QMDDを用いた量子回路シミュレータの並列化手法について提案いたします。

QMDDとは量子回路を表現・操作するためのデータ構造です。量子回路の部品である量子状態や量子ゲートは、行列で表現が可能ですが、QMDDはこの行列に零行列や共通する部分行列が多く含まれていることを利用して圧縮したデータ構造になっています。QMDDはこのようなエッジとノードで構成された有向グラフで表現されます。QMDDでは行列を４等分し、その部分行列をエッジとノードで表現します。エッジは、複素数の重みとノードへのポインタをもち、ノードからは最大4つのエッジが伸びます。ノードから伸びるエッジは、左から順に、行列上の左上の要素、右上の要素、左下の要素、右下の要素としてそれぞれを表現します。  
次のスライドで具体例を示しながら説明していきます。

このスライドでは、CVゲートと呼ばれる量子ゲートを例に用います。CVゲートはスライドの左の行列で表現されます。これをQMDDで表現すると右図のようになります。QMDDのグラフの根に当たる部分をルートエッジと呼びますが、まずこのルートエッジに接続されているノードUには丸で囲まれた4つのエッジが伸びています。この四つのエッジはそれぞれ左の行列の中の同じ色で囲まれた部分行列を表します。

この四つの部分行列のうち、左上の要素をさらに四等分するとそれぞれの部分行列はから伸びる４つのエッジに対応します。

さらに左上の要素を四等分した部分行列は、同様にから伸びるエッジに対応します。これ以上の細分化はできないのでエッジはここで終端ノードと呼ばれるノードに接続されます。また行列の任意の要素は対応するエッジの重みをルートエッジから終端ノードまで掛け合わせた値になります。0行0列目の要素は、〜、7行7列目の要素は〜。

QMDDのメモリの効率性について説明します。QMDDでは任意の大きさの零行列をエッジ一つで表現したり図のような共通する部分行列やそのスカラ倍の行列を同じノードで表現することができます。

さらに、処理効率を向上させる仕組みとして、QMDDのノードをユニークテーブルと呼ばれるハッシュテーブルに保存し再利用することでメモリ効率を向上させたり、過去の演算結果をキャッシュして同じ演算を処理する際に演算結果を再利用することで演算の処理速度を向上させたりするものがあります。

このQMDDを用いた量子回路シミュレータの並列化手法としてスライドに示す3つを提案します。

QMDDの演算の特徴として子ノードのエッジを再帰的に探索することがあげられます。このことからQMDDのサイズが大きくなると演算の時間的コストが指数関数的に増加し特に大きな回路では処理速度が大きく低下してしまいます。提案手法では、子ノードのエッジへの再起部分をそれぞれサブスレッドに分割し、並列に処理することで高速化します。

しかし、このような並列処理では、先ほど紹介したユニークテーブルなどのグローバル資源のアクセスに対する排他制御が必要になります。特に演算処理中はこのグローバル資源へのアクセスが多発しそれに伴って排他制御による待機時間も多く発生します。

そこで、各スレッドのタスクをファイバーと呼ばれる軽量なスレッドに分割します。演算処理中の上位の再帰部分をマルチスレッドで並列化し、再帰の深い部分をマルチファイバーで並行処理します。

スレッドのタスクを複数のファイバーに分割させることで、ファイバーの切り替えを行って待機時間を回避します。グローバル資源へのアクセス時に他のスレッドによってロックされている場合、ロックの解放を待機せずに、処理を他のファイバーに譲り、別のタスクを進めることで並列化の効果を向上させます。

以上の提案手法の性能を評価するために量子回路シミュレータを実装し、ランダムな量子回路でベンチマークを行いました。実験環境は表の通りになります。

実験結果です。回路が小さいと既存手法で最速となり、8量子ビット以上の回路で提案手法が最速となりました。特に提案手法では、20量子ビットの回路で、平均約49%の高速化を実現しました。スレッドのみを用いた並列処理では、比較的大きい回路で既存手法よりも優れた結果を得ることができました。

考察として、小さい回路ではスイッチングなどのコストが並列化による恩恵よりも大きくなったと考えました。また、スレッドのみの並列処理と提案手法の結果からファイバーは排他制御による待機時間の回避に対して有効であると考えました。

まとめと今後の課題です。QMDDを用いた量子回路の並列化手法を提案しました。ベンチマークテストでは、大きい回路において処理時間を短縮することができました。今後の課題として、量子回路全体の並列化や、ユニークテーブルに保存するQMDDのノードの寿命の最適化を行っていきたいと考えています。