\ m+1$ 間においては，$A_{iv}=\boldsymbol{Q_{miv}},\ B_{jv}=\boldsymbol{Q_{(m+1)jv}}$

- 代入すると，以下のように整理できる
  - $\underbrace{\sum_{m=0}^{M-2}\left\{\sum_{0\le i,j<N}\frac{(N-1)(i+j)-2ij}{N}\left(\sum_{v=0}^{N-1}\boldsymbol{Q_{miv}}\,\boldsymbol{Q_{(m+1)jv}}\right)\right\}}_{\text{この部分を最小化したい.}}-\underbrace{(M-1)\frac{(N-1)(N-2)}{4}}_{\text{定数項.}}$

定数項.
最小化においては無視される.

QUBO形式への変換

- $cost = \sum_{m=0}^{M-2} \left\{ \sum_{0 \le i,j < N} \frac{(N-1)(i+j)-2ij}{N} \left(\sum_{v=0}^{N-1} \boldsymbol{Q_{miv}}\, \boldsymbol{Q_{(m+1)jv}} \right) \right\}$
- $constraint = \sum_{m=0}^{M-1} \left\{ \underline{\sum_{v=0}^{N-1} \left(1 - \sum_{n=0}^{N-1} \boldsymbol{Q_{mnv}}\right)^2 + \sum_{n=0}^{N-1} \left(1 - \sum_{v=0}^{N-1} \boldsymbol{Q_{mnv}}\right)^2} + \underline{\sum_{(a,b) \in [CX-gates]} \sum_{(i,j),|i-j| \ge 2} \boldsymbol{Q_{mia}}\, \boldsymbol{Q_{mjb}}} \right\}$

  one-hot 制約

  CXゲートによる制約

- $model = constraint \times \lambda + cost$ として構成した
  - $model$ の項数(= モデルの規模)は $O(MN^3)$ 個
  - 制約 >> コストとするために，とりあえず $\lambda = 100$ と設定

提案手法　まとめ

- SWAPゲートの個数 = 転倒数 は4次式で表されるため，2次以下で近似を試みた
- 重回帰分析の結果 (= 最適解?) では係数が発散してしまったが，
  期待値による推定結果から変換可能だった
- $model = constraint \times \lambda + cost$ として，$O(MN^3)$ サイズのモデルを構築

パフォーマンスの評価

評価：コスト最小化の性能比較

- ランダムに生成したデータ10個に対してコストを計算した
  - 古典的解法は最適解を出力するので，必ず 古典的解法 ≤ Amplify解法 となる
  - Amplify解法においては，$\lambda = 100$, $timeout$ = 1秒 として実行

- N, M の大きいケースで誤差が大きくなった
  - 制約の重み λ を小さくする + $timeout$ を伸ばすことでコスト抑制が可能

N	3	4	5	6
古典的解法 $(M = 5)$	0.6	1.4	2.1	4.1
Amplify解法 $(M = 5)$	0.6	1.4	2.1	4.5
古典的解法 $(M = 20)$	3.8	13.0	15.0	24.9
Amplify解法 $(M = 20)$	3.8	13.1	18.9	34.0

表：それぞれの解法における
コストの平均値.

評価：実行時間の比較

- $M = 5$ にて， N を動かした時の実行時間(秒)を比較した

N	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
古典的解法	0.0007	0.0084	0.4551	8.9532	566.95	—	—	—	—	—
Amplify解法	1.8336	1.8184	1.4685	1.1751	1.2766	1.3620	1.3654	1.6483	6.1014	20.047

表： N を動かした時の実行時間の比較.
$6 \leq N$ においてAmplify解法の方が高速となっている.

- N が大きくなると，Amplify解法でも時間がかかる傾向に
  - $O(MN^3)$ サイズのモデル構築に時間がかかっていた
- といっても，古典的解法は $O(M \cdot (N!)^2)$ なので飛躍的向上と言える
  - $N = 10$ のとき，$(10!)^2 \div 10^3 \approx$ 132億倍の高速化に成功

パフォーマンスの評価　まとめ

古典的解法

- 厳密解を計算する
- $O(M \cdot (N!)^2)$ の時間がかかる
- 小規模 $(N \leq 6)$ の回路に強い

Amplify解法

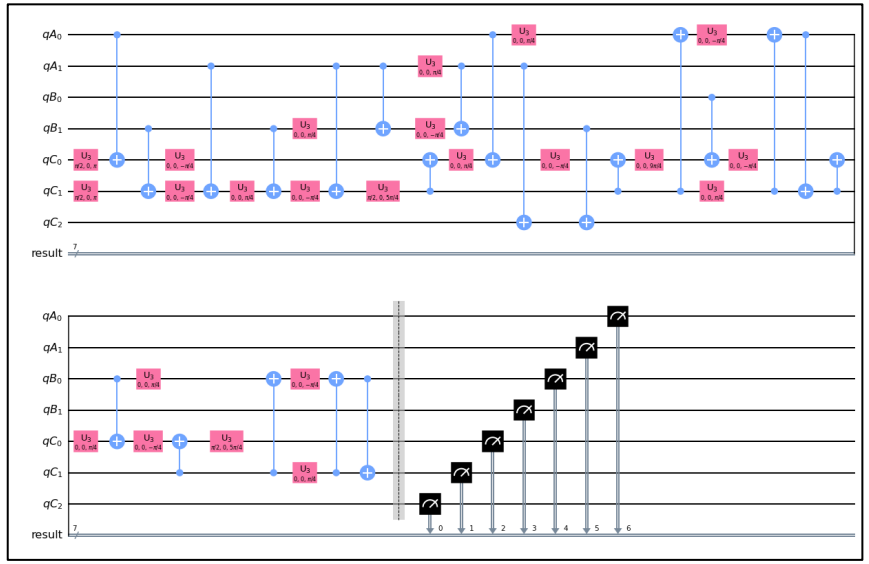
- 近似解を計算する (λで調整可)
- $O(MN^3) + timeout$ の時間がかかる
- 中規模 $(7 \leq N \leq 50)$ の回路に強い

⇒ Amplify解法は古典的解法より実用的と言える

アプリケーションの作成

OpenQASMとの連携

- 「OpenQASM」という言語で書かれた回路を入力できるようにしたい
- U3ゲートとCXゲートに分解済みの回路を入力に用いる



図：展開した後の回路.

```
 ・・・
u3(pi/2,0,pi) qC[0];
cx qA[0],qC[0];
u3(0,0,-pi/4) qC[0];
u3(pi/2,0,pi) qC[1];
cx qB[1],qC[1];
u3(0,0,-pi/4) qC[1];
cx qA[1],qC[1];
u3(0,0,pi/4) qC[1];
cx qB[1],qC[1];
u3(0,0,pi/4) qB[1];
u3(0,0,-pi/4) qC[1];
cx qA[1],qC[1];
cx qA[1],qB[1];
u3(0,0,pi/4) qA[1];
u3(0,0,-pi/4) qB[1];
```

```
cx qA[1],qB[1];
u3(pi/2,0,5*pi/4) qC[1];
cx qC[1],qC[0];
u3(0,0,pi/4) qC[0];
cx qA[0],qC[0];
u3(0,0,pi/4) qA[0];
u3(0,0,-pi/4) qC[0];
cx qC[1],qC[0];
u3(0,0,9*pi/4) qC[0];
cx qB[0],qC[0];
u3(0,0,-pi/4) qC[0];
cx qC[1],qA[0];
u3(0,0,-pi/4) qA[0];
u3(0,0,pi/4) qC[1];
cx qC[1],qA[0];
cx qA[0],qC[1];
```

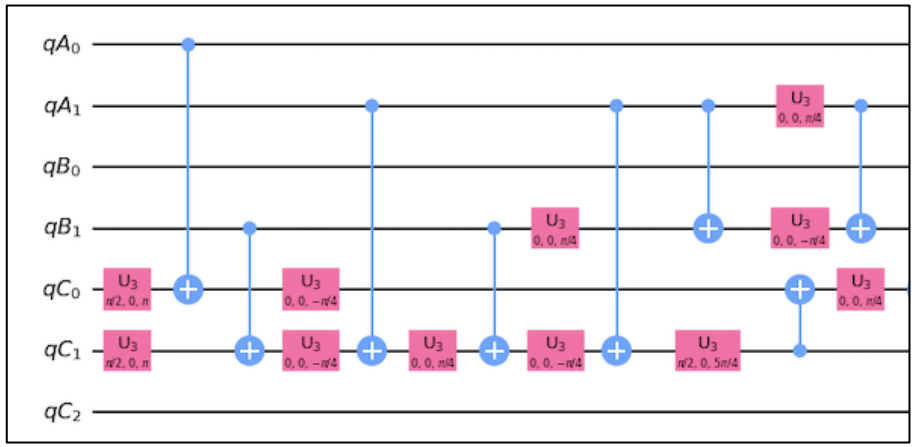
```
cx qC[1],qC[0];
u3(0,0,pi/4) qC[0];
cx qB[0],qC[0];
u3(0,0,pi/4) qB[0];
u3(0,0,-pi/4) qC[0];
cx qC[1],qC[0];
u3(pi/2,0,5*pi/4) qC[0];
cx qC[1],qB[0];
u3(0,0,-pi/4) qB[0];
u3(0,0,pi/4) qC[1];
cx qC[1],qB[0];
cx qB[0],qC[1];
cx qA[1],qC[2];
cx qB[1],qC[2];

 ・・・
```

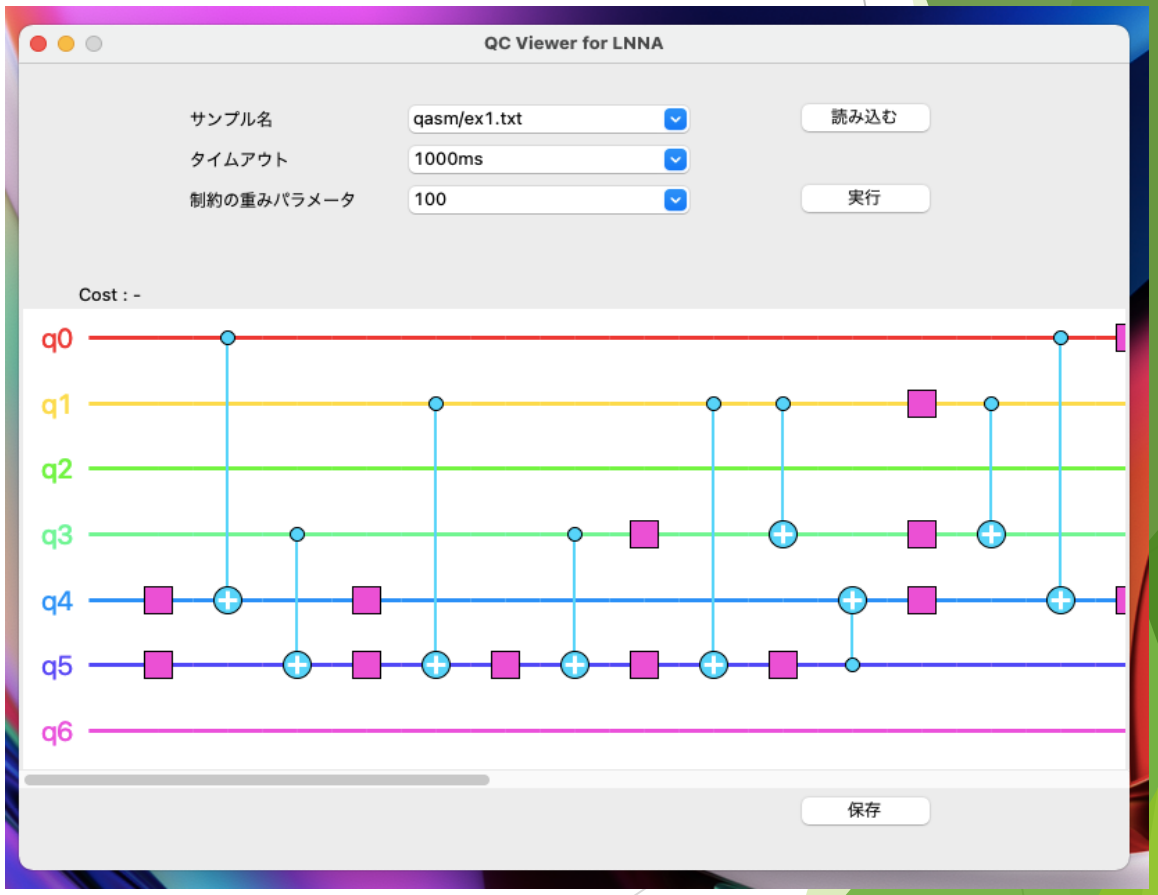
図：出力されるOpenQASMプログラム.

アプリ機能紹介：量子回路の描画

- tkinterというライブラリで実装
- 設計図段階の回路と，Amplify解法の実行結果を描画する



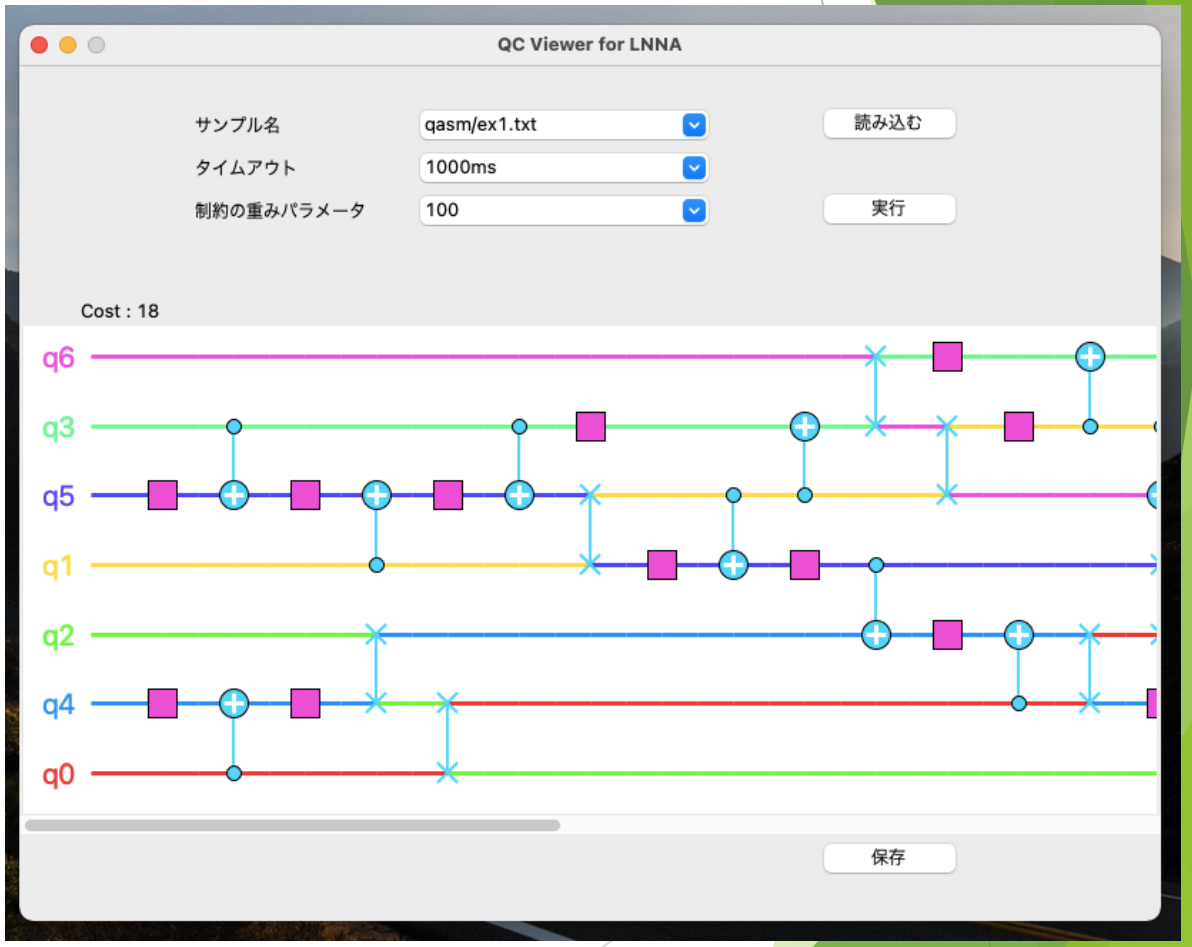
図：読み込んだ回路設計図の一部.
(IBM Q上で描画．)



図：ビジュアライザ上での描画結果.

アプリ機能紹介：Amplifyの呼び出し

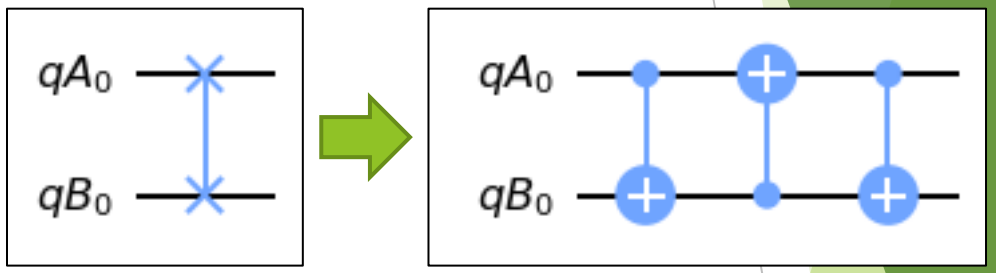
- Amplify解法を実行
  - タイムアウト $(timeout)$ の調整可
  - 制約重みパラメータ (λ) の調整可
- 実行結果の描画
  - SWAPゲートは「X—X」で描画されている
- 良い解が見つかるまで調整・再試行が可能
  - 回路設計の効率化につながる



図：Amplify解法の実行結果.

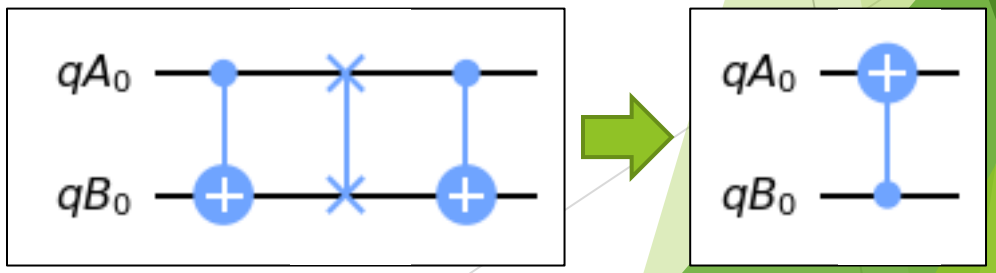
アプリ機能紹介：OpenQASM形式で出力

- SWAPゲートを3つのCXゲートに置き換えることで OpenQASM形式に書き換えることが可能
  - 設計図段階の回路を入力して，アプリで実機搭載可能な回路に変換して，その結果を出力する



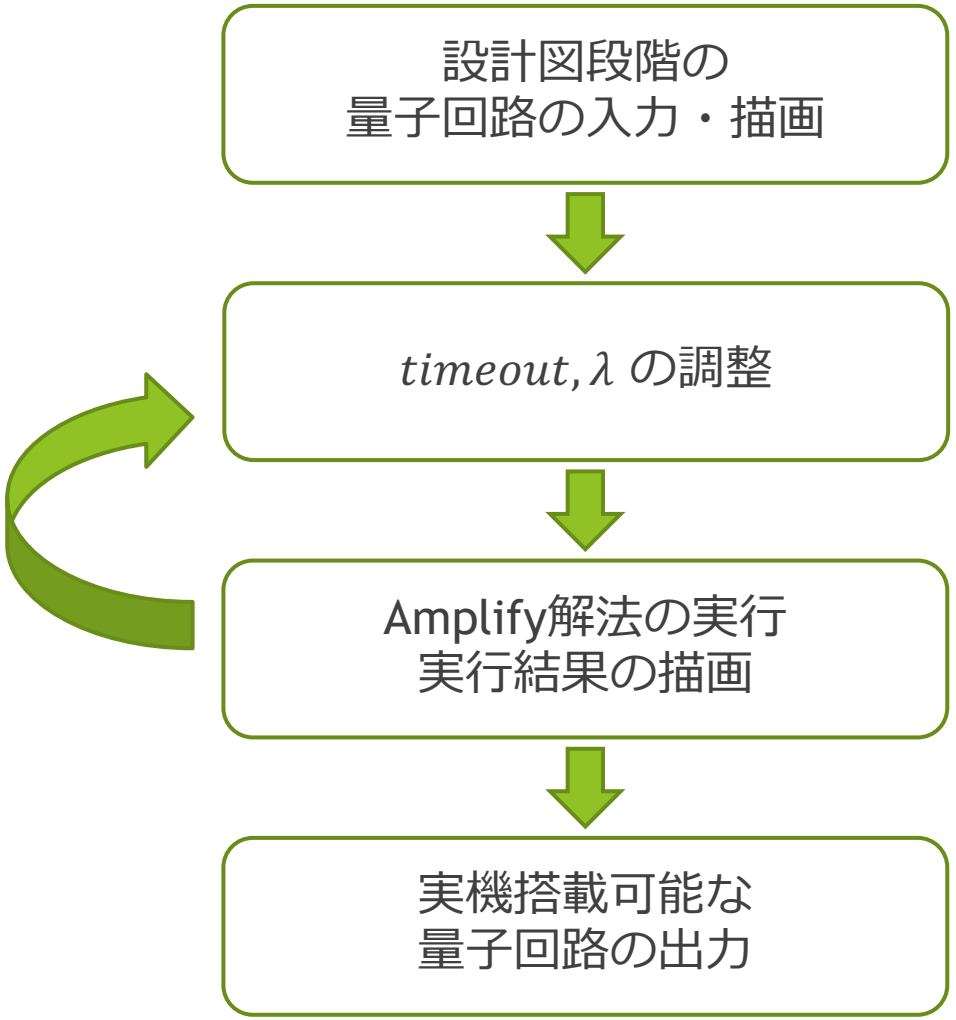
図：SWAPゲートの展開.

- CXゲートの個数が最も少なくなるように置き換えを実行
  - 上下反転を考えると，置き換えは2通りある
  - CXゲートが相殺する場合がある



図：CXゲートの個数が減るケース.

アプリケーションの作成　まとめ



- 一連の作業がアプリ内で完結
- フィードバックが高速
- 他アプリとの互換性

発表は以上になります.
ありがとうございました.