Vol.2021-QS-2 No.10
2021/3/29

2正則グラフの最大カット問題における量子近似最適化アルゴリズム

白井　達彦[1,a)]　田中　宗[2,3,b)]　戸川　望[1,c)]

概要：2 正則グラフの最大カット問題における量子近似最適化アルゴリズム（Quantum Approximate Optimization Algorithm; QAOA）の性能を解析的に調べた．緩和問題を構成することで，QAOA の問題が線形計画問題に帰着されることを示した．緩和問題である線形計画問題を厳密に解くことで，QAOA の性能の上限を得た．その上限は，QAOA を数値的に解くことで得られる値と一致する．2 正則グラフの最大カット問題の結果を応用して，一次元クラスター状態生成に対し QAOA を適用した．

1. はじめに

組合せ最適化問題は，制約条件を満足した上で目的関数を最小化もしくは最大化する決定変数の組合せを見つける問題である [1], [2]。決定変数の個数に従い，探索空間の次元が指数的に増大し，多くの問題が NP 完全もしくは NP 困難な問題に属する．巡回セールスマン問題やナップサック問題などが典型的な問題である．また，シフト計画問題など，組合せ最適化問題は広く社会に内在する．したがって，組合せ最適化問題を高速かつ高精度に解法するアルゴリズムやソルバーの開発は重要な問題である．

量子近似最適化アルゴリズム（Quantum Approximate Optimization Algorithm; QAOA）は，ゲート型量子コンピュータ上で組合せ最適化問題を解法する量子アルゴリズムである [3], [4]．QAOA は古典量子ハイブリットアルゴリズムであり，量子回路は変分パラメタに依存する．量子回路の深さ p に対し，$2p$ 個の変分パラメタ $\{\beta_i\}_{i=1}^{p}$，$\{\gamma_i\}_{i=1}^{p}$ が与えられる．量子計算機の測定結果に応じて，古典計算機で変分パラメタは最適化され，再び量子計算機に入力される．この過程を繰り返すことにより，組合せ最適化問題の近似解を得る．QAOA は誤り訂正のない NISQ (Noisy Intermdediate Scale Quantum) デバイス [5], [6] においても，量子超越性を示す可能性のある候補の一つとして注目されている．

k 正則グラフの最大カット問題は QAOA の主要なベンチマーク問題の一つである [3], [7], [8], [9], [10], [11], [12], [13]. k 正則グラフとは，全ての頂点の次数が k となるグラフを指し，最大カット問題とは，カットされる辺の数が最大となるように，与えられたグラフの頂点を二色に色分けする問題を指す．ある辺が異なる色で塗られた頂点間を繋ぐ場合，その辺はカットされるという．一般のグラフに対し，最大カット問題は NP 困難のクラスに属する [14]．機械スケジュール問題 [15]，VLSI (Very Large Scale Integrated circuit) 設計の問題 [16] の応用がある．k 正則グラフの最大カット問題に対する QAOA の性能は近似度 r_p^* で測られてきた (p は量子回路の深さを表す)．近似度 r_p^* は目的関数の近似解と厳密解での値の比 r_p によって与えられ，与えられた全てのグラフに対する r_p の下限によって定義される．2 正則グラフに対しては，$r_p^* = (2p+1)/(2p+2)$ となることが数値的に知られており [3], [7]，r_p^* の上限としてその値が解析的に得られている [9]．3 正則グラフに対しては，$p = 1$ [3]，$p = 2, 3$ [13] に対して r_p^* の下限が，全ての p に対して，r_p^* の上限が解析的に得られている [13].

本稿では，N 頂点からなる 2 正則グラフの最大カット問題に対する，QAOA の近似度 r_p^* を，[9] と異なった方法で解析的に評価する．グラフ構造の単純さのために，Jordan–Wigner 変換（JW 変換）によりスピン系をフェルミオン系にマップする [17] ことで，QAOA における量子状態の時間発展は，$\lfloor (N+1)/2 \rfloor$ 個の独立したスピンによって記述される [7](ここで $\lfloor \cdot \rfloor$ は床関数を表す)．JW 変換により，目的関数の期待値は三角多項式の形で表現される．多項式の係数は，パラメタ $\{\beta_i\}_{i=1}^{p}$ と $\{\gamma_i\}_{i=1}^{p}$ に依存する．我々は，三角多項式から緩和問題を作成することで，近似度 r_p^* の上限を得た．緩和問題は，不等式制約を持つ線形計

[1] 早稲田大学　基幹理工学部　情報通信学科
[2] 慶應義塾大学　理工学部　物理情報工学科
[3] 早稲田大学　グリーン・コンピューティング・システム研究機構
a) tatsuhiko.shirai@aoni.waseda.jp
b) shu.tanaka@appi.keio.ac.jp
c) ntogawa@waseda.jp

Vol.2021-QS-2 No.10
2021/3/29

画問題に帰着される．ラグランジュの未定乗数法により，緩和問題の最適解を解析的に与えた．緩和問題から得られる近似度 $\tilde{r}_p^*$ の値は，数値的に得られている QAOA の近似度 $r_p^* = (2p+1)/(2p+2)$ と一致する．２正則グラフの最大カット問題の結果を応用して，一次元クラスター模型に対し QAOA を適用した場合の結果を解析的に示した．

本稿の構成は次のように与える．第二章で，QAOA を説明する．第三章で，２正則グラフの最大カット問題に対する QAOA を説明する．第四章で，緩和問題から近似度 r_p^* の上限を与える．第五章で，QAOA を一次元クラスター模型に対して適用する．第六章で，結論と将来の展望を与える．

2. 量子近似最適化アルゴリズム（QAOA）

QAOA を説明する．ここでは，目的関数 $C(\vec{z})$ を最大化する組合せ最適化問題を考える．ここで $\vec{z} = (z_1, \cdots, z_N) \in \{-1,+1\}^{\otimes N}$ で，N はビット数を表す．QAOA では，$C(\vec{z})$ から構成されるハミルトニアン H_C と，H_C と非可換なハミルトニアン H_B を，交互に繰り返し量子状態に作用させる．H_C は，目的関数 $C(\vec{z})$ によって与える．バイナリ変数 z_i をスピン σ_i^z（$\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ はパウリ演算子を表す）に置き換えることで H_C を得る．H_B は横磁場，つまり

$$H_B = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^x \tag{1}$$

によって与える．

QAOA は p ステップから成る．各ステップでは，量子状態に対し，まず H_C を作用させ，次に H_B を作用させる．ステップ i において，それぞれのハミルトニアンを作用させる時間を β_i と γ_i とする（$\beta_i \in \mathbb{R}$，$\gamma_i \in \mathbb{R}$）．ステップ i での量子状態の時間発展を特徴づけるユニタリ演算子は，

$$\begin{aligned} U_C(\gamma_i) &= \exp(-\mathrm{i}\gamma_i H_C), \\ U_B(\beta_i) &= \exp(-\mathrm{i}\beta_i H_B) \end{aligned} \tag{2}$$

となる．初期状態 $|\psi\rangle$ は，$-H_B$ の基底状態，つまり全ての i に対し $\sigma_i^x |\psi\rangle = |\psi\rangle$ となる状態に取る．QAOA の量子回路は，

$$U = \prod_{i=1}^{p} U_B(\beta_{p+1-i}) U_C(\gamma_{p+1-i}) \tag{3}$$

となり，最終状態 $|\vec{\beta}, \vec{\gamma}\rangle$ は，

$$|\vec{\beta}, \vec{\gamma}\rangle = U |\psi\rangle \tag{4}$$

となる．ここで $\vec{\beta} = (\beta_1, \ldots, \beta_p)$，$\vec{\gamma} = (\gamma_1, \ldots, \gamma_p)$ とした．QAOA が与える目的関数の期待値 $C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ は，

$$C(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) = \langle \vec{\beta}, \vec{\gamma} | H_C | \vec{\beta}, \vec{\gamma} \rangle \tag{5}$$

となる．

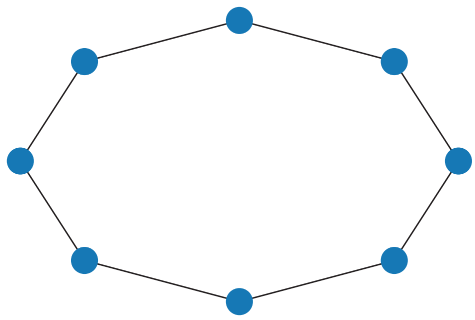

図 1　２正則グラフ（頂点数 8）．

QAOA は古典量子ハイブリッドアルゴリズムである．$C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ を量子計算機で計算し，$C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ を最大化するパラメタ $(\vec{\beta}^*, \vec{\gamma}^*)$ の値を古典計算機で探索する．p とともに探索空間の次元が指数的に増大する．一般に $C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ は多峰性を持つため，最急降下法などの局所最適化手法では局所解に陥る．その問題を回避するためのヒューリスティクス法が提案されている [11], [18], [19].

3. ２正則グラフの最大カット問題に対する QAOA

２正則グラフの最大カット問題に対し，QAOA を適用したときの先行研究の結果を説明する．２正則グラフは，頂点がリング状に並んだグラフを指す．図 1 に頂点数が 8 個の場合を示した．２正則グラフの最大カット問題の目的関数は，

$$C(\{z_i\}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}(1 - z_i z_{i+1}) \tag{6}$$

となる．N が偶数の場合を考え，周期境界条件 $z_{N+1} = z_1$ を課す．各項は，z_i と z_{i+1} が同じ値を取る（辺がカットされていない）時に 0 をとり，一方で異なる値を取る（辺がカットされている）時に 1 を取る．したがって，$C(\{z_i\})$ はカットされている辺の総数を表す．最大カット数 $C_{\max}$ は $C_{\max} = N$ となる．ハミルトニアン H_C は，

$$H_C = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}(1 - \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) \tag{7}$$

となる．

QAOA の近似度 r_p^* を与える．変分パラメタが $(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ のとき，QAOA の性能を，

$$r_p(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) := \frac{C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})}{C_{\max}} = \frac{C(\vec{\beta}, \vec{\gamma})}{N} \tag{8}$$

で測る．$r_p(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) \in \mathbb{R}$ であり，値が 1 に近いほど良い性能を示す．近似度 r_p^* を $r_p^* = \max_{\vec{\beta}, \vec{\gamma}} r_p(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ で定義し，その

時の $\vec{\beta}$, $\vec{\gamma}$ をそれぞれ $\vec{\beta}^*$, $\vec{\gamma}^*$ とする．[3], [9] に従って，r_p^* の N 依存性を議論する．ハミルトニアン H_C の並進対称性より，

$$r_p^* = \max_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{2}\left(1 - \langle\psi| U^\dagger \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z U |\psi\rangle\right) \tag{9}$$

となる．ここで, $U^\dagger$ は U のエルミート共役を表す．ステップ数 p の時，$U^\dagger \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z U$ はノード $i-p$ から $i+1+p$ までの領域に作用する．したがって,

$$N \geq (i+1+p) - (i-p) + 1 = 2p+2 \tag{10}$$

において，r_p^* は N に依存しない．以下，各 p において，$N \geq 2p+2$ における近似度を，r_p^* と表記する．

近似度 r_p^* を三角多項式の形で表す．まず，[7] に従って，QAOA の問題を $N/2$ 個の独立したスピンの問題に帰着する．JW 変換により，

$$\begin{aligned} H_C &= \sum_{k=0}^{N/2-1} H_{C,k}, \\ H_B &= \sum_{k=0}^{N/2-1} H_{B,k} \end{aligned} \tag{11}$$

となる．ここで,

$$\begin{aligned} H_{C,k} =& 1 - \vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma}_k, \\ H_{B,k} =& 2\sigma_k^z \end{aligned} \tag{12}$$

であり，$\vec{\sigma}_k = (\sigma_k^x, \sigma_k^y, \sigma_k^z)$ はパウリ演算子，$\vec{e}(\theta_k) = (\sin\theta_k, 0, \cos\theta_k)$，$\theta_k = (2k+1)\pi/N$ である．ハミルトニアンが $\vec{\sigma}_k$ の一次形式となるため，各スピンは独立して時間発展する．初期状態 $|\psi\rangle$ は $-H_B$ の基底状態であるので，σ_k^z の固有状態 $|\uparrow\rangle_k (\sigma_k^z |\uparrow\rangle_k = |\uparrow\rangle_k)$ を用いて，$|\psi\rangle = \otimes_{k=1}^p |\uparrow\rangle_k$ となる．式 (5)，式 (8)，式 (12) より，

$$r_p^* = \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N/2-1} \langle\uparrow| U(\theta_k)^\dagger \vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma} U(\theta_k) |\uparrow\rangle \tag{13}$$

となる ($\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ はパウリ演算子で，$\sigma^z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$)．ここで,

$$\begin{aligned} &U(\theta_k) = \prod_{i=1}^{p} U_{B,k}(\beta_{p+1-i}) U_{C,k}(\gamma_{p+1-i}) \\ &\begin{cases} U_{C,k}(\gamma_i) = \exp(\mathrm{i}\gamma_i \vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma}), \\ U_{B,k}(\beta_i) = \exp(-\mathrm{i}\beta_i \sigma^z). \end{cases} \end{aligned} \tag{14}$$

である．$U_{C,k}(\gamma) = \cos\gamma + \mathrm{i}\sin\gamma(\vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma})$ となるので，各 $U_{C,k}(\gamma)$ は θ_k の三角多項式の形を与える．ステップ数が p のとき，式 (13) に $\vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma}$ が $2p+1$ 回現れるので,

$$r_p^* = \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N/2-1} \sum_{\substack{l,m \\ l+m\leq 2p+1}}^{2p+1} f_{l,m}(\vec{\beta},\vec{\gamma}) \cos^l\theta_k \sin^m\theta_k \tag{15}$$

となる．ここで $f_{l,m}(\vec{\beta},\vec{\gamma}) \in \mathbb{R}$ である．m が奇数のとき，$f_{l,m}(\vec{\beta},\vec{\gamma}) = 0$ である．なぜなら，$U(\theta_k)^\dagger \vec{e}(\theta_k)\cdot\vec{\sigma} U(\theta_k)$ において，$\sin\theta_k$ は必ず $\sin\theta_k \sigma^x$ の形で現れ，σ^x が奇数回現れる項の $|\uparrow\rangle$ での期待値は 0 となるためである．m が偶数のとき，$\sin^m\theta_k$ は $\cos\theta_k$ の m 次の多項式で表せるので,

$$r_p^* = \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N/2-1} \sum_{l=0}^{2p+1} g_l(\vec{\beta},\vec{\gamma}) \cos^l\theta_k \tag{16}$$

を得る．ここで $g_l(\vec{\beta},\vec{\gamma}) \in \mathbb{R}$ である．$N \to \infty$ では，k の級数和は積分で置き換えられ,

$$\begin{aligned} r_p^* &= \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \sum_{l=0}^{2p+1} g_l(\vec{\beta},\vec{\gamma}) \cos^l\theta d\theta, \\ &=: \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta) d\theta \end{aligned} \tag{17}$$

と，変数 θ の三角多項式を得る．

例として，$p=1$ を考える．この時,

$$\begin{cases} g_0(\beta_1,\gamma_1) = \sin 4\beta_1 \sin 4\gamma_1, \\ g_1(\beta_1,\gamma_1) = (1-\cos 4\beta_1)(1-\cos 4\gamma_1) - 1, \\ g_2(\beta_1,\gamma_1) = -\sin 4\beta_1 \sin 4\gamma_1, \\ g_3(\beta_1,\gamma_1) = -(1-\cos 4\beta_1)(1-\cos 4\gamma_1) \end{cases} \tag{18}$$

となる．したがって,

$$r_1^* = \frac{1}{2} - \min_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{4} \sin 4\beta_1 \sin 4\gamma_1 \tag{19}$$

となる．例えば，$(\beta_1^*, \gamma_1^*) = (\pi/8, -\pi/8)$ は最適解を与え，$r_1^* = 3/4$ となる．$p \geq 2$ では，数値計算により $r_p^* = (2p+1)/(2p+2)$ となる [3], [7]．r_p^* は，H_C が古典的であることを用いて，近似度の上限として示されている [9]．しかし，$g_l(\vec{\beta},\vec{\gamma})$ の関数形から，r_p^* や $(\vec{\beta}^*, \vec{\gamma}^*)$ は解析的に得られていない．

QAOA の結果を量子アニーリング法 (QA; Quantum Annealing) [20], [21] と比較する．QA は組合せ最適化問題を解法する代表的な量子アルゴリズムである．QA における量子状態の時間発展は，シュレーディンガー方程式,

$$\mathrm{i}\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -[s(t)H_C + (1-s(t))H_B]|\psi(t)\rangle \tag{20}$$

によって記述される．ここで $s(t)$ はアニーリング時間を τ として，$s(t) = t/\tau$ で与える．初期時刻 $t=0$ において，QAOA のときと同様に，初期状態は $-H_B$ の基底状態で与える．量子状態はシュレーディンガー方程式に従って時間発展し，最終時刻 $t=\tau$ において，終状態を $|\psi(\tau)\rangle$ を得る．アルゴリズムの性能評価のため，r_τ を導入する；

$$r_\tau := \frac{\langle\psi(\tau)| H_C |\psi(\tau)\rangle}{N}. \tag{21}$$

特に，$1 - r_\tau$ を残留エネルギー密度と呼ぶ．残留エネル

ギー密度は，アニーリング時間 τ に対し，

$$1 - r_\tau = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{2\tau}} \sim \tau^{-\frac{1}{2}} \tag{22}$$

となる [22]．一方, QAOA では, 量子回路の計算時間 $\tau_{\rm QAOA}$ は p に比例する ($\tau_{\rm QAOA} \propto p$) ため，式 (43) より，

$$1 - \tilde{r}_p^* = \frac{1}{2p+2} \sim \tau_{\rm QAOA}^{-1} \tag{23}$$

となる．古典計算機で，パラメタ $(\vec{\beta},\vec{\gamma})$ の最適化に掛かる時間を考慮した場合，$\tau_{\rm QAOA} \propto p^{3/2}$ となり，

$$1 - \tilde{r}_p^* = \frac{1}{2p+2} \sim \tau_{\rm QAOA}^{-\frac{2}{3}} \tag{24}$$

となる [10]．したがって，2 正則グラフの最大カット問題に対して，十分長い計算時間では QAOA は QA より良い性能を示す．

4. QAOA の近似度の上限

この章では，式 (17) の緩和問題から，r_p^* の上限を解析的に求める．まず，$g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta)$ が満たす性質を列挙する．

性質 (a)　$\cos\theta$ の $2p+1$ 次の多項式である．

性質 (b)　$\theta \in (0,\pi)$ において $[-1,1] \in \mathbb{R}$ の値を取る．

性質 (c)　$\theta = 0$ において 1 の値を取る．

性質 (d)　$\theta = \pi$ において -1 の値を取る．

性質 (a) は式 (17) より明らかである．式 (13) と式 (17) より，

$$g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta) = \langle\uparrow| U(\theta)^\dagger \vec{e}(\theta)\cdot\vec{\sigma}U(\theta)|\uparrow\rangle \tag{25}$$

である．性質 (b) は

$$\begin{aligned} &|g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta)| \le \|U(\theta)^\dagger \vec{e}(\theta)\cdot\vec{\sigma}U(\theta)\| = 1, \\ \Leftrightarrow &-1 \le g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta) \le 1 \end{aligned} \tag{26}$$

より導かれる．ここで $\|O\|$ は作用素ノルムであり，$\|O\| \coloneqq \sup_{\langle\phi|\phi\rangle=1}(\langle\phi|O^\dagger O|\phi\rangle)^{1/2}$ で定義される．$\theta = 0$ のとき, $\vec{e}(0)\cdot\vec{\sigma} = \sigma^z$ であり, $U(0) = \exp[-\mathrm{i}\sum_{i=1}^p(\beta_i - \gamma_i)\sigma^z]$ であるので，性質 (c)

$$g(\vec{\beta},\vec{\gamma};0) = \langle\uparrow|\sigma^z|\uparrow\rangle = 1 \tag{27}$$

が導かれる．同様にして，$\vec{e}(\pi)\cdot\vec{\sigma} = -\sigma^z$，$U(\pi) = \exp[-\mathrm{i}\sum_{i=1}^p(\beta_i + \gamma_i)\sigma^z]$ より，性質 (d) が導かれる．

緩和問題を以下のように与える．性質 (a)–(d) を満たす関数の集合を G とするとき，

$$\tilde{r}_p^* \coloneqq \frac{1}{2} - \min_{\tilde{g}(\theta)\in G}\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \tilde{g}(\theta)d\theta. \tag{28}$$

$g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta) \in G$ であるため，緩和問題となる．したがって，$\tilde{r}_p^*$ は r_p^* の上限を与える;

$$r_p^* \le \tilde{r}_p^*. \tag{29}$$

緩和問題を線形計画問題に帰着する．性質 (a) と $n \in \mathbb{N}$ に対し $\cos n\theta$ が $\cos\theta$ の n 次の多項式で表せることを用いると，$\tilde{g}(\theta) \in G$ は,

$$\tilde{g}(\theta) = \sum_{n=0}^{2p+1} a_n \cos n\theta \tag{30}$$

と変形できる．ここで $a_n \in \mathbb{R}$ である．

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \tilde{g}(\theta)d\theta = \frac{a_0}{2} \tag{31}$$

より，$a_0/2$ が目的関数となる．性質 (b) は不等式制約を，性質 (c) と性質 (d) は等式制約を与える．

制約 (i)　$-1 \le \sum_{n=0}^{2p+1} a_n \cos n\theta \le 1$ for $\theta \in (0,\pi)$.

制約 (ii)　$\sum_{n=0}^{2p+1} a_n = 1$ at $\theta = 0$.

制約 (iii)　$\sum_{n=0}^{2p+1} (-1)^n a_n = -1$ at $\theta = \pi$.

目的関数および制約関数は全て $\{a_n\}_{n=0}^{2p+1}$ の線形関数となるため，線形計画問題となる．

ラグランジュの未定乗数法を用いて，線形計画問題を解法する．ラグランジュ関数 $L(\{a_n\},\lambda(\theta),\lambda_0,\lambda_\pi)$ を，

$$\begin{aligned} &L(\{a_n\},\lambda(\theta)),\lambda_0,\lambda_\pi) \\ =&\frac{a_0}{2} + \int_0^\pi \lambda(\theta)\left(-1 - \sum_{n=0}^{2p+1} a_n\cos n\theta\right)d\theta \\ &+ \lambda_0\left(\sum_{n=0}^{2p+1} a_n - 1\right) + \lambda_\pi\left(\sum_{n=0}^{2p+1}(-1)^n a_n + 1\right) \end{aligned} \tag{32}$$

で与える．ここで，$\lambda(\theta) \in \mathbb{R}\ (0 < \theta < \pi)$，$\lambda_0 \in \mathbb{R}$，$\lambda_\pi \in \mathbb{R}$ はそれぞれ制約 (i)，制約 (ii)，制約 (iii) に対するラグランジュ乗数である．ただし，最小化問題であるので，制約 (i) では $\sum_{n=0}^{2p+1} a_n\cos n\theta \ge -1$ だけを考える．もう一つの制約 $\sum_{n=0}^{2p+1} a_n\cos n\theta \le 1$ は，のちに満たされていることを確かめる．カルーシュ・クーン・タッカー条件（KKT 条件） [2], [23], [24] より，最適解は

$$\frac{\partial L(\{a_n\},\lambda(\theta)),\lambda_0,\lambda_\pi)}{\partial a_m} = 0 \text{ for } m = 0,\ldots,2p+1, \tag{33}$$

$$\lambda(\theta)\left(1 + \sum_{n=0}^{2p+1} a_n\cos n\theta\right) = 0 \text{ for } 0 < \theta < \pi, \tag{34}$$

$$\lambda(\theta) \ge 0 \text{ for } 0 < \theta < \pi \tag{35}$$

を満たす．式 (34) を，相補性条件と呼び，$0 < \theta < \pi$ において，$\lambda(\theta) = 0$ もしくは $\sum_{n=0}^{2p+1} a_n\cos n\theta = -1$ を満たす．

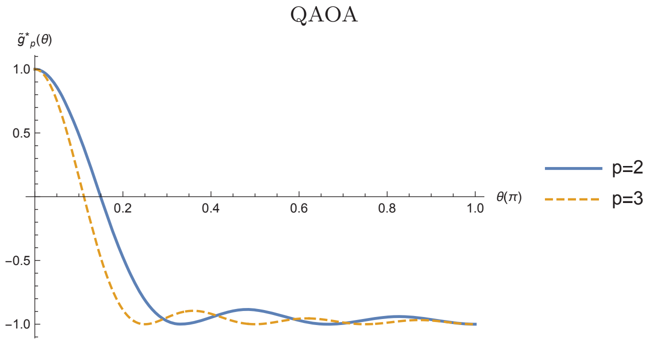

図 2 QAOA の $\tilde{g}^*_p(\theta)$．$p=2$，$p=3$ の場合をそれぞれ実線と点線とで示している．それぞれ $\theta = n\pi/(p+1)(n=1,\ldots,p)$ において，$\tilde{g}^*_p(\theta) = -1$ を取る．

式 (33) から，λ_0，λ_π を消去すると，

$$\frac{1}{2} = \int_0^\pi \lambda(\theta)(1-\cos 2\theta)d\theta, \tag{36}$$

$1 \le m \le p$（$m \in \mathbb{Z}$），$1 \le n \le p$（$n \in \mathbb{Z}$）に対し，

$$\int_0^\pi \lambda(\theta)\cos 2m\theta d\theta = \int_0^\pi \lambda(\theta)\cos 2n\theta d\theta, \tag{37}$$

$0 \le m \le p$（$m \in \mathbb{Z}$），$1 \le n \le p$（$n \in \mathbb{Z}$）に対し，

$$\int_0^\pi \lambda(\theta)\cos(2m+1)\theta d\theta = \int_0^\pi \lambda(\theta)\cos(2n+1)\theta d\theta \tag{38}$$

を得る．式 (36) より，少なくともある θ において $\lambda(\theta) \neq 0$ である．性質 (a)，性質 (b)，相補性条件より，$\lambda(\theta) \neq 0$ となる θ の数は p 以下となる．それらを $\theta^{(1)} \ldots \theta^{(p)}$ とし，

$$\lambda(\theta) = \sum_{n=1}^{p} \lambda^{(n)}\delta(\theta - \theta^{(n)}) \tag{39}$$

とする．ここで，$\delta(\theta)$ はデルタ関数である．$\theta^{(1)} \le \cdots \le \theta^{(p)}$ と並べる．式 (36)，式 (37)，式 (38) より，独立した $2p$ 個の式が得られる．これらの式が解を持つためには，$2p$ 個の変数が必要であり，従って $\theta^{(1)} < \cdots < \theta^{(p)}$ を得る．式の数と変数の数が等しいため，解は一意であり，

$$\theta^{(n)} = \frac{n\pi}{p+1}, \quad \lambda^{(n)} = \frac{1}{2(p+1)} \tag{40}$$

を得る．解は式 (35) を満たす．

緩和問題の最適解を与える $\tilde{g}^*_p(\theta)$ を求め，$\tilde{r}^*_p$ を与える．$\tilde{g}^*_p(\theta)$ は，性質 (c) と性質 (d) より，$\tilde{g}^*_p(0) = 1$ と $\tilde{g}^*_p(\pi) = -1$ を満たす．式 (40) と相補性条件より，$\tilde{g}^*_p(\theta) = -1$ は $\theta = \theta^{(n)}(n = 1,\ldots,p)$ で重解を持つ．性質 (a) より，$\tilde{g}^*_p(\theta)$ は一意に定まり，

$$\tilde{g}^*_p(\theta) = \frac{1}{2(p+1)^2}\frac{1-\cos 2(p+1)\theta}{1-\cos\theta} - 1 \tag{41}$$

を得る．$p=2$，$p=3$ の場合の $\tilde{g}^*_p(\theta)$ の関数形を図 2 に示した．最後に，$\tilde{g}^*_p(\theta)$ が制約 (i)$\tilde{g}(\theta) = \sum_{n=0}^{2p+1} a_n \cos n\theta \le 1$ は，

$$1 - \tilde{g}^*_p(\theta) = 2 - 2\frac{\sin^2(p+1)\theta}{4(p+1)^2\sin^2\frac{\theta}{2}} \ge 0 \tag{42}$$

より示される．ここで，$x \ge 1$ に対し，$\sin x\theta \le x\sin\theta$ を用いた．式 (28) に $\tilde{g}(\theta) = \tilde{g}^*_p(\theta)$ を代入し，r^*_p の上限として

$$\tilde{r}^*_p = \frac{2p+1}{2p+2} \tag{43}$$

を得る．

5. 一次元クラスター模型への QAOA の適用

この章では，２正則グラフの最大カット問題で得た結果の応用として，グラフ状態の一つである一次元クラスター状態の生成に対し，QAOA を適用する．グラフ状態とは，無向グラフ (V,E) 上で定義される量子状態である．ここで，V と E は頂点と辺の集合を表す．V_i を頂点 $i \in V$ と辺で繋がれている頂点の集合としたとき，グラフ状態はスタビライザー演算子 $K_i := \sigma^x_i \otimes_{j\in V_i} \sigma^z_j$ の同時固有状態として定義される．並進対称性のあるグラフ上で定義されたグラフ状態をクラスター状態と呼ぶ．クラスター状態は，トポロジカル状態の一つであり統計物理学や物性物理学において重要である [25]．大きなエンタングルメントを持ち，一方向量子計算 [26] や測定型量子計算 [27], [28] のリソース状態として，量子情報の分野においても重要である [29]．ここでは，２正則グラフ上で定義される一次元クラスター状態を考える．一次元クラスター模型のハミルトニアン H_C を，

$$H_C = \sum_{i=1}^{N} K_i = \sum_{i=1}^{N} \sigma^z_{i-1}\sigma^x_i\sigma^z_{i+1} \tag{44}$$

で与える．一次元クラスター状態は $-H_C$ の基底状態であり，基底状態での H_C の期待値は N である．H_B を横磁場で与える（式 (1) を参照）．

QAOA の近似度 r^*_p を与える．JW 変換により，

$$H_C = \sum_{k=0}^{N/2-1} H_{C,k}, \quad H_{C,k} = 2\vec{e}(2\theta_k)\cdot\vec{\sigma}_k \tag{45}$$

となる．２正則グラフの最大カット問題と比較すると，$H_{C,k}$ において $\vec{e}(\theta_k)$ が $\vec{e}(2\theta_k)$ となっている (式 (12) 参照)．したがって，$N \to \infty$ において，r^*_p（式 (17) を参照）は

$$\begin{aligned} r^*_p &= \max_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{\pi}\int_0^\pi g(\vec{\beta},\vec{\gamma};2\theta)d\theta, \\ &= \max_{\vec{\beta},\vec{\gamma}} \frac{1}{\pi}\int_0^\pi g(\vec{\beta},\vec{\gamma};\theta)d\theta \end{aligned} \tag{46}$$

となる．

２正則グラフの最大カット問題と同様にして，式 (46) の緩和問題を与える．

$$\tilde{r}_p^* = \max_{\tilde{g}(\theta)\in G} \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \tilde{g}(\theta)d\theta. \tag{47}$$

緩和問題の最適解を与える $\tilde{g}_p^*(\theta)$ は,

$$\tilde{g}_p^*(\theta) = -\frac{1}{2(p+1)^2}\frac{1-\cos 2(p+1)\theta}{1+\cos\theta}+1 \tag{48}$$

となり,

$$\tilde{r}_p^* = \frac{p}{p+1} \tag{49}$$

を得る.

6. 結論

本稿では，QAOA を２正則グラフの最大カット問題に適用した際の，近似度 r_p^* の上限を解析的に評価した．緩和問題を構成することで，QAOA の最適化問題が線形計画問題に帰着することを示した．緩和問題である線形計画問題を厳密に解くことで得られた近似度の上限は，QAOA で数値計算により得られる r_p^* の値と一致する．２正則グラフの最大カット問題の結果を応用して，一次元クラスター模型に対し QAOA を適用した.

将来の展望を３つ挙げる．まず第一に，QAOA と QA との比較である．本稿では，２正則グラフの最大カット問題に対し，QAOA と QA の性能が計算時間に対し異なるスケールを示すこと，結果として，十分長い計算時間では QAOA の性能が QA を上回ることを紹介した．その要因として，QA の性能のボトルネックを与える量子相転移現象 [30] の影響を，QAOA が回避できる可能性が挙げられる．QAOA と量子相転移現象との間の一般的な関係を示すことは重要な課題である．第二に，QAOA を用いたトポロジカル状態やエンタングル状態の生成法の確立である．主に組合せ最適化問題の解法のために用いられてきた QAOA が，有用な量子状態の生成に有効であると示すことで，QAOA の適用範囲を拡張させることができる．第三に，QAOA に対する緩和問題の構成法の確立である．本稿で示した緩和問題の構成法は，JW 変換によりスピン系が自由フェルミオン系にマップできるというモデルの特殊性に依存しており，その適用範囲は限定的である．したがって，より一般的な組合せ最適化問題に適用可能な方法に拡張することは今後の課題である.

謝辞　本研究の一部は，内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム（SIP)「光・量子を活用した Society 5.0 実現化技術」（管理法人：量子科学技術研究開発機構）によって実施されました。

参考文献

[1] Papadimitriou, C. H. and Steiglitz, K.: *Combinatorial optimization: algorithms and complexity*, Courier Corporation (1998).

[2] 梅谷俊治：しっかり学ぶ数理最適化 モデルからアルゴリズムまで，講談社 (2020 年).

[3] Farhi, E., Goldstone, J. and Gutmann, S.: A Quantum Approximate Optimization Algorithm, *arXiv preprint arXiv:1411.4028*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1411.4028⟩ (2014).

[4] Farhi, E., Goldstone, J. and Gutmann, S.: A Quantum Approximate Optimization Algorithm Applied to a Bounded Occurrence Constraint Problem, *arXiv preprint arXiv:1412.6062*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1412.6062⟩ (2014).

[5] Preskill, J.: Quantum Computing in the NISQ era and beyond, *Quantum*, Vol. 2, p. 79 (online), DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79 (2018).

[6] Bharti, K., Cervera-Lierta, A., Kyaw, T. H., Haug, T., Alperin-Lea, S., Anand, A., Degroote, M., Heimonen, H., Kottmann, J. S., Menke, T., Mok, W.-K., Sim, S., Kwek, L.-C. and Aspuru-Guzik, A.: Noisy intermediate-scale quantum (NISQ) algorithms, *arXiv preprint arXiv:2101.08448*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/2101.08448⟩ (2021).

[7] Wang, Z., Hadfield, S., Jiang, Z. and Rieffel, E. G.: Quantum approximate optimization algorithm for MaxCut: A fermionic view, *Phys. Rev. A*, Vol. 97, p. 022304 (online), DOI: 10.1103/PhysRevA.97.022304 (2018).

[8] Guerreschi, G. G. and Matsuura, A. Y.: QAOA for Max-Cut requires hundreds of qubits for quantum speed-up, *Scientific Reports*, Vol. 9, No. 1, p. 6903 (online), DOI: 10.1038/s41598-019-43176-9 (2019).

[9] Mbeng, G. B., Fazio, R. and Santoro, G.: Quantum Annealing: a journey through Digitalization, Control, and hybrid Quantum Variational schemes, *arXiv preprint arXiv:1906.08948*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1906.08948⟩ (2019).

[10] Mbeng, G. B., Fazio, R. and Santoro, G. E.: Optimal quantum control with digitized Quantum Annealing, *arXiv preprint arXiv:1911.12259*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1911.12259⟩ (2019).

[11] Zhou, L., Wang, S.-T., Choi, S., Pichler, H. and Lukin, M. D.: Quantum Approximate Optimization Algorithm: Performance, Mechanism, and Implementation on Near-Term Devices, *Phys. Rev. X*, Vol. 10, p. 021067 (online), DOI: 10.1103/PhysRevX.10.021067 (2020).

[12] Willsch, M., Willsch, D., Jin, F., De Raedt, H. and Michielsen, K.: Benchmarking the quantum approximate optimization algorithm, *Quantum Information Processing*, Vol. 19, No. 7, p. 197 (online), DOI: 10.1007/s11128-020-02692-8 (2020).

[13] Wurtz, J. and Love, P. J.: MAXCUT QAOA performance guarantees for $p > 1$, *arXiv preprint arXiv:2010.11209*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/2010.11209⟩ (2021).

[14] Håstad, J.: Some Optimal Inapproximability Results, *J. ACM*, Vol. 48, No. 4, pp. 798–859 (online), DOI: 10.1145/502090.502098 (2001).

[15] Aliaee, B., Kochenberger, G. A. and Ahmadian, A.: 0-1 Quadratic programming approach for optimum solutions of two scheduling problems, *International Journal of Systems Science*, Vol. 25, No. 2, pp. 401–408 (online), DOI: 10.1080/00207729408928968 (1994).

[16] Deza, M. and Laurent, M.: Applications of cut polyhedra — I, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 55, No. 2, pp. 191–216 (online), DOI: https://doi.org/10.1016/0377-0427(94)90020-5 (1994).

[17] Lieb, E., Schultz, T. and Mattis, D.: Two solu-

ble models of an antiferromagnetic chain, *Annals of Physics*, Vol. 16, No. 3, pp. 407–466 (online), DOI: https://doi.org/10.1016/0003-4916(61)90115-4 (1961).

[18] Brandao, F. G. S. L., Broughton, M., Farhi, E., Gutmann, S. and Neven, H.: For Fixed Control Parameters the Quantum Approximate Optimization Algorithm's Objective Function Value Concentrates for Typical Instances, *arXiv preprint arXiv:1812.04170*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1812.04170⟩ (2018).

[19] Farhi, E., Goldstone, J., Gutmann, S. and Zhou, L.: The Quantum Approximate Optimization Algorithm and the Sherrington-Kirkpatrick Model at Infinite Size, *arXiv preprint arXiv:1910.08187*, (online), available from ⟨https://arxiv.org/abs/1910.08187⟩ (2020).

[20] Kadowaki, T. and Nishimori, H.: Quantum annealing in the transverse Ising model, *Phys. Rev. E*, Vol. 58, pp. 5355–5363 (online), DOI: 10.1103/PhysRevE.58.5355 (1998).

[21] Tanaka, S., Tamura, R. and Chakrabarti, B. K.: *Quantum spin glasses, annealing and computation*, Cambridge University Press (2017).

[22] Dziarmaga, J.: Dynamics of a Quantum Phase Transition: Exact Solution of the Quantum Ising Model, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, p. 245701 (online), DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.245701 (2005).

[23] Kuhn, H. W. and Tucker, A. W.: Nonlinear programming, *Traces and emergence of nonlinear programming*, Springer, pp. 247–258 (2014).

[24] Karush, W.: Minima of functions of several variables with inequalities as side conditions, *Traces and Emergence of Nonlinear Programming*, Springer, pp. 217–245 (online), available from ⟨https://catalog.lib.uchicago.edu/vufind/Record/4111654⟩ (2014).

[25] Ohta, T., Tanaka, S., Danshita, I. and Totsuka, K.: Topological and dynamical properties of a generalized cluster model in one dimension, *Phys. Rev. B*, Vol. 93, p. 165423 (online), DOI: 10.1103/PhysRevB.93.165423 (2016).

[26] Raussendorf, R. and Briegel, H. J.: A One-Way Quantum Computer, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 86, pp. 5188–5191 (online), DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.5188 (2001).

[27] Raussendorf, R., Browne, D. E. and Briegel, H. J.: Measurement-based quantum computation on cluster states, *Phys. Rev. A*, Vol. 68, p. 022312 (online), DOI: 10.1103/PhysRevA.68.022312 (2003).

[28] Fujii, K., Nakata, Y., Ohzeki, M. and Murao, M.: Measurement-Based Quantum Computation on Symmetry Breaking Thermal States, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 110, p. 120502 (online), DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.120502 (2013).

[29] 小柴健史，藤井啓祐，森前智行：観測に基づく量子計算，コロナ社 (2017 年).

[30] Sachdev, S.: *Quantum phase transitions*, Wiley Online Library (2007).