LNNA向け回路生成における swapゲート個数最小化問題

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

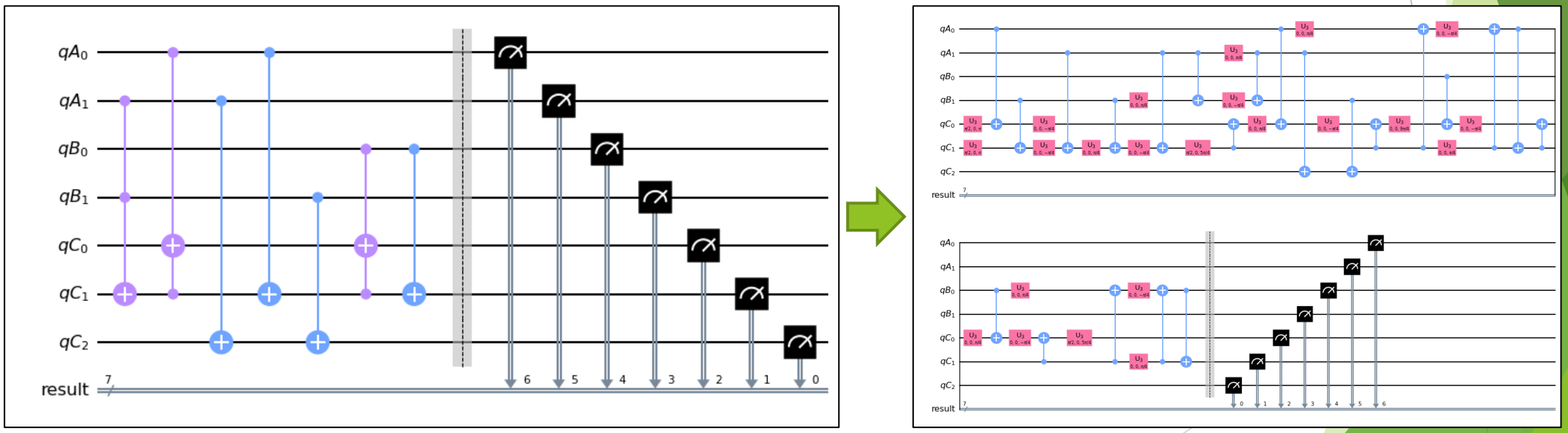
第一章
テーマ説明

量子計算のアプローチ

- 量子アニーリング型
  - 多変数二次関数の最小化問題(組み合わせ最適化)を解ける
    - それぞれの変数は 0 か 1 のどちらかを取る
  - 量子ビットの個数は数千個オーダーと，小～中規模な問題なら実用化可能
  - Fixstars Amplifyで使っているのはこっち
- 量子ゲート型
  - 汎用計算機．古典コンピュータも(理論的には)シミュレートできる
  - 量子ビットの個数は非常に少ない(数十個のオーダー)
  - GoogleやIBMが取り組んでいる計算機はこっち
  - 今回扱うテーマはここの話

量子回路

- ゲート通過 = ユニタリ変換 による状態の変化を利用
- 任意の回路は1入力ゲートと2入力ゲートに展開することができる
- 2入力ゲートにおけるエラー率は1入力ゲートの10倍程度



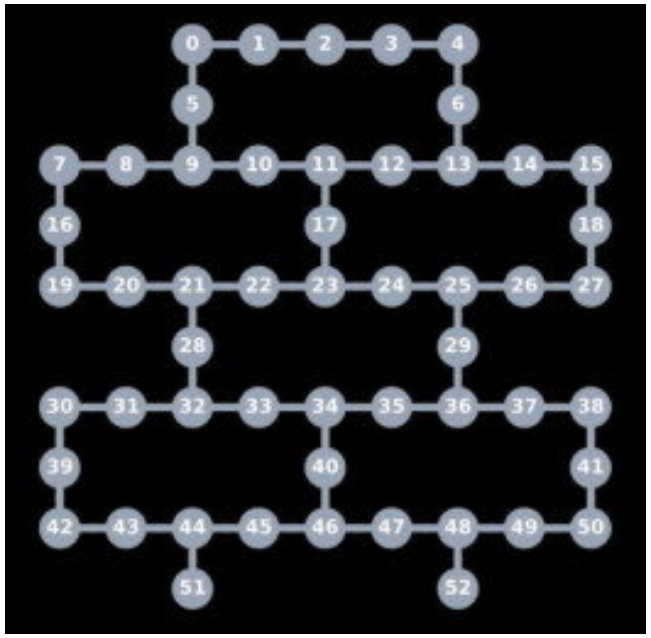
図：IBM Qにて作成した量子回路の例.
(左：回路設計段階における見た目.　右：1入力ゲートと2入力ゲートに展開した結果.)

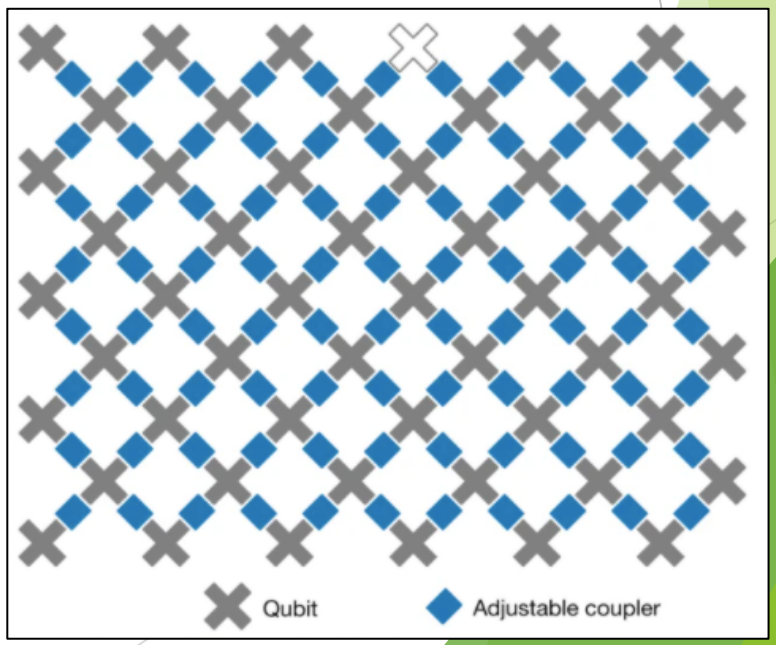
量子回路の実機搭載

- 「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
- 2入力ゲートは隣り合う2ビットにしか作用させられない
- 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.



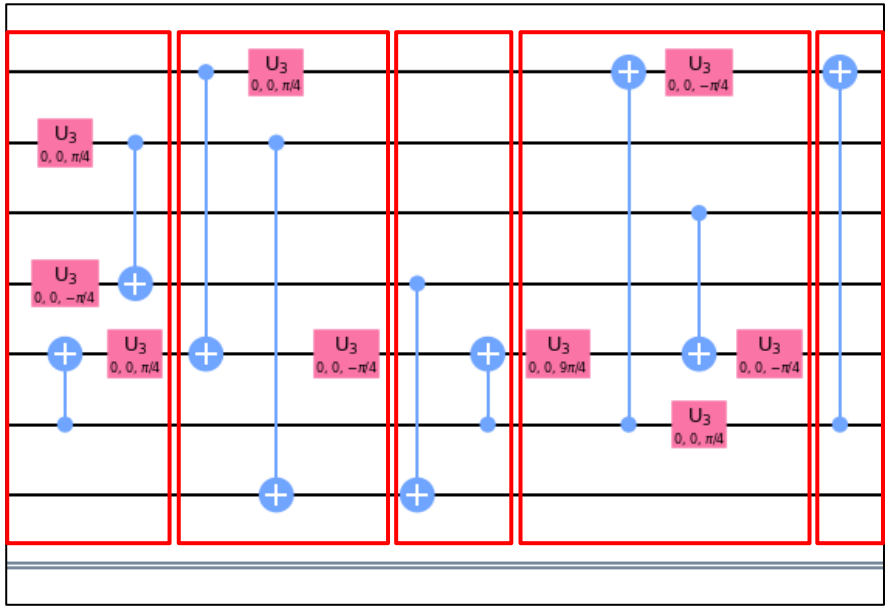


Linear Nearest Neighbor Architecture

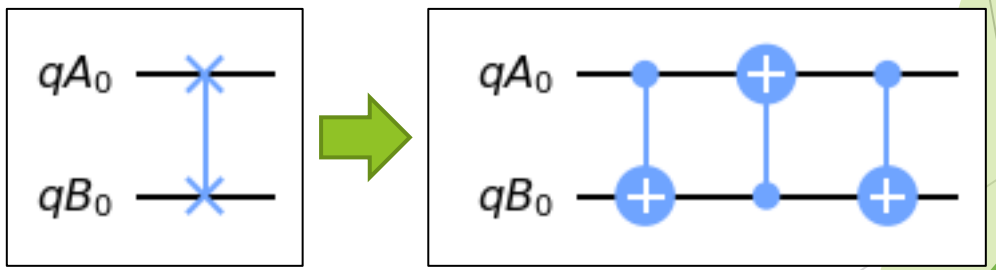
- 量子ビットが1次元状に並んでいるアーキテクチャのこと
- SWAPゲートによる並び替えはバブルソートと非常に似ている
  - 挿入する個数 = バブルソートの交換回数 = 転倒数 となるため，扱いやすい問題に

扱う問題

- 量子ビットを共有しない2入力ゲートどうしを一つのレイヤーにまとめる
- 2入力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
- 挿入するSWAPゲートの個数を最小化したい
  - SWAPゲート1つに，CXゲートを3つも使ってしまう



図：レイヤーの構成.



図：SWAPゲートの構成.

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.

第二章
とりあえず実装してみる

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

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

コスト関数の定式化

- SWAPゲートの個数 = バブルソートの交換回数 の総和を減らしたい
  - $A:[3,0,4,1,2] \rightarrow B:[2,1,3,4,0]$ の交換回数は？
- $B=[0,1,2,\cdots,N-1]$ なら，初期配置 A における転倒数を求めれば良い
  - 転倒数：$A_i > A_j \ and \ i < j$ となる組の総数
  - 全ての組に対して足し合わせればいいので $O(N^2)$
- $B=[0,1,2,\cdots,N-1]$ とは限らない場合，どう定式化する…？

コスト関数の定式化 (初期案)

- 置換の合成も置換なので，$(A \rightarrow B) = (C \rightarrow [0, 1, 2, \cdots, N-1])$ となる C を見つけてあげれば良い？
  - A : $[3, 0, 4, 1, 2]$ → B : $[2, 1, 3, 4, 0]$ なら，
    C : $[2, 4, 3, 1, 0]$ → $[0, 1, 2, 3, 4]$ となる
  - 「B の配置を $[0, 1, 2, 3, 4]$ とみなした時の A の配置」を求める問題

- $C_{ij} = 1 \leftrightarrow C[i] = j \leftrightarrow A[i] = B[j]$
  - A[i] のシンボルと B[j] のシンボルが等しいかどうか
  - ベクトルの内積で定式化できる？
  - $C_{ij} = \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv} B_{jv}$

コスト関数の定式化 (初期案)

- いくら待っても実行可能解が見つからない……
- 何がダメだったか
  - 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
- 任意の A, B 間の転倒数は4次多項式で定式化されるので，
  これの厳密な値を組み込むことがそもそも不可能だった

第三章
転倒数のフィッティング

転倒数のフィッティング

- A, B 間の転倒数をどうにかして2次以下で表したい
  - 厳密解は諦めて，2次以下でフィッティングを試みる

- 使える変数
  - 「同じシンボルがどこからどこへ移動したか」
    - つまり，$C_{ij} = \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv} B_{jv}$ のこと
    - C_{ij} の線形和で転倒数を表現したい，という話になる
  - $B = [0, 1, 2, \cdots, N-1]$ とは限らないので，シンボル間の大小関係は使えない
  - 変数の個数は N^2 個
    - 対称性の除去により， N が奇数の時は $\frac{1}{4}(N+1)^2$ 個，偶数の時は $\frac{1}{4}(N^2+2N)$ 個に

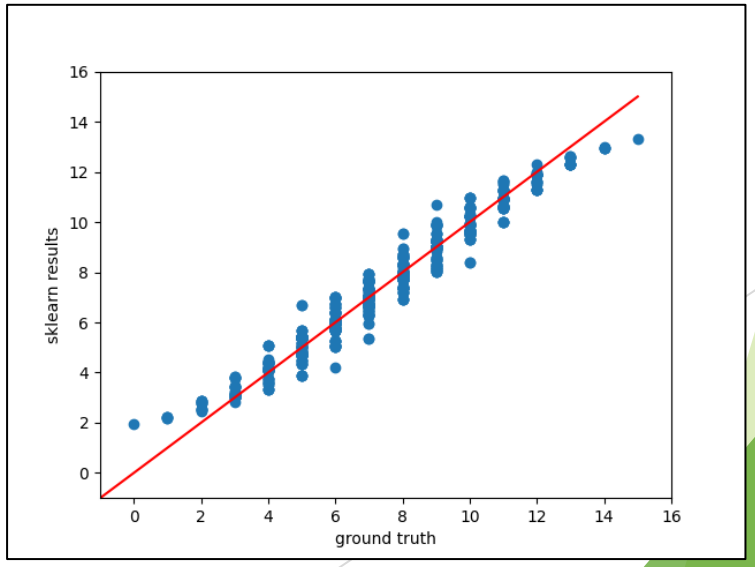
重回帰分析によるアプローチ

- 重回帰分析なら scikit-learn でできるので，これで転倒数を推定してみる
- 係数，切片ともにすごい値になってしまった

```
coefficient
[-4.71281238e+12 -1.46172282e+12 -5.40448318e+13 -5.40448318e+13
 -1.46172282e+12 -4.71281238e+12  1.78936673e+12 -5.07937422e+13
 -5.07937422e+13  1.78936673e+12 -1.03376851e+14 -1.03376851e+14]
intercept
212600593697132.16
```

図：係数，切片の出力結果．
10^{14} オーダーの数字が見られる．

- でも，プロットしてみると良い感じに見える



図：$N = 6$ の場合の推定結果．
(横軸：正解　縦軸：推定値)

期待値によるアプローチ

- ある並び替えにおいて，左から $i+1$ 番目のシンボルが $j+1$ 番目に動いた際，他のシンボルと入れ替わっている確率を求める
  - $A:[3,0,4,1,2] \to B:[2,1,3,4,0]$ なら，$(i,\ j)=(1,\ 4)$
  - この場合，0 は3つのシンボル $(1,\ 2,\ 4)$ と入れ替わっている

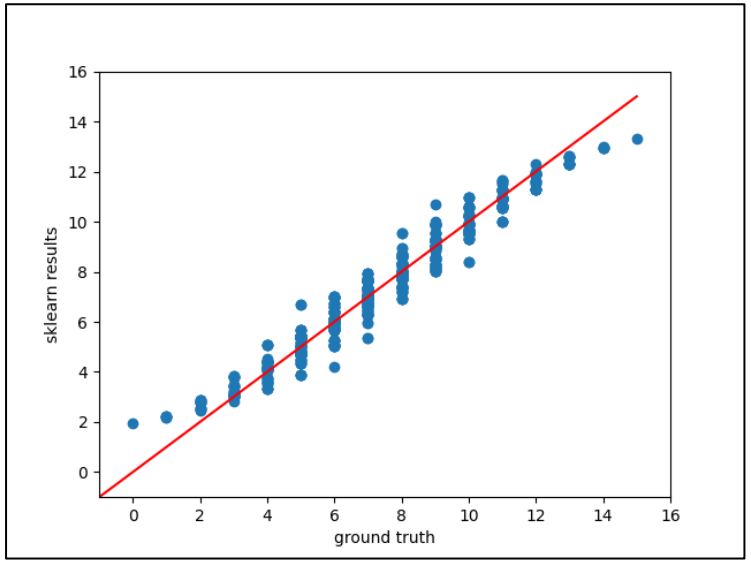
- 自分以外の $N-1$ 個のシンボルに対し，左側 → 右側 or 右側 → 左側 と動いた確率を足し合わせ，(重複を考えて) 2で割ると求められる

$$\frac{1}{2}(N-1)\left\{\frac{i}{N-1}\cdot\frac{N-1-j}{N-1}+\frac{N-1-i}{N-1}\cdot\frac{j}{N-1}\right\}=\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}$$

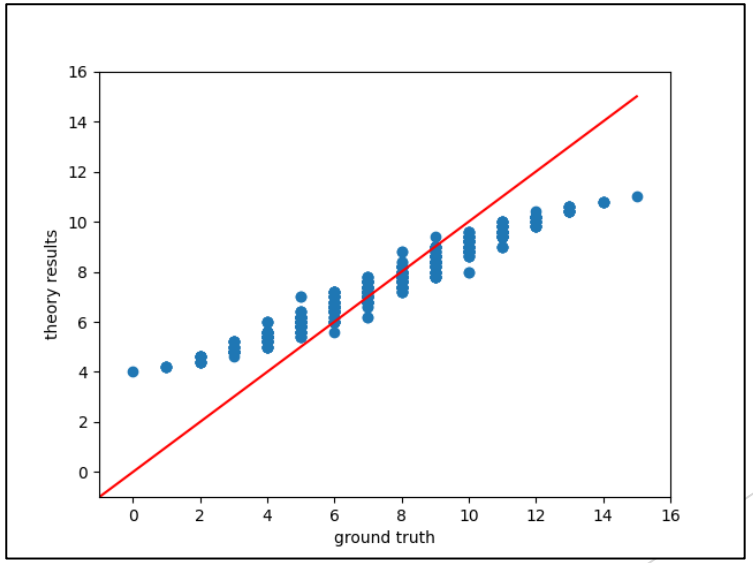
- 転倒数 $\approx \sum_{0\le i,j<N}\left(\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}\right)\cdot C_{ij}$ として予測を行ってみた

期待値によるアプローチ

- のっぺりした分布になってしまった…
- 一方で，分布の形状は重回帰分析による推定結果に非常に似ている
  - 両者の間に何か対応が見えるのでは…？



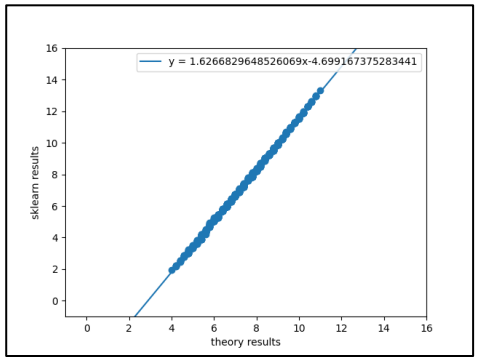
図：重回帰分析による推定結果



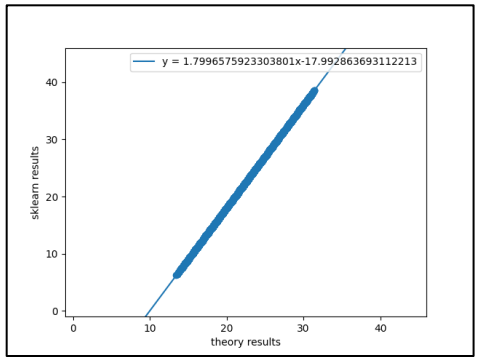
図：期待値による推定結果

予測結果の相関を調べる

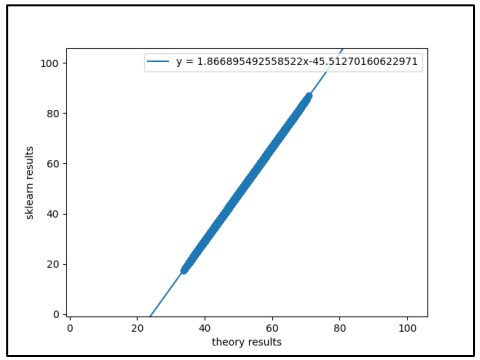
- 横軸を「期待値による推定」，縦軸を「重回帰分析による推定」としてプロット
- 下図は，左から $N = 6,\ \mathrm{N} = 10,\ \mathrm{N} = 15,\ \mathrm{N} = 20$ の場合
  - $N \geq 10$ に対しては，500000 サンプルをランダムに(復元抽出で)取り出して分析した



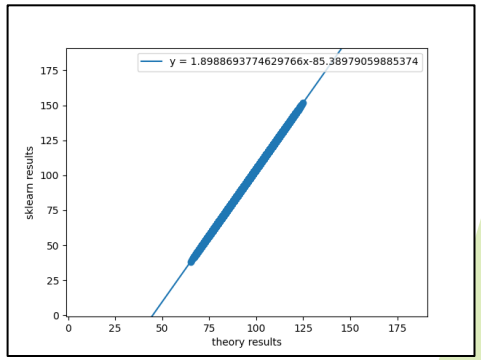
$y = 1.627x - 4.699$
$R^2 = 0.999355$



$y = 1.800x - 17.993$
$R^2 = 0.999956$



$y = 1.867x - 45.513$
$R^2 = 0.999978$



$y = 1.899x - 85.390$
$R^2 = 0.999991$

- 1次関数の関係になっていると言える ($1 - R^2$ は縦軸の計算誤差によるものか)

転倒数の推定

- 「重回帰分析による推定結果」は，転倒数を一番良く推定できると考えられる
- 「期待値による推定結果」に1次関数を作用させると，
  「重回帰分析による推定結果」に一致させられることが分かった
- → 期待値による推定結果だけから「最も良いモデル」を構成できる！
  - 例えば $\mathrm{N}=6$ $(y=1.627x-4.699)$ なら，
    転倒数 $\approx 1.627\left\{\sum_{0\le i,j<N}\left(\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}\right)\cdot C_{ij}\right\}-4.699$ として表現できる

一次関数の係数についての考察

- 量子ビットの個数 N に対して，一次関数は $\mathrm{y} = \frac{2N-2}{\mathrm{N}} x - \frac{(N-1)(N-2)}{4}$ と書けそう
  - しかし，予想の証明にはまだ至らず…

- (誤差) = (予測値) - (実測値) として記録

N	3	4	5	6	7	8	9	10	15	20
傾き	1.3333	1.5000	1.5987	1.6267	1.6856	1.7425	1.7738	1.7990	1.8664	1.8992
切片	-0.500	-1.500	-2.974	-4.699	-7.196	-10.379	-13.933	-17.975	-45.490	-85.419
傾きの誤差	0	0	-0.0013	-0.0400	-0.0287	-0.0075	-0.0040	-0.0010	-0.0003	-0.0008
切片の誤差	0	0	0.026	0.301	0.304	0.121	0.067	0.025	0.010	0.081

表：N を動かした時の，一次関数の傾きと切片の変化．
誤差は小さく，上記の予想とおおよそ一致していると言える．

転倒数の推定モデルの実装

- 「同じシンボルがどこからどこへ移動したか」： $C_{ij} = \sum_{v=0}^{N-1} A_{iv}\, B_{jv}$
- 転倒数 $\approx \left\{ \sum_{0 \le i,j < N} \left(\frac{i+j}{2} - \frac{ij}{N-1} \right) \cdot C_{ij} \right\}$ に $\mathrm{y} = \frac{2N-2}{\mathrm{N}} x - \frac{(N-1)(N-2)}{4}$ を適用
- → 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
  - 複雑な見た目だけど，ちゃんと2次多項式で表現できている！
- あとは，この式をもとに目的関数を設計するだけ

コスト関数の定式化 (改良案)

- 目的関数：各レイヤー間の転倒数 (の推定値) の和
- $\sum_{m=0}^{M-1}\left\{\frac{2N-2}{\mathrm{N}}\left\{\sum_{0\le i,j<N}\left(\frac{i+j}{2}-\frac{ij}{N-1}\right)\left(\sum_{v=0}^{N-1}A_{iv}\,B_{jv}\right)\right\}-\frac{(N-1)(N-2)}{4}\right\}$
  - レイヤー $m,\ m+1$ 間においては，$A_{iv}=Q_{miv},\ B_{jv}=Q_{(m+1)jv}$ となる
    - 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」
- 代入すると，以下のように整理できる
  - $\underbrace{\sum_{m=0}^{M-1}\left\{\sum_{0\le i,j<N}\frac{(N-1)(i+j)-2ij}{N}\left(\sum_{v=0}^{N-1}Q_{miv}\,Q_{(m+1)jv}\right)\right\}}_{\text{この部分を最小化したい.}}-\underbrace{(M-1)\frac{(N-1)(N-2)}{4}}_{\substack{\text{定数項.}\\ \text{最小化においては無視される.}}}$

第四章
改良案の実装とその評価

バイナリ変数を用いた定式化(再掲)

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

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

QUBO形式への変換

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

- $model = constraint \times \lambda + cost$ 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，$\lambda = 100$ と設定
  - N, M が大きくなる = コストが大きくなるにつれて， λ も大きくするべきか

評価：用いたデータ

- 2入力ゲートを含むレイヤーを M 枚生成した $(M = 5)$
  - レイヤー1枚あたり， $1\sim\left\lfloor\frac{N}{2}\right\rfloor$ 個の2入力ゲートを含むように構成
  - 2入力ゲートの個数，作用先はランダムに決定
  - 2入力ゲートどうしで量子ビットの共有は起こらない

- 古典解法 $(N \leq 6)$ ，Amplify解法 $(N \leq 26)$ を10回ずつ試して
  コストや実行時間を比較した
  - 実験では，$timeout = 1\ s$ として実行
  - コストの比較においては， $M = 20$ も検討した

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個に対するコストの平均値を記録した
  - 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，出力した結果をもとに厳密なコストを計算した

- $\mathrm{M} = 20$ での誤差が大きくなっている
  - 転倒数の近似が原因？ λ を調整してみる？ $timeout$ を伸ばす？

N	3	4	5	6
古典的解法 $(\mathrm{M} = 5)$	0.6	1.4	2.1	4.1
Amplify解法 $(\mathrm{M} = 5)$	0.6	1.4	2.1	4.5
古典的解法 $(\mathrm{M} = 20)$	3.8	13.0	15.0	24.9
Amplify解法 $(\mathrm{M} = 20)$	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
  - 古典的な $O(M \cdot (N!)^2)$ 解法では $N = 7$ が限界だった

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

評価：実行時間の内訳

- Amplify解法に対して，実行時間を以下の3つに分けて測定した
  - 「準備時間」：量子ビット，制約条件，コスト関数の生成
  - 「探索時間」：”result = solver.solve(model)” でかかる時間
  - 「解析時間」：出力結果のデコード，結果に基づく厳密なコストの計算
- 準備時間が大きく増える傾向にあった

N	5	10	15	20
準備時間(s)	0.013 (0.004)	0.473 (0.194)	3.607 (1.232)	25.818 (13.732)
探索時間(s)	1.316 (0.377)	1.191 (0.053)	1.436 (0.248)	1.886 (0.497)
解析時間(s)	0.001 (0.000)	0.003 (0.000)	0.005 (0.001)	0.006 (0.000)

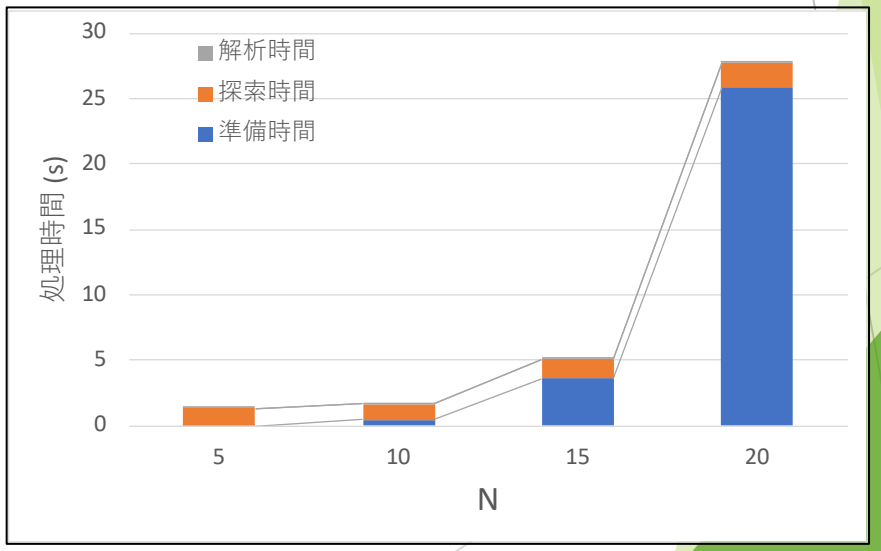


表 / 図：実行時間の内訳．N が大きくなるにつれて準備時間が増える傾向が見てとれる．
カッコ内は(不偏)標準偏差．

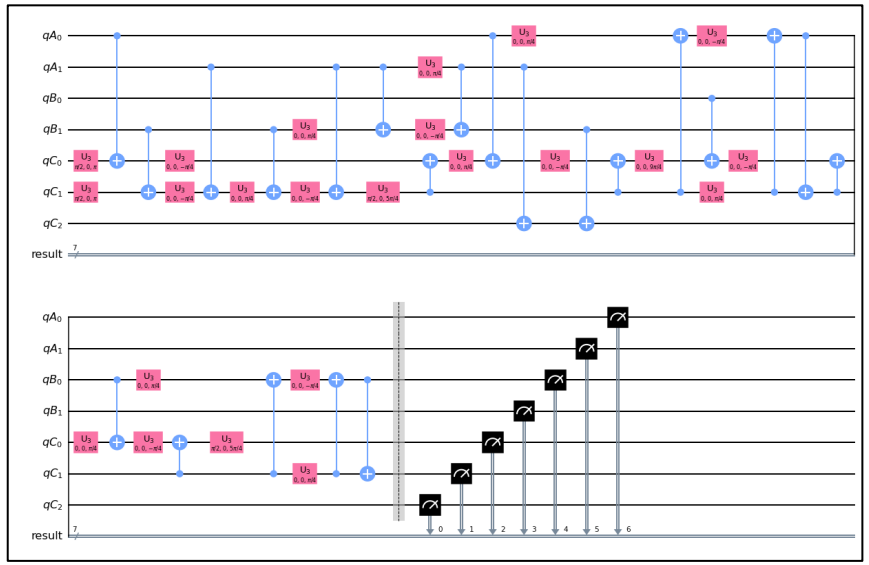
評価：実行時間の見積もり

- 探索にかかる時間は固定だが，制約条件とコスト関数が $O(MN^3)$ 項あるため古典計算がオーバーヘッドとなり，全体的で $O(MN^3)$ となると推測される
- といっても，古典的解法は $O(M \cdot (N!)\text{^}2)$ なので飛躍的向上と言える
- $N = 50$ (現時点での最大級の量子ビット数) でも数分あれば計算できるはず

第五章
実問題への応用

OpenQASMとの連携

- 1入力と2入力ゲートに展開した後の回路は「OpenQASM」という言語で記述される
- 下の例では，1入力ゲートは ”u3”，2入力ゲートは ”cx” に対応している



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.

回路ビジュアライザ

- まだ途中