クラスタ状態 TQC 回路のループ削減手法

Loop Reduction for Cluster State Quantum Circuits

羽田 健太郎 † Kentaro Haneda　山下 茂 ‡ Shigeru Yamashita　Simon Devitt∗　根本 香絵 ∗∗ Kae Nemoto

1.　はじめに

量子重ね合わせ状態を利用した高度な並列計算により，素因数分解 [1] や構造化されていないデータベースからの探索 [2] などの様々な問題を高速に解くことができるとして，量子コンピュータは近年盛んに研究されている．しかし，量子状態は外部からの影響によって容易に変化してしまう．この状態の変化を量子デコヒーレンスといい，この問題の解決が量子コンピュータの実現への大きな課題の一つとなっている．

トポロジカル量子コンピュータ（TQC）は，効率的な誤り訂正をしながら計算を行うことができるフォールトトレラントな量子計算モデルであり，量子デコヒーレンスによる問題を解決できるものとして注目を浴びている．TQC では 2 次元平面上に量子ビットを規則的に配置し，defect と呼ばれる自由度の高い量子ビットを操作することで計算を行う．実際の回路は，これに時間軸を加えた 3 次元空間上に作成される．この 3 次元空間上の TQC をクラスタ状態 TQC という [3]．

この回路は位相幾何学的に同相であるならば同等の計算を実現することが証明されており，この性質を利用して回路を小さくすることができる [4]．この同相性を保った変形のほかにも，効果的に回路規模を小さくできる様々な変形規則が発見されている [5]，[6]．こういった様々な変形規則を組み合わせて TQC 回路を最適化することで，より効率的に量子コンピュータを実現できるようになる．しかし，同相な回路が同等な計算を実現するという性質により，等価な回路が無限に存在することになってしまう．そのため，クラスタ状態 TQC 回路は計算機上で扱うことが困難である．よって，この最適化は現在人手によって行われており，いまだ自動化には至っていないため，その実現が望まれている．

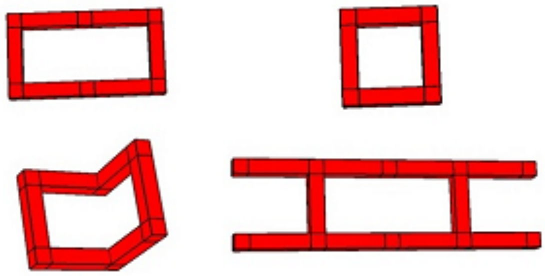

図 1: 同相な defect

そこで，本論文ではループ状の defect とその交わりに着目して TQC 回路を効率的に記述し，最適化を行う手法を提案する．これによって冗長な情報を排除し，これまでに発見されている変形規則を簡単な集合の演算によって定式化することが可能となった．これにより，計算機上で TQC 回路を最適化することに成功した．

2.　既知の変形規則

まず，クラスタ状態の TQC 回路を変形する際に利用できる既知の変形規則を紹介する．

変形規則 1　*TQC の回路は同相性を保ってさえいれば自由に変形できる．*

これは，TQC の回路が位相幾何学的に同相であれば同等の計算を実現することが証明されているためである．ここで位相幾何学的に同相であるとは，ある図形を伸ばしたり縮めたり折り曲げたりしてできる図形のことである．一方で，切り離したり繋げたりすることで得られる図形はもとの図形とは同相ではない．従って，図 1 に示す defect はすべて同相である．

変形規則 2　*図 2 のように，ループ状の defect の中をただ一本の defect が通っているとき，そのループ状の defect を消去できる．このとき，ループ状の defect 上に存在するインジェクタやキャップは通っている defect 上に移される．なお，クラスタ状態 TQC 回路において，インジェクタは T ゲートや S ゲートなどの 1 量子ビットゲート*

† 立命館大学大学院, Graduate School of Information Science and Engineering, Ritsumeikan University
‡ 立命館大学, Ritsumeikan University
∗ 理化学研究所, Institute of Physical and Chemical Research
∗∗ 国立情報学研究所, National Institute of Informatics

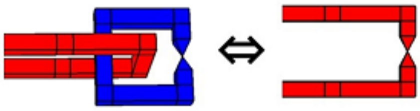

図 2: テレポーティング

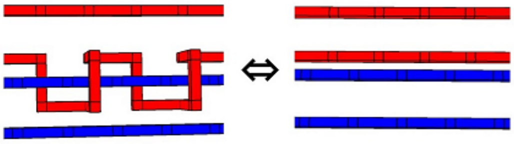

図 3: 二回交差の無効化

に対応しており，キャップは回路全体の外部入出力を表している．

この変形規則は「テレポーティング」として知られている．

変形規則 3 図 *3* のように，同じ *defect* 同士が二回交差しているとき，その交差は無効化される．従って，同一の *defect* の組による偶数回の交差は全て無効化される．

変形規則 4 図 *4* のようにループ状の *defect* の中を一組の *defect* が通っている場合，そのループ状の *defect* を外すことができる．

変形規則 5 図 *5* のように，二つの *defect* を結合することができる *[6]*.

この変形規則は「Φ 変形」として知られている．

変形規則 6 変形規則 *5* を利用して，図 *6* のように，一つのループ状の *defect* の中を通っている複数の *defect* を結合することができる．

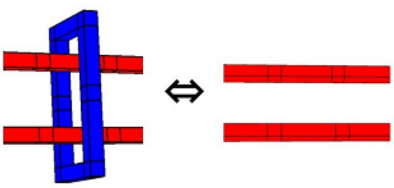

図 4: ループ状の defect の無効化

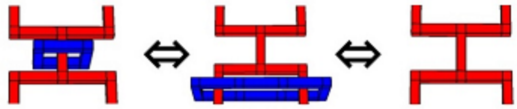

図 5: Φ 変形

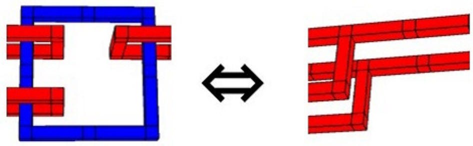

図 6: Φ 変形の応用

3. ループの集合を利用した最適化

3.1 ループ

すべての量子回路はクラスタ状態にしたときにループ状の defect だけで構成することができる．例えば，図 7 をクラスタ状態にして幾何モデルで表現すると図 8 の回路となるが，これは，位相幾何学上での同相性を保った変形のみによって，図 9 のように変形できる．この回路は実際にループ状の defect のみで構成されている．以下，ループ状の defect を単にループと呼び，以下のように定義する．

定義 1 ループは他のいくつかのループと交差することができる．ただし，*primal* のループ（図中では赤で表現）は *dual* のループ（図中では青），*dual* のループは *primal* のループとしか交差できない．あるループ l に交差するループの集合を $l.C$ と表記する．

定義 2 ループはインジェクタやキャップを含むことができる．ループ l に含まれるインジェクタおよびキャップの集合は $l.E$ と表す．

ここで，$l.C$，$l.E$ ともに空集合であるループ l は，回路の演算にいかなる影響も与えない．従って，そのような

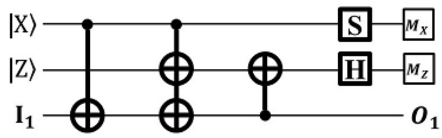

図 7: 量子回路の例

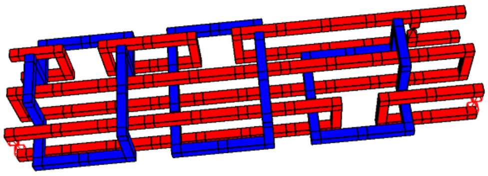

図 8: 量子回路の幾何モデルによる表現

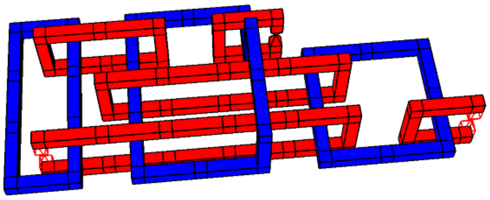

図 9: ループによって構成された量子回路

ループは消去することができる．また，回路全体をループの集合 L として表記する．

3.2　各変形規則の定式化

続いて，量子回路をループの集合としてとらえたうえで，既知の各変形規則を再定義する．

まず変形規則 1 について，この手法では回路はループの集合として捉えられているため，defect の位置情報などは失われている．そのため，同相な回路は全て同一の表現とすることができるので変形規則 1 は考慮する必要がなくなる．

続いて，変形規則 2 の再定義を行う．式 1 に示す条件を満たすループ l が存在するとき，変形規則 2 を適用することができる．

$$\exists l \in L, n(l.C) = 1 \tag{1}$$

なお，集合 A に対して $n(A)$ は集合 A の要素数を示す．

条件を満たしたループを l，l と交差しているループを l' とする．このとき実行される処理は，以下のようになる．

1. l に含まれるインジェクターを l' に移す．
2. l を消去する．

これらの処理を数式で表現すると，一つ目のインジェクターを移動する処理は式 2，続く l_1 を消去する処理は式 3 のようになる．

$$l'.E = l'.E \cap l.E,\ \ l.E = \phi \tag{2}$$

$$l'.C = l'.C - l,\ \ l.C = \phi \tag{3}$$

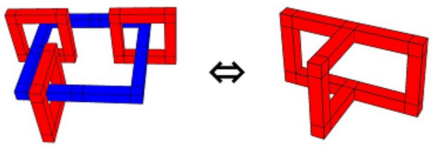

図 10: ループに対する変形規則 6 の適用

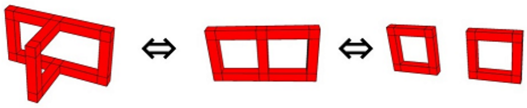

図 11: 図 10 の回路に対する変形規則 1 の適用

ここで，ϕ は空集合である．また，集合 A，B に対して集合 $A-B$ は A から B を引いた差集合であり，集合 A および要素 x に対して集合 $A-x$ は A から x を除いた集合である．

次に変形規則 3 および 4 について記す．変形規則 3，4 を適用する前の状態はループで表現すると，あるループ l と交差しているループの集合 $l.C$ に同一のトーラスが複数個含まれている状態となる．この状態は TQC 回路をループの集合に変換する際や変形規則 1，2 を利用して変形する際にはできない．変形規則 6 を適用した後にのみ表れる．従って，変形規則 6 を適用する際に考慮すれば良い．

変形規則 5 は提案手法では利用しない．ループ同士の結合については考慮しないためである．しかし，代わりにこの変形規則を利用してできる変形規則 6 を利用する．

変形規則 6 をループに対して実行すると，図 6 のようになるが，この状態に対して更に変形規則 1 を実行すると図 11 のように変形できる． この変形では，結果として primal と dual のループを一つずつ消去している．このとき，消去される二つのループは外部入出力とインジェクターのいずれも含んでいてはならない．この変形ができるのは，以下の条件をすべて満たすループ l_1, l_2 が存在する場合のみである．

- l_1 は三つ以上のループと交差している．
- l_1 と l_2 は互いに交差している．
- l_1, l_2 は外部入出力もインジェクターも含まない．

これらの条件は数式 4，5 によって表すことができる．

$$\exists l_1 \in L, (n(l_1.C) \leq 3) \cap (l_1.E = \Phi) \tag{4}$$

$$\exists l_2 \in l_1.C, l_2.E = \Phi \tag{5}$$

これらの条件を満たすループ l_1，l_2 に対して変形を行うに当たって，変形規則 1 を使った変形をしたとき，l_2 は l_1 と交差する l_2 以外のすべてのループ共有の辺となる．このとき l_2 と交差していたループはすべて，新たに l_2 を共有の辺としたループと交差することとなる．従って，変形規則 6 に対応する操作は以下のようになる．

1. l_1 と交差するすべてのループ l について, l_2 と交差しているすべてのループと交差させる．
2. l_2 と交差するすべてのループ l' について, l_1 と交差しているすべてのループと交差させる．
3. l_1 と l_2 を消去する．

l_1，l_2 の消去以外の処理は式 6，7 のように表現できる．

$$\forall l \in l_1.C,\ l.C = l.C \cup l_2.C \tag{6}$$
$$\forall l' \in l_2.C,\ l'.C = l'.C \cup l_1.C \tag{7}$$

しかし，このとき変形規則 3 および 4 の適用を考慮する必要がある．新たにループを C に追加するとき，そのループが既に含まれているならば消去すれば良い．従って，式 6，7 を集合の対称差 $\oplus$ を利用して式 8，9 のように再定義する．

$$\forall l \in l_1.C,\ l.C = l.C \oplus l_2.C \tag{8}$$
$$\forall l' \in l_2.C,\ l'.C = l'.C \oplus l_1.C \tag{9}$$

このとき, $l_1.C$ と $l_2.C$ にはそれぞれ l_2 および l_1 も含まれている．対称差の定義より集合 A に対して $A \oplus A = \phi$ となることから，この操作により $l_1.C = \phi$，$l_2.C = \phi$ となる．l_1 と l_2 は条件より, I および E が空集合なので C，E のどちらもが空集合となり，l_1 と l_2 は消去される．

また，変形 6 の変形ができるのは一つ目の条件で示している通り，ループ l_1 が三つ以上のループと交差している場合であるが，交差しているループが二つの場合，図 12 のような少し異なる変形が行われる．変形規則 6 と同様に primal と dual のループが一つずつ無くなっているが，変形規則 1 によって複数のループの共有の辺となるループがない．共有の辺となるループはインジェクターや外部入出力を含んでいてはならないが，この場合はそのようなループがないため，条件が緩和される．従って，この変形ができる条件は以下のようになり，式 10 のように表現できる．

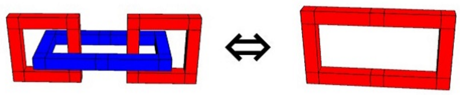

図 12: 二つのループと交差している場合の Φ 変形と bridge を利用した変形

1. インジェクターも外部入出力も含まないループ l_1 が存在する．
2. l_1 は二つのループと交差する．

$$\exists l_1 \in L, (n(l_1.C) = 2) \cap l_1.E = \Phi \tag{10}$$

この条件を満たすループ l_1 が存在するとき，行われる処理は以下のようになる．

1. l_1 と交差する二つのループを一つにまとめる．
2. l_1 を消去する．

l_1 と交差する二つのループのうち一つを l_2 とすると，これらの処理を数式で表現したとき式 11 から 13 のようになる．

$$\forall l \in l_1.C,\ l.C = l.C \oplus l_2.C \tag{11}$$
$$\forall l \in l_1.C,\ l.E = l.E \oplus l_2.E \tag{12}$$
$$l_1.C = \phi \tag{13}$$

この変形を変形規則 7 とする．

3.3 クラスタ状態 TQC 回路の最適化

回路全体最適化するに当たって，変形規則 2 による変形ではループを一つ減らすことができる．一方で変形規則 6，7 による変形ではループを二つ減らすことができる．従って，変形規則 6，7 の方が変形規則 2 よりも優先度が高いと考えた．よって，回路の最適化は以下の手順で行われる．

1. 条件を満たすすべてのループに変形規則 6，7 を適用する．
2. 条件を満たすすべてのループに変形規則 2 を適用する．

これによって回路の最適化を行うことができる．

この最適化の実行例として，図 13 に示すような回路の最適化を示す．この図の $|I_1\rangle, |I_2\rangle, |O_1\rangle, |O_2\rangle$ はそれ

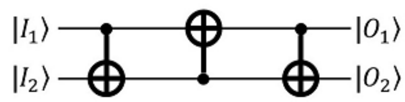

図 13: スワップ回路

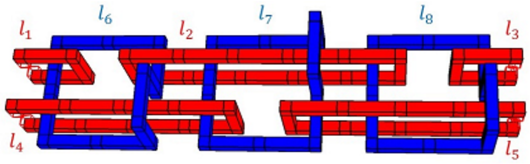

図 14: 幾何学モデルで表したスワップ回路

ぞれ外部入力 1，2 および外部出力 1，2 を意味する．この回路は CNOT ゲートを利用したスワップ回路として知られており，$|O_1\rangle = |I_2\rangle$，$|O_2\rangle = |I_1\rangle$ となる．この回路を幾何モデルで表すと図 14 のようになる．このときの各ループの状態を表 1 に示す．

まず，l_2 が条件を満たしているため変形規則 6 により，l_2 と l_7 を消去して図 15 の回路を得る．このときの各ループの状態は表 2 のようになる．

続いて，変形規則 7 を利用して l_6，l_5 を消去する．するとすると, 回路は図 16 のようになり, 各ループの状態は表 3 のようになる．

最後に，変形規則 7 を利用して l_8 と l_4 を消去する．これによって図 17 の回路が得られ，各ループの状態は表 4 のようになる．

このように，この回路の I_1 に入力された値が O_2 に出力され，I_2 に入力された値が O_1 に出力される回路が得られる．従って，スワップ回路の入出力の関係を変化さ

表 1: 図 14 における各ループの状態

ループ	C	E
l_1	l_6	I_1
l_2	l_6, l_7, l_8	
l_3	l_8	O_1
l_4	l_6, l_7	I_2
l_5	l_7, l_8	O_2
l_6	l_1, l_2, l_4	
l_7	l_2, l_4, l_5	
l_8	l_2, l_3, l_5	

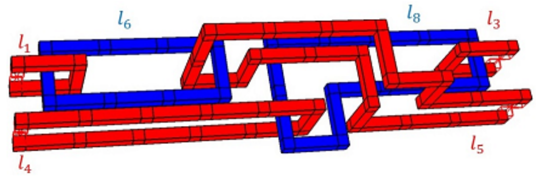

図 15: l_2 と l_7 を消去

表 2: 図 15 における各ループの状態

ループ	C	E
l_1	l_6	I_1
l_3	l_8	O_1
l_4	l_8	I_2
l_5	l_6	O_2
l_6	l_1, l_5	
l_8	l_3, l_4	

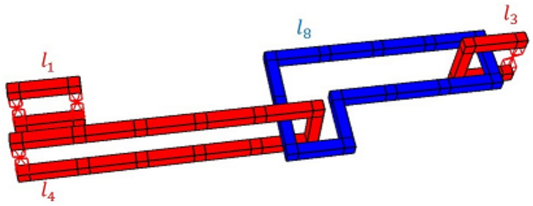

図 16: l_6，l_5 を消去

表 3: 図 16 における各ループの状態

ループ	C	E
l_1		I_1, O_2
l_3	l_8	O_1
l_4	l_8	I_2
l_8	l_3, l_4	

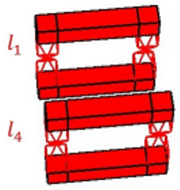

図 17: l_8，l_4 を消去

表 4: 図 17 における各ループの状態

ループ	C	E
l_1		I_1, O_2
l_3		I_2, O_1

表 5: ループ数の削減率

量子回路			ループ数		
ビット	ゲート	外部入出力	最適化前	最適化後	削減率 (%)
10	10	1	30	1.00	96.7
10	10	5	30	4.55	84.8
10	10	10	30	6.38	78.7
10	10	20	30	17.82	40.6
100	100	1	300	1.00	99.7
100	100	50	300	36.49	87.8
100	100	100	300	51.84	82.7
100	100	200	300	221.45	26.2

せることなく最適化することができた．

4. 評価および考察

提案手法を用いて実際に最適化ができるのか評価を行うため，量子回路をランダムに作成し最適化を行った．そして，最適化前後のループの数を比較した．なお，これらの実験はそれぞれの実験に対して 10,000 回ずつ回路の作成と最適化を行っている．

まず，量子ビット数とゲート数を固定して外部入出力の数を変化させながら，最適化前のループ数と最適化後の平均のループ数を比較した．この実験の結果を表 5 に示す．

加えて，量子ビットと量子ゲートの個数をそれぞれ 10 個に固定してこの実験を行った結果を表 18 にまとめた．この実験の結果から，外部入出力やインジェクタの数が多いほど削減率が下がり，最適化後のループの数は外部入出力の数にほぼ比例するということが分かった．これは，外部入出力やインジェクタが含まれているか否かが変形の条件に関係していることによるものと考えられる．また，外部入出力が 1 つだけでありインジェクタを持たない回路はループが一つとなるまで最適化できることが分かった．

続いて，最適化の際に複数の選択肢がある場合について，消去するループの違いによる影響を調査したところ，調査した限りではどの選択肢を選んでも最終的に同一の結果を得られた．ただし，変形規則 2 を優先的に適用したところ，最適化にかかる操作の回数が増加した．これ

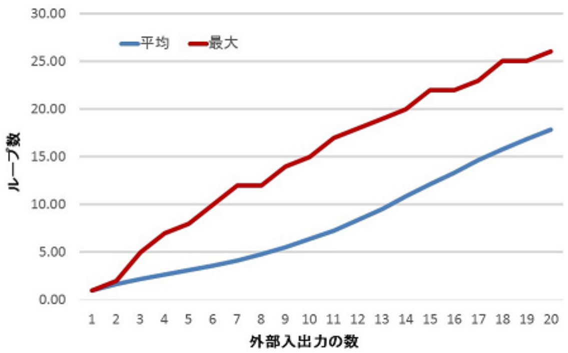

図 18: 外部入出力の数による最適化後ループ数の変化

は変形によって消去できるループの個数の違いによるものである．

また，各変形規則を適用する順序が最適化の結果に与える影響を調査した．この調査では．同一の回路に対して変形規則を適用する順番を変えながら複数回最適化を行い，その結果を比較した．例えば，図 14 に示した swap 回路の初期状態に対しては以下の五つの選択肢がある．

1. 変形規則 6 を適用して l_2 と l_6 を消去する．
2. 変形規則 6 を適用して l_2 と l_7 を消去する．
3. 変形規則 6 を適用して l_2 と l_8 を消去する．
4. 変形規則 2 を適用して l_1 を消去する．
5. 変形規則 2 を適用して l_3 を消去する．

こういった選択肢に対する変形規則の適用順序を網羅して調査したところ，最終的にすべて同一の結果が得られた．

それぞれのループをノード，ループ間の交差関係をエッジとすると無向グラフが得られる．この無向グラフを用いて swap 回路の状態遷移の分岐を表現すると図 19 のようになる．この図において木構造の葉になっている状態はすべて，あと 1 回変形を行うだけで図 17 に示したものと同一のものとなる．このことから，最適化をする際に変形規則を適用する順序は最適化の結果に影響しないと考えられる．

ただし，変形規則 2 を優先的に適用した場合，変形規則 6 や 7 を優先的に適用した場合に比べて，最終的な結果を得られるまでの手数が多く必要となった．これは変形規則 6，7 では二つのループを消去できるのに対し，変形規則 2 では一つしか消去できないことに起因している．

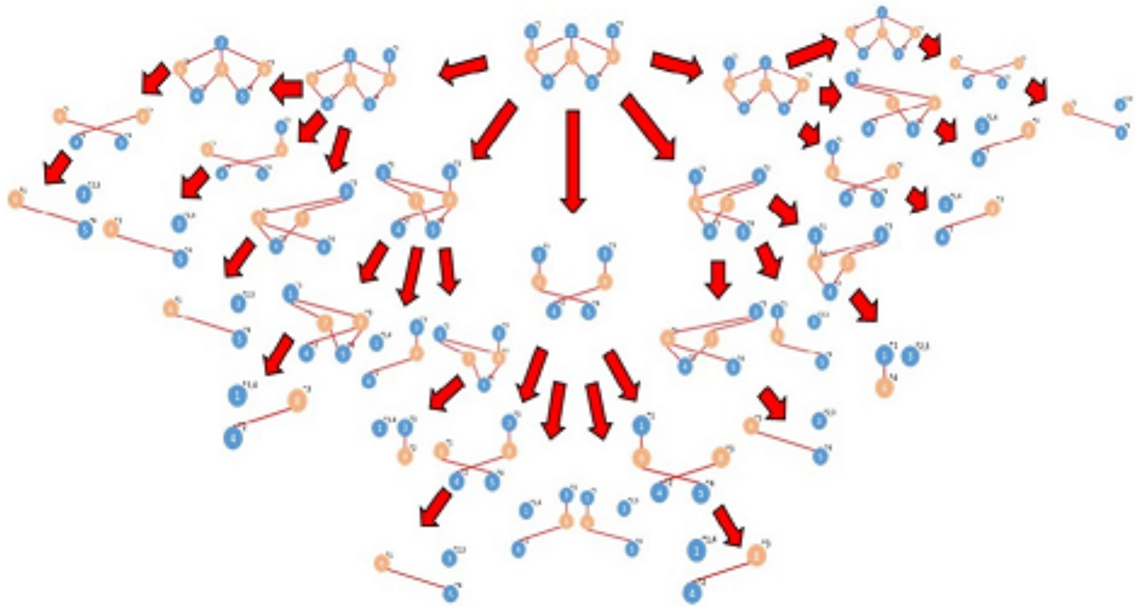

図 19: 外部入出力の数による最適化後ループ数の変化

5. おわりに

本研究では，クラスタ状態 TQC 回路をループの集合に変換し，最適化する手法について提案した．これまでクラスタ状態 TQC 回路の最適化に利用できる様々な変形規則が提案されてきたが，それらは体系立てられていなかった．そこで，各変形規則の条件とその処理を定式化し，各変形規則間の優先順位を定めた．これによって，これまで人手で行われてきたクラスタ状態 TQC 回路の最適化を計算機上で行うことに成功した．

一方で，今後の課題としてループの再配置問題と bridge という変形のための組み合わせ問題が挙げられる．本研究ではループの数を減らすことを目的として最適化を行ったが，TQC 回路のコストはそれを内包する最小の直方体の体積と定義されているため，ループの数がコストに一致しない．従って，ループの集合を再度 TQC 回路に変換し直さなければならない．このとき，ループの配置と各ループ間の bridge による，更なる最適化が見込まれる．したがって，これらの順序や組み合わせを工夫する必要がある．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP24106009,JP15H01677 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] Peter W Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM journal on computing*, 26(5):1484–1509, 1997.

[2] Lov K Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 212–219. ACM, 1996.

[3] Austin G Fowler and Kovid Goyal. Topological cluster state quantum computing. *arXiv*, 2008.

[4] Austin G Fowler and Simon J Devitt. A bridge to lower overhead quantum computation. *arXiv preprint arXiv:1209.0510*, 2012.

[5] Keisuke Fujii. Quantum computation with topological codes: from qubit to topological fault-tolerance. *arXiv preprint arXiv:1504.01444*, 2015.

[6] Robert Raussendorf, Jim Harrington, and Kovid Goyal. Topological fault-tolerance in cluster state quantum computation. *New Journal of Physics*, 9(6):199, 2007.