

# 最大カットに対する QAOA と古典近似アルゴリズムの近似率

今井 浩<sup>1,a)</sup> 佐藤 英一郎<sup>1</sup>

**概要:** 量子計算と古典計算の近似アルゴリズムで、近似率の保証をもつもの間では、比較の公平性に注意してであるが、その近似率に関する比較が可能となる。本稿では、最大カット問題に対する量子・古典近似アルゴリズムについて、この比較を行ってまとめる。その中で、第2著者による古典近似アルゴリズムについても触れる。量子計算での近似アルゴリズムとしては、近似率に関する成果も出ている QAOA に着目する。近似率は、近似アルゴリズム設計・解析と計算量理論で軸となるものであり、その比較から近似率の観点で量子優位性が成り立つのかが調べられている。なお、これらまとめの中で、量子メタヒューリスティックスの解析での理論結果の適格な適用についても触れる。

## 1. はじめに

組合せ最適化問題に対して、QAOA<sup>\*1</sup> という近似精度保証付きの量子近似最適化アルゴリズムの1つが提案されており、その近似精度保証で未知の最適解値と近似アルゴリズムの近似解値の比を用いて、近似アルゴリズムの比較を行う研究が進んでいる。(なお、近似精度保証を持たない近似アルゴリズムは、一般に(メタ)ヒューリスティックスと呼ばれる近似精度保証をもたない近似アルゴリズムについては、量子アニーリング・量子断熱計算が量子計算での代表的なものがあるが、本稿では一部で触れるのみとする。)

QAOA の最初の論文 [11] では、QAOA が 3 正則グラフの最大カットで定数近似値比を持つことが示されたが、それは一般の最大カットに対する古典アルゴリズムの近似値比を超えるものではなかった。しかし、その直後に提案者から別の論文 [12] が出され、MAX-E3-LIN-2 という問題で、QAOA がその時点までに知られていた古典アルゴリズムを超える近似率比をもつことが示され、注目された。その問題に対しては、すぐに QAOA を超える古典アルゴリ

ズムが発表され [5]、以降、最大カットを主に研究が進められてきた。

本稿では、近似値比解析を用いた量子計算と古典計算の比較の際には、その両方の計算野での研究を踏まえ、新たな研究を展開することが必須であろうという観点に立ち、量子・古典の近似アルゴリズムの現状についてまとめている。対象問題としては、両方で中心的な役割を果たしている最大カット問題を考える。これらの多くの近似アルゴリズムは、局所性を持ったものが多く、それを軸に見通しよく比較が可能である。一方、第2著者による低次数のグラフの最大カット問題に対する古典線形時間の近似アルゴリズムに関する新しい結果は、その局所性がなく、またグラフ全体の分解を扱うということで、別のタイプのものとなっている。しかしながら、QAOA のもつ局所性が限界ともなっていることから、そのような近似アルゴリズムとの関係をみるのも面白いと思われる。古典計算のアルゴリズムの別の観点での大別として、半定値計画を用いるものと、それを用いない純粋に組合せアルゴリズムに分類し、それがともに QAOA に関係しているところをみていく。また、量子計算の近似アルゴリズムと比較する際に、古典の近似アルゴリズムの評価が正確にすべきであり、その際に注意した方がよい点もまとめる (これは量子メタヒューリスティックスにも通じるところである)。

なお、上記のように本稿では QAOA を取り巻く理論をまとめるが、実際のデバイスを用いた研究も発表されている。Google 研究者らによる論文 [16] と同号の News & Views の Barak [3] の記事も、QAOA での量子優位性は示されていないものの、着実な研究でこれからの課題に取り

<sup>1</sup> 東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

<sup>a)</sup> imai@is.s.u-tokyo.ac.jp

<sup>\*1</sup> Farhi, Goldstone, Gutman は A Quantum Approximate Optimization Algorithm [11] の論文で日本語で書くと1つの量子近似最適化アルゴリズムの提案をしており、そのアルゴリズムの略として QAOA が用いられている。その論文のタイトルで、不定冠詞の a が用いられていることからしても、量子計算の研究の進展によって他の量子近似最適化アルゴリズムが提案されていくと思われる。その場合には、3名の著者名のアルゴリズムと呼ばれるか、ときにイニシャルを用いて FGG アルゴリズムなどと呼ばれるかもしれないが、本稿では QAOA の略語でこのアルゴリズムのことを意味するとする。

組むことについて記されている\*2。

## 2. 組合せ最適化問題— 起源と近似解法

最大カット問題に入るまえに、組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムを考えているので、まず組合せ最適化問題の歴史を振り返り、近似アルゴリズムの性能解析についてまとめる。

組合せ最適化問題 (Combinatorial Optimization) の研究の歴史は長い。Schrijver [27] のサーベイは、組合せ最適化の代表的問題である割当問題の古典的研究として、1784 年の Monge の研究をあげている。また、典型的問題に関する 20 世紀前半の先駆的研究をあげている一方、一番最初の書き出しでは 1950 年前後の線形計画問題・整数線形計画問題が統一的なアプローチを与えた時期に一貫した数理的原理が確立されたこととしており、その点では相対的に若い分野だともしている。

その 1950 年過ぎに確立された 2 つのアルゴリズムに触れておこう。 $n$  点、 $m$  枝のグラフで、枝長が非負のとき、1 点から他の点への最短路を求める Dijkstra のアルゴリズムは 1959 年に論文が出ている [10]。今では時間計算量が  $O(m + n \log n)$  であることがわかっている。NP 困難問題の Traveling Salesperson Problem (TSP) に対しては、近似アルゴリズムも多数発表されているが、当初でも小規模の場合を正確に解く  $O(n^2 2^n)$  時間のアルゴリズムが 1962 年に発表されている [7], [19]。これらは今や半世紀以上前の成果で、情報系の学科で通常講義される内容になっている\*3。

近年、量子計算の分野で組合せ問題を量子力学原理を用いた汎用なり専用目的なりのコンピュータで解くことが注目されている。実際、Aaronson [1] は様々な物理系を用いたコンピュータで、組合せ最適化問題を解く試みについての計算量を主とした観点からの計算に関する本質の議論をしている。

そのような種々の物理系に基づくアプローチ以外に、本当に多岐に亘る方法で組合せ最適化問題を解くことについて研究されてきており、組合せ最適化問題を解くという表現も多様な意味で使われている。「組合せ最適化問題を解く」という表現をする際には、以下のどの意味で用いられているか明らかであるようにしないといけない。

- 厳密解を求める問題であるのか、近似解を求める問題であるのか
- 近似解を求める場合、近似精度の理論的保証があるのかないのか

応じて、組合せ最適化問題の計算困難さ・計算量に関し

\*2 本稿まとめ周辺で、Barak 自身の研究成果 [4] にも触れているので、そちらも参考にされたい。

\*3 TSP に対してよく  $n!$  の順列を全て調べてといった表現を見かけるが、半世紀以上前からそれは冗長で  $O(n^2 2^n)$  時間で解け、 $n = 20, 30$  とかなら個人でさっと解ける問題である。

ては、

- 組合せ最適化問題の厳密解を求める問題判定版の NP 完全性
- 組合せ最適化問題の近似解の精度が、計算量理論の NP 完全性・MAX SNP 完全性・PCP・UGC 等の観点でタイトであるか

といったことや

- 厳密解を求める問題の間の多項式時間変換は、近似解を求める問題の間の変換として近似精度を一般には保証しないこと
- 近似解を求める問題の間の変換で近似精度保証を保つことは一般に難しい

など基本的な事項に注意を払う必要がある。また、最適化問題を上記のどれか 1 つの場合の意味で解くことを目的としたとしても、他の場合も含めて総体的に評価する必要がある。そもそも最適化問題を扱うかぎり、多岐・多様に亘る分野の成果を評価する必要がある。それだけ真に学際的な研究対象である。

ここで近似精度を表す指標である近似値比 (Approximation Ratio) について、簡単に注意すべき点を述べておく。本稿で対象とする最大カット問題では、Goemans-Williamson による 0.878 近似値比の多項式時間アルゴリズムが有名である。最大化問題で、入力インスタンス  $I$  に対して、その最大化する関数の最大値を  $OPT(I)$  で表し、多項式時間近似アルゴリズム  $A$  の出力する解のその関数の値を  $A(I)$  としたとき、その最大カットの場合では Goemans, Williamson のアルゴリズムを GW と呼び、入力インスタンス  $I$  の枝重み付きグラフに対して、

$$\frac{GW(I)}{OPT(I)} \geq 0.878 \quad (\forall \text{ インスタンス } I)$$

が成立する。これは最大カット問題を非負の枝重みの最大重みカットの場合でも成立する。そして、計算量理論での Unique Games Conjecture が成立するなら、このバウンドはほぼタイトと示せるということで、この数値が本質的な意味を持つと思われる。

一方で、統計物理での Ising モデルや他の NP 完全問題を最大重みカット問題に変換した場合には、正と負の重みがある問題が出てくる。たとえば、3 点の完全グラフで枝重みが  $1, -1, -1$  の場合、最大重みカットの値  $OPT(I) = 0$  で比そのものが定まらないなど、異なる状況が現れてくる。より一般的には

$$A(I) \geq a \cdot OPT(I) + b$$

というようなバウンドになってしまう場合もある (実際、Goemans, Williamson の論文では枝重みが非負の場合について、そのようなバウンドを与えている)。このとき、 $a$  が近似値比に対応して、近似アルゴリズムの性能のよい評価尺度になっているかということ、当然のことながら  $a, b$  の内

の加法的誤差の  $b$  が大きい場合には答えがノーとなる。(量子計算での Jones 多項式や Ising 分配関数の加法的近似アルゴリズムでは、加法的誤差のバウンドが出せるものの、一方でそれがかなり大きい場合もあることがわかっている。) 結局、近似アルゴリズムを考える元の動機・理由に立ち返って、近似の良さを評価することが大切である。

コンピュータ科学では、理論的に計算量を解析することで各アルゴリズムを比較することを基本としているが、一方でアルゴリズム工学や実際的アルゴリズムなどの名称で具体的な問題をアルゴリズムを実装したプログラムで解いて評価することも行われており、そのような立場も重要である。NP 困難などの難しい問題を実際的に解く際には後者がなお一層重要となる。古典計算でも、近似精度の理論的保証がないヒューリスティックスの研究も盛んであり、種々の問題で具体的なヒューリスティックスの構築を可能とする枠組みのメタヒューリスティックスも多数示されている。量子最適化アルゴリズムを現代コンピュータでシミュレートすることは、メタヒューリスティックスの 1 つと解釈できるということで、近似精度保証を活用する際の注意点にも以下で触れる。

### 3. 最大カット問題と Ising モデル

無向グラフ  $G = (V, E)$  ( $V$ : 点集合,  $E$ : 枝集合;  $n = |V|$ ,  $m = |E|$ ) において、点集合の 2 分割  $(V_1, V_2)$  ( $V_1 \cup V_2 = V$ ,  $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ ) によるカット (cut) は、 $V_1$  の点と  $V_2$  の点を結ぶ枝全体の集合である。各枝  $e \in E$  に重み  $w(e)$  が与えられているとき、カットの重みをそれに含まれる枝の重みの和と定める。最大カット問題は、グラフの最大重みのカットを求める問題である。枝の重みがすべて 1 の場合は、最大サイズのカットを求める問題になっている。カットに関する諸問題は、グラフ理論・組合せ最適化・計算量理論・近似アルゴリズム等の様々な面で基本的な役割を果たし、かつ社会科学・物理など他の分野と関係するという点でも重要な問題である。最近では、統計物理での Ising モデルの基底状態球解という 2 次無制約 2 値計画 (Quadratic Unconstrained Binary Optimization; QUBO) と等価な問題、すなわち最大カットと等価な問題を量子アニーリングの専用量子コンピュータで解くことなども試みられている。さらにそこに QAOA という近似精度保証付きの近似アルゴリズムが提案されている。

Ising モデルは 1920 年代に物理文やで提案された問題で、その中の基本的問題として上記に書いた Ising モデルの最小エネルギー状態その上記のグラフの場合で、 $x = (x_i) \in \{-1, 1\}^V$  に対して

$$\min \left\{ \sum_{(u,w) \in E} w(e)x_u x_w \mid x_i = \pm 1 (v_i \in V) \right\}$$

という最小化問題の解を求める問題である。最小エネルギー

を与える最適解を、物理では基底状態と呼ぶ。

$$\begin{aligned} \min \sum_{(u,w) \in E} w(e)x_u x_w \\ = \sum_{e \in E} w(e) - 2 \sum_{x_u x_w = -1, e=(u,w)} w(e)x_u x_w \end{aligned}$$

から、最大カット問題と Ising モデルの最小エネルギー状態の最適化は一致している。(最適化している値は違うので、近似値比に関しては異なることになる。)

### 4. QAOA

この節では、Farhi, Goldstone, Gutmann [11] によって提案された量子近似最適化アルゴリズム (Quantum Approximation Optimization Algorithm; QAOA) について、原論文に基づいて簡単に紹介する。

量子計算では  $n$  点に対応する  $n$  量子ビットを考え、Pauli のスピン行列を用いて最大カット (これが量子アニーリング・量子断熱計算に直結する) の問題を書き下すと、

$$\min \sum_{(u,w) \in E} w(e)Z_u Z_w$$

となる。横磁場 Ising モデルを用いた量子断熱計算の Hamiltonian

$$H(t) = t \sum_{(u,w) \in E} w(e)Z_u Z_w + (1-t) \sum_{v \in V} X_v$$

量子断熱計算は  $t = 0$  での基底状態から、 $t$  を 0 から 1 に動かしつつ各  $H(t)$  の基底状態を保持して、 $t = 1$  の基底状態を求める方法である。QAOA はこの Hamiltonian に関する Schrödinger 方程式で解くことを、量子・古典シミュレーションでよく用いる解の指数関数  $e^{-iH(t)t}$  について Suzuki-Trotter 分解を用いて解くイメージである。

実際に近似率を考える場合は、Ising モデルのエネルギーでなく、最大カットに着目し、さらに簡単のためすべての枝の重みが 1 の場合を考えると、論文 [11] の表記を用いると

$$\begin{aligned} C = \sum_e C(e), \quad C(e) = \frac{1}{2}(I - Z_u Z_w) (e = (u, w) \in E) \\ B = \sum_v B(v), \quad B(v) = X_v \quad (v \in V) \end{aligned}$$

とし、 $C, B$  を  $p$  段に分解した各行列のパラメタを  $\gamma_1, \dots, \gamma_p$  と  $\beta_1, \dots, \beta_p$  として、に対して

$$|\gamma, \beta\rangle = U(B, \beta_p)U(C, \gamma_p) \cdots U(B, \beta_1)U(C, \gamma_1)|s\rangle$$

ここで

$$U(C, \gamma) = e^{-i\gamma C}, \quad U(B, \beta) = e^{-i\beta B}, \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum |x\rangle$$

である。

アルゴリズムとしては、量子コンピュータで上記の計算

をして、計算基底で測定した際に大きなカットに対応する基底が測定できるようにし、その間数値を求めて古典的最適化法を適用して  $\gamma, \beta$  を更新し、ということを繰り返す。

このアルゴリズムは  $p$  を十分大きくしたとき、量子断熱計算での理論も用いて、最適解に収束する近似解が得られる。

## 5. 近似値比

### 5.1 半定値計画 (SDP) を用いた近似アルゴリズム

#### 5.1.1 Goemans, Williamson のアルゴリズム

最大カットと Ising モデルとの関係式デモ見られたように、最大カット問題は次のように書ける。以降、行列で記述するため、グラフの点の添字を行列形式で用いて書いている

$$\text{OPT}(I) = \max \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i < j} w_{ij} (1 - x_i x_j) \mid x_i \in \{-1, +1\} \right\}$$

それに対し、グラフの枝重み付き Laplacian  $L = (l_{ij})$  を

$$l_{ii} = \sum_{j \neq i} w_{ij}, \quad l_{ij} = -w_{ij}$$

で定め、

$$\text{SDP}(I) = \max \left\{ \frac{1}{2} \text{Tr}(LX) \mid X_{ii} = 1, X \geq 0 \right\}$$

を考えると、SDP(I) で  $X$  のランクを 1 と制限した場合は  $\text{OPT}(I)$  となることから、この SDP(I) は最大カットの半定値緩和となっており、任意の重みに対して

$$\text{SDP}(I) \geq \text{OPT}(I)$$

が成立する。この半定値計画の最適解を利用して、randomized hyperplane rounding を適用するのが Goemans, Williamson のアルゴリズムであり、その最適解の期待値を  $\text{GW}(I)$  とする。このときここで、枝重みが非負であると仮定すると、次が成り立つ。

$$\text{枝重み非負: } \text{GW}(I) \geq \alpha \text{SDP}(I) \geq \alpha \text{OPT}(I)$$

ここで、 $\alpha$  は次式を満たす。

$$\alpha = \min_{0 \leq \theta \leq \pi} \frac{2}{\pi} \frac{\theta}{1 - \cos \theta} > 0.87856$$

枝重みが非負という仮定は、Goemans, Williamson の論文では Introduction の最初に記述されている。証明においては、

- $E[\text{Tr}(LX)]$  の評価で、期待値  $E$  と  $\text{Tr}$  の和のについて、期待値の線形性を用いて交換し、基本的に各枝という局所に限った解析をおこなっている
- その過程で、不等式に枝重みを両辺にかけるところがあるが、負の場合は負等号が逆になって証明がおかしくなる。

で Goemans, Williamson の論文では、枝重みで正負の値をとる場合には、次の不等式が証明されている。

$$\text{枝長正負 } \text{GW}(I) \geq \alpha \text{SDP}(I) + (1 - \alpha)W_-$$

ここで、

$$E_- = \sum_{w_{ij} < 0} w_{ij}$$

で、Goemans, Williamson の論文では枝長非負の場合は近似値比  $\alpha$  が枝長正負の場合に成り立つとは書かれていない。さらに次の点が述べられている。

- カットサイズが大きい場合によりよいバウンド重みが非負の場合の近似値比  $\alpha$  は、Unique Games Conjecture が正しいなら、任意の  $\epsilon > 0$  に対して、 $\alpha + \epsilon$  の近似値比をもつ多項式時間近似アルゴリズムは存在しないという点で、ベストなものになっている [22]。

実際の最大カットのインスタンスについては、 $\alpha$  はあくまで近似値比として下限を与えるものであり、 $\alpha \text{SDP}(I)$  は下限以上の意味はない。

#### 5.1.2 SDP の諸アルゴリズム

半定値計画問題は、内点法によって指定した精度  $\epsilon > 0$  と入力サイズに関して多項式時間で解くことができるが、アルゴリズムの高度化・高速化の研究が進んでいる。その中で量子計算・量子情報でも半定値計画が重要な役割を果たしている。半定値計画で内点法の次の方法として Multiplicative weight update を用いたアルゴリズム (Arora, Kale [2]) がある。これは、QIP=PSPACE の証明での NC 実装を可能にするとともに、最大カットでも、正則グラフに対するほぼ線形時間アルゴリズムにまで拡張されている。をはじめとして ([29] も参照)。これらは Goemans, Williamson の近似値比に関する議論を基本的に受け継いでいる。

SDP アルゴリズムは、最近でも機械学習分野などでも SDP アルゴリズムの開発が行われている。元々、非線形最適化の立場で、低ランクの制約のついた SDP 問題を非線形最適化の手法で大規模な問題を近似的に解くことも行われていた。そのようなアルゴリズムは、実用的な計算で大規模問題を解くことを目指したもので、近似精度保証は必ずしもできない。

## 5.2 グラフの次数に着目した古典近似アルゴリズム

半定値計画は、基本的には連続的最適化手法で解かれている。もちろん、半定値計画を解いていても、基本的にグラフの構造を解析してアルゴリズムが構築されており、実際、[2] ではタイトルに combinatorial が含まれている。最大カット問題では従前で固有値を用いた結果が知られていたが、Goemans, Williamson [14] の半定値計画は基本的に同じであることが知られていた [24] (Goemans, Williamson の貢献の大きなところは、Perfect Graph に関して半定値

計画を適用した Lovász の研究の発展として、近似アルゴリズムの世界に半定値計画を用い、かつ random hyperplane rounding を導入した点だともいえる)。論文 [14] では、この関係を半定値計画の双対定理のもとで詳細に議論している。そこで、SDP や固有値計算等を含む任意の数が出てくる数値計算を用いない近似アルゴリズムを以下では組合せ近似アルゴリズムと呼ぶ。

実際のところ、Goemans, Williamson のアルゴリズム以前は、組合せ近似アルゴリズムで、自明な  $1/2$  を超える近似値比のものは知られていなかった。

グラフ理論の立場からは、 $OPT(I)$  を枝数  $m$  で置き換えた場合の比が自明に  $1/2$  以上になる点 (点の 2 分割を各点等確率で決める素朴な乱択アルゴリズムを考えればよい) に着目し、グラフの次数  $D$  に対してその比が  $1/2 + c/\sqrt{D}$  ( $c$ : 定数) となる組合せ近似アルゴリズムについての研究が先行して行われており、それが後述するように QAOA の解析に通じている。

また、コンピュータ科学の理論研究の観点からは、Paul Erdős に代表される組合せ論・グラフ理論の成果を、計算量理論での 1985 年からの Interactive Proof (IP) やその発展で Probabilistically Checkable Proof (PCP)、さらに Unique Games Conjecture の研究の中で発展させ、アルゴリズム理論では対応して定数次数のグラフ問題の近似アルゴリズム・近似値比解析も盛んになっていたところである [17], [22]。

### 5.2.1 Shearer の組合せ近似アルゴリズム

以下では Goemans, Williamson の論文の少し前の 1992 年に Shearer の論文 [28] 以降を紹介する。Shearer の論文では、 $n$  点、 $m$  枝の三角形を含まないグラフでの最大カットを扱っている (QAOA でも同じグラフを用いた解析がある)。ここでは、最大カットサイズが容易に得られる  $m/2$  以上という結果を、 $m/2 + cm^{3/4}$  ( $c$ : 定数) 以上であることを、そのサイズのカットを見つける乱択アルゴリズムとともに示している。なお、このオーダその論文では、それ以前の成果として、以下で出てくる Tuza の以前の Technical Report での結果も引用している。

この研究は、直近の QAOA と古典近似アルゴリズムに関する Barak, Marwaha [4] でも拡張されている。この拡張までの結果を、 $D$  正則グラフで枝数  $m$  に対する比の形で書くと、

- Shearer のバウンド: 3 角形を含まないときには  $1/2 + 0.177/\sqrt{D}$
- Hirvonen, Rybicki, Schmid, Suomela [20] のバウンド: 3 角形なしのとき、 $1/2 + 0.28125/\sqrt{D}$
- QAOA によるバウンド [25], [30]  $1/2 + 0.3032/\sqrt{D}$  (量子アルゴリズムであることに注意)
- Barak, Marwaha [4] のバウンド: 最小閉路長が大きいとき  $1/2 + 0.6366/\sqrt{D}$

と拡張されている。

### 5.2.2 Halperin, Livnat, Zwick の近似アルゴリズム

Halperin, Livnat, Zwick [15] は、高々次数 3 のグラフでの SDP を用いた 0.9326 近似値比のアルゴリズムを与えている。このアルゴリズムは、Goemans, Williamson のアルゴリズムで random hyperplane rounding を適用した後で、低次数のグラフの性質を活用してランダムさゆえに負の効果の丸めが生じている部分を、局所的に補正して、この場合の近似値比を改善するというものである。

また同論文で、高々次数 3 のグラフに対する組合せ近似アルゴリズムで、 $4/5$  近似値比のものを与えている。その局所改良を更新するところで、3 正則グラフの場合には  $22/27$  近似値比の組合せ近似アルゴリズムを与えている。

この論文は QAOA 提案論文 [11] でも引用され、また解析も通じるものがある。すなわち、ともに高々次数 3 や 3 正則のグラフの 1 つの枝周辺の局所的な性質を解析することで、全体での近似値比を導出している。なお、1980 年代のグラフ理論の論文からの発想で次数制限に着目しており、グラフ理論での問題意識をここからも理解することができる。

### 5.2.3 Bazgan, Tuza の組合せ近似アルゴリズム

さらに Bazgan, Tuza [6] は、高々次数 3 のグラフに対して、 $5/6$  近似値比の  $O(n^2)$  時間のアルゴリズムを与えている。論文では、グラフの分解として、高々 3 次のグラフの場合に unicyclic decomposition に着目している。ここで、 $G$  の点誘導部分グラフが unicyclic であるとは、それがちょうど 1 つの閉路をもつことをいい、unicyclic decomposition は大まかには点素な unicyclic graphs と木への分解である。この分解を活用することで、上記の近似値比が得ている。乱択アルゴリズムではなく、全体のグラフのこの分解を用いている点で、他の近似アルゴリズムと異なり、興味深い。古典アルゴリズムの場合には、直接そのような分解理論をアルゴリズムにすることができる。この論文でも既存のアルゴリズムとの比較が詳述されている。

### 5.2.4 Sato の組合せ近似アルゴリズム

さらに Sato [26] は、Bazgan, Tuza のアルゴリズムを拡張したものである。そのアルゴリズムで用いている unicyclic decomposition を拡張して、2 部グラフへの点素な分解を、とある条件を満たす木でつなぐという新たな分解を導入して、その構成、それを用いた近似アルゴリズムが線形の計算時間を実行できることを示している。これによって、より一般の疎なグラフに対する組合せ近似アルゴリズムを構成し、それを特別な場合である次数が高々 3 のグラフに適用した場合には線形時間で Bazgan, Tuza の論文と同じ近似値比が達成できることを示している。

このように、古典アルゴリズムでは、新たなグラフ分解の導入で対象を拡張して、元問題の計算量が改善できるが、それを量子アルゴリズムにする場合、局所探索ではなくな

るくなるなど量子アルゴリズムとの対応をとるのは難しくなっている。このような量子アルゴリズム設計での自由度を高める研究も、量子計算の新展開をもたらすための今後の課題と思われる。

### 5.2.5 Kale, Seshadhri の組合せ近似アルゴリズム

年代に関しては前項の者より前のものであるが、最後に一般のグラフに対する  $1/2$  を超える定数の近似値比をもつ組合せ近似アルゴリズムを初めて与えた Kale, Seshadhri [21] の結果を簡潔にまとめておく。手法としてはランダムウォークを用いて情報を集約することで、任意の定数  $b > 1.5$  に対して、 $\tilde{O}(n^b)$  時間の組合せ近似アルゴリズムで、近似値比が  $1/2 + \delta(b)$  ( $\delta(b)$  は  $b$  により決まる正定数) となるものを与えている。論文の中で例示では、 $b = 1.6, 2, 3$  に対して近似値比が  $0.5051, 0.5155, 0.5277$  となっている。

## 5.3 QAOA

Farhi, Goldstone, Gutmann [11] では、QAOA を提案し、段数  $p$  を無限大にもっていった際に、(古典最適化が正確にできたとして) アルゴリズムの解が最適解に収束することを示すとともに、 $p = 1, 2$  の場合に近似値比を与えている。

- 3 正則,  $p = 1$ : 0.6924
- 3 正則 2 部グラフ,  $n$  大,  $p = 2$ : 0.7559

その近似値比の解析は、

- Goemans, Williamson のアルゴリズムの際に、期待値をとる中に枝に関する和がある点を、期待値の線形性を用いて交換して、1 つの枝の両端点の変数値 (この場合、変数ベクトル) のみに着目した局所的解析が可能であったのと同様に、
- QAOA でもその期待値の線形性を用いて各枝に着目し、ただこの場合はその枝から  $p$  本の枝で到達できる近傍に限定しての局所的解析を場合分けを通して行うことで達成されている。従前の低次数のグラフに対する純組合せ近似アルゴリズムの解析でも、論文 [11] に出てくるグラフと同様なグラフに着目して、局所的な解析を行った上で全体の証明を構成している。

## 5.4 QAOA と古典近似アルゴリズムの近似値比の比較

QAOA の  $p = 1, 2$  の場合の近似値比は、次数を高々 3 と制限したグラフに対するものであるのに、一般のグラフに対する Goemans, Williamson のアルゴリズムの近似値比より小さい。しかしながら、QAOA の  $p$  がより大きな場合の近似値比がどうなるかは当初わからなかった。

第 1 節で触れたように、QAOA 提案論文 [11] の直後に提案者から出された別の論文 [12] では、MAX-E3-LIN-2 という最大カットを少し拡張したともいえる問題で、QAOA がその時点までに知られていた古典アルゴリズムを超える近似値比をもつことが示されたが、すぐに QAOA を超え

る古典アルゴリズムが発表された [5] という経緯もある。

Hastings [18] は、近似値比の解析をはじめ、QAOA では局所的な計算のパラメタを最適化した比の上限を求めた上で、

- 古典最適化アルゴリズムでの局所計算を定義して、古典計算の 1 段の近似アルゴリズムが 1 段の QAO と同程度の性能を MAX-3-LIN-2 という問題ではもつこと
- 3 角形を含まないグラフの最大カット問題に対しては、論文 [20] のアルゴリズム (の近似値比を数値計算でよりタイトに求め、一部段数の場合はアルゴリズムを少し拡張したものは、1 段の QAOA に比べ、よりよい近似値比をもつ

ことを示している。2 段の QAOA についても、正則で最小閉路長が 5 より大きなグラフに対して同様な結果が得られている [23]。最大カットの近似値比に関しては、古典の Shearer のバウンドの改良が続いてこの結果が得られており、そのバウンドのところで書いた Barak, Marwaha [4] の論文のようにさらに拡張されている。

Bravyi, Kliesch, Koenig, Tang [8] は、別の枠組みで、とある一群の最大カット問題に対して、定数段数の QAOA では Goemans, Williamson のアルゴリズムよりよい近似値比は出せないことを示している。より具体的には、

- $p < (\frac{1}{3} \log_2 n - 4)/D$  を満たす  $p$  段の QAOA に対し、 $D$  正則グラフの集合が存在して、その中のグラフに対しては近似値比が  $\frac{5}{6} + \frac{\sqrt{D-1}}{3D}$  でバウンドされる。

という結果を出し、点数  $n$  が大きく、 $D$  もある程度大きい場合に、Goemans, Williamson のアルゴリズムの近似値比より小さくなる。

同論文では、この限界を超えるために、局所性を脱した Recursive QAOA の提案もしている。なお、論文 [8] のジャーナル版では書かれていないが、この preprint 版では量子 PCP 定理に向けた研究の中で Freedman, Hastings [13] が導入した No Low-energy Trivial States (NLTS) conjecture での対称性に着目した弱い版を議論することによって、この結果を得たとされている。

ここまで書いてきた局所性は、現在の near-term devices で実現可能な局所性に対応している。この near-term devices の課題を何らかの形で越えたところでの、古典-量子連携した計算などが模索されている。

## 6. まとめ

QAOA と古典近似アルゴリズムの近似値比の比較を通して、古典計算での幅広い組合せ最適化のアルゴリズムと計算量に関する研究が、量子計算での組合せ最適化とも密に関係して、まさしく古典・量子両方の面での進展をもたらしている。近似値比のみでなく、計算機実験による解析も望まれる。今後の大きな課題は、量子計算における次世代の組合せ最適化の枠組みを構築することであると思われる。

## 謝辞

本研究では、東京大学での IBM Quantum のハブ上で、IBM Quantum 量子コンピュータを利用した研究の一環で得た成果である。本研究は、JSPS 科研費 JP20H00579, JP20K11682, JP18K19776, JP15H01677 の助成を受けた。

## 参考文献

- [1] S. Aaronson: Guest Column: NP-Complete Problems and Physical Reality. SIGACT News, Vol.36, No.1 (2005), pp.30–52.
- [2] S. Arora and S. Kale: A Combinatorial, Primal-Dual Approach to Semidefinite Programs. Proceedings of the 39th Annual ACM symposium on Theory of computing (STOC '07), 2007, pp.227–236; Journal version in JACM, 2016.
- [3] B. Barak: Work with What You've Got. Nature Physics, Vol.17 (2021), pp.295–296.
- [4] B. Barak and K. Marwaha: Classical Algorithms and Quantum Limitations for Maximum Cut on High-Girth Graphs. arXiv:2106.05900, 2021.
- [5] B. Barak, A. Moitra, R. O'Donnell, P. Raghavendra, O. Regev, D. Steurer, L. Trevisan, A. Vijayaraghavan, D. Witmer, and J. Wright: Beating the Random Assignment on Constraint Satisfaction Problems of Bounded Degree. arXiv:1505.03424, 2015.
- [6] C. Bazgan and Z. Tuza: Combinatorial 5/6-approximation of Max Cut in Graphs of Maximum Degree 3. Journal of Discrete Algorithms, Vol.6, No.3 (2008), pp.510–519.
- [7] R. Bellman: Dynamic Programming Treatment of the Travelling Salesman Problem. Journal of the ACM, Vol.1 (1962), pp.61–63.
- [8] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang: Obstacles to Variational Quantum Optimization from Symmetry Protection. arXiv:1910.08980, 2019.
- [9] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang: Obstacles to Variational Quantum Optimization from Symmetry Protection. Physical Review Letters, 125:260505 (2020).
- [10] E. W. Dijkstra: A Note on Two Problems in Connexion with Graphs. Numerische Mathematik, vol.1 (1959), pp.269–271.
- [11] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann: A Quantum Approximate Optimization Algorithm. arXiv:1411.4028, 2014.
- [12] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann: A Quantum Approximate Optimization Algorithm Applied to a Bounded Occurrence Constraint Problem. arXiv:1412.6062, 2014.
- [13] M. H. Freedman and M. B. Hastings: Quantum Systems on Non- $k$ -Hyperfinites Complexes: A Generalization of Classical Statistical Mechanics on Expander Graphs. arXiv:1301.1363, 2013.
- [14] M. X. Goemans and D. P. Williamson: Improved Approximation Algorithms for Maximum Cut and Satisfiability Problems Using Semidefinite Programming. Journal of the ACM, Vol.42, No.6 (1995), pp.1115–1145.
- [15] E. Halperin, D. Livnat, and U. Zwick: MAX CUT in Cubic Graphs. Journal of Algorithms, Vol.53, No.2 (2004), pp.169–185.
- [16] Harrigan, M.P., Sung, K.J., Neeley, M. et al.<sup>\*4</sup>: Quantum Approximate Optimization of Non-Planar Graph Problems on a Planar Superconducting Processor. Nature Physics, Vol.17 (2021), pp.332–336.
- [17] J. Håstad: Some Optimal Inapproximability Results. Journal of the ACM, Vol.48, No.4 (2001), pp.798–859.
- [18] M. B. Hastings: Classical and Quantum Bounded Depth Approximation Algorithms. arXiv:1905.07047, 2019.
- [19] M. Held and R. Karp: A Dynamic Programming Approach to Sequencing Problems. Journal for the Society for Industrial and Applied Mathematics, Vol.1, No.10 (1962), pp.196–210.
- [20] J. Hirvonen, J. Rybicki, S. Schmid, and J. Suomela: Large Cuts with Local Algorithms on Triangle-Free Graphs. arXiv:1402.2543, 2014.
- [21] S. Kale and C. Seshadhri: Combinatorial Approximation Algorithms for MaxCut Using Random Walks. arXiv:1008.3938, 2010.
- [22] S. Khot, G. Kindler, E. Mossel, and R. O'Donnell: Optimal Inapproximability Results for MAX-CUT and Other 2-Variable CSPs? SIAM Journal on Computing, Vol.37, No.1 (2007), pp.319–357.
- [23] K. Marwaha: Local Classical MAX-CUT Algorithm Outperforms  $p = 2$  QAOA on High-Girth Regular Graphs. arXiv:2101.05513, 2021.
- [24] S. Poljak and F. Rendl: Nonpolyhedral Relaxations of Graph-Bisection Problems. SIAM Journal on Optimization, 1995, Vol.5, No.3 (1995), pp.467–487.
- [25] C. Ryan-Anderson: Quantum Algorithms, Architecture, and Error Correction. arXiv:1812.04735, 2018.
- [26] E. Sato: Improved Combinatorial Approximation Algorithms for MAX CUT in Sparse Graphs. In preparation.
- [27] A. Schrijver: On the History of Combinatorial Optimization (till 1960). Preprint, [homepages.cwi.nl/~lex/files/histco.pdf](http://homepages.cwi.nl/~lex/files/histco.pdf)
- [28] J. B. Shearer: A Note on Bipartite Subgraphs of Triangle-Free Graphs. Random Structures and Algorithms, Vol.3, No.2 (1992), pp.223–226.
- [29] L. Trevisan: Max Cut and the Smallest Eigenvalue. Proceedings of the 41st Annual ACM symposium on Theory of computing (STOC '09), 2009, pp.263–272.
- [30] Z. Wang, S. Hadfield, Z. Jiang, and E. G. Rieffel: Quantum Approximate Optimization Algorithm for MaxCut: A Fermionic View. Physical Review A, 97:022304 (2018).

<sup>\*4</sup> Matthew P. Harrigan, Kevin J. Sung, Matthew Neeley, Kevin J. Satzinger, Frank Arute, Kunal Arya, Juan Atalaya, Joseph C. Bardin, Rami Barends, Sergio Boixo,

Michael Broughton, Bob B. Buckley, David A. Buell, Brian Burkett, Nicholas Bushnell, Yu Chen, Zijun Chen, Ben Chiaro, Roberto Collins, William Courtney, Sean Demura, Andrew Dunsworth, Daniel Eppens, Austin Fowler, Brooks Foxen, Craig Gidney, Marissa Giustina, Rob Graff, Steve Habegger, Alan Ho, Sabrina Hong, Trent Huang, L. B. Ioffe, Sergei V. Isakov, Evan Jeffrey, Zhang Jiang, Cody Jones, Dvir Kafri, Kostyantyn Kechedzhi, Julian Kelly, Seon Kim, Paul V. Klimov, Alexander N. Korotkov, Fedor Kostritsa, David Landhuis, Pavel Laptev, Mike Lindmark, Martin Leib, Orion Martin, John M. Martinis, Jarrod R. McClean, Matt McEwen, Anthony Megrant, Xiao Mi, Masoud Mohseni, Wojciech Mruczkiewicz, Josh Mutus, Ofer Naaman, Charles Neill, Florian Neukart, Murphy Yuezhen Niu, Thomas E. O'Brien, Bryan O'Gorman, Eric Ostby, Andre Petukhov, Harald Putterman, Chris Quintana, Pedram Roushan, Nicholas C. Rubin, Daniel Sank, Andreea Skolik, Vadim Smelyanskiy, Doug Strain, Michael Streif, Marco Szalay, Amit Vainsencher, Theodore White, Z. Jamie Yao, Ping Yeh, Adam Zalcman, Leo Zhou, Hartmut Neven, Dave Bacon, Erik Lucero, Edward Farhi and Ryan Babbush