

組合せ最適化に向けた量子フィードバックアルゴリズムの改良

阿部 英宗¹ 大山 貴博¹ 斯波 廣大² 山口 晃一郎³

概要: 量子コンピュータにより、従来のコンピュータと比較して組合せ最適化問題をより効率よく解けることが期待される。量子コンピュータを用いた組合せ最適化の近似アルゴリズムの1つである FALQON は、古典計算によるパラメータ最適化が不要であるため、今後の量子コンピューティング技術の発達により、大規模な組合せ最適化問題を高速に解ける可能性がある。本報告では、はじめに既存の FALQON では求解が困難となるケースがあることを示す。次に、既存の FALQON を改善する方法として、再帰的に FALQON を実行して問題を解く RFALQON と、量子アニーリングの理論に基づき FALQON のフィードバック量の利得を制御する方法の2つを提案し、シミュレーションにより提案手法の有効性を示す。

キーワード: 組合せ最適化, 量子コンピューティング

Improved Quantum-feedback algorithm for Combinational Optimization

EIICHI ABE¹, TAKAHIRO OHYAMA¹, KODAI SHIBA², KOICHIRO
YAMAGUCHI³

Abstract: Quantum computers have possibility of solving combinational optimization problem more efficiently than conventional computers. FALQON (Feedback-based ALgorithm for Quantum OptimizationN), which is an approximation algorithm for combinational optimization problems on quantum computers, can solve the problems without parameter optimization by classical calculation. Therefore it gives possibility of realizing large-scale combinational optimization at high speed in the future with the evolution of quantum computing technology. In this paper, Firstly, we show the case makes it difficult to solve by conventional FALQON. Next, we propose two methods for improving conventional FALQON. One is RFALQON(Recursive FALQON), which makes use of FALQON recursively. The other is feedback gain control which is based on quantum annealing. Furthermore, the simulation results which clarify the effectiveness of the proposed method are shown.

Keywords: Combinational Optimization, Quantum Computing

1. はじめに

組合せ最適化問題に関して、効率的に解を求めるアルゴリズムの研究は、長年盛んに進められている[1]。例えば、巡回セールスマン問題は、物流・流通・製造など多くの現場に内在する課題だが、実世界の問題規模では、現実的な時間内では求解が困難な事例が多い。この解決策としては、厳密解法ではなく近似的な解を求めるヒューリスティックアルゴリズムの適用[2]や、近年では、強力な計算能力を持つ量子コンピュータの応用が注目されている。

量子コンピュータの利点は、量子ビットが0と1の状態を同時に持つ性質から、すべてのビット列の組合せを並列処理できることである。組合せ最適化問題では、膨大な解の中から最適解を探索する必要があり、量子コンピュータを用いた並列計算によって組合せ最適化問題を高速に解ける可能性が期待されている。

現在利用可能な汎用量子コンピュータは NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum device)と呼ばれる。NISQは量子ビットの搭載数が少なく、現時点で開発されているマシンの多くは数十ビット程度の規模である。そのため、大量の量子ビットを必要とする誤り訂正を行うことが出来ず、演算時間が長くなるような多くのゲート操作を行うと、ノイズの影響で期待する結果が得られない。そのため、ノイズの影響が小さくなるよう、量子コンピュータで実行する計算はゲート操作が少なく短時間で実行可能なものとし、残りの計算を古典計算(量子コンピュータではなく一般的なコンピュータによる計算)で行うような、量子・古典ハイブリッドアルゴリズムの開発が進められている。今後10年程度は NISQ が主流となることが予測されていることから、NISQ で動作するアルゴリズムを検討することは、実用という観点からみて重要である。

NISQ で組合せ最適化問題を解く近似アルゴリズムに

1 株式会社パナソニック システムネットワークス開発研究所

3 パナソニック株式会社 コネクティッドソリューションズ社

2 株式会社グリッド

QAOA(Quantum Approximate Optimization Algorithm)がある[3][4][5]. QAOA は量子・古典ハイブリッドアルゴリズムであり, 断熱量子計算をベースとしている. しかし, 深い量子回路で厳密な計算を行おうとすると, 前述のようにノイズの影響を受けてしまう. そこで, 少ないゲート操作により断熱操作の時間発展をシミュレートし, ここで用いるゲート回路に外部から調整可能なパラメータを追加する. このパラメータを古典コンピュータによって最適化することにより, 厳密な断熱量子計算に近い結果を得ようとする.

QAOA の問題点として, 古典コンピュータによる最適なパラメータの探索が困難であるということが挙げられる. これを改善するために, パラメータ探索の初期値を量子アニーリングによって決定する方法が提案されている[6]. また, QAOA を改良したアルゴリズムとして, より単純な回路による量子計算に帰着させる RQAOA(Recursive QAOA)[7][8]や, 観測によってパラメータを逐次決定する FALQON(Feedback-based Algorithm for Quantum Optimization)[9]が提案されている.

筆者らは, FALQON の動作検証を行い, 求解対象とする問題によってはパラメータの決定動作が期待通りに実行できず, 実行可能解が得られないことを確認した. そこで, この問題を解決するために, パラメータを決定するフィードバック量に対し, 量子アニーリングを参考とした利得制御を行う方法を提案する. 更に, RQAOA における Recursive 操作を FALQON に適用することで FALQON の求解性能を改善した RFALQON を提案する.

筆者らが提案する手法により, 古典コンピュータによるパラメータの探索処理が不要な FALQON の性能の向上が可能となり, 将来的に大規模な組合せ最適化を高速に実現する可能性を与える.

本報告の構成は以下の通りである. はじめに 2 章では既存アルゴリズムとして, QAOA, RQAOA, FALQON の説明をおこなう. 次に 3 章において, FALQON では求解が困難になるケースを取り上げる. 4 章では, FALQON の課題を解決するための改善手法について提案する. 5 章では, 計算機シミュレーションによって提案手法の有効性を明らかにする. 最後に 6 章で結論を述べる.

2. 既存手法

ここでは, 組合せ最適化を行う既存の NISQ アルゴリズムについて概要の説明を行う.

2.1 QAOA

QAOA は 2 値{0,1}をとる変数 z_i ($i = 1, \dots, N$)の式からなるコスト関数 $C(z_1, z_2, \dots, z_N)$ が最小となる変数の組み合わせを探索する. コスト関数に対応する量子系のハミルトニアン(ターゲットハミルトニアン) H_P は z_1, z_2, \dots, z_N の組に対応する状態ベクトル $|\psi(z_1, z_2, \dots, z_N)\rangle$ に対して次式を満たすので, コスト関数の最小化問題は, H_P を作用させた量子

系の最小エネルギーを与える状態ベクトルを求めることで解くことができる.

$$C(z_1, z_2, \dots, z_N) = \langle \psi(z_1, z_2, \dots, z_N) | H_P | \psi(z_1, z_2, \dots, z_N) \rangle \quad (1)$$

QAOA では量子ゆらぎ項として, (2)式のハミルトニアンを導入する.

$$H_M = \sum \sigma_x^i \quad (2)$$

ここで, σ_x^i は i 番目のビットに作用するパウリの X 行列を示す. これを用い, 全体のハミルトニアンが次式となる系の時間発展を計算する.

$$H(t) = \frac{t}{T} H_P + (1 - \frac{t}{T}) H_M \quad (3)$$

ここで, T は量子ゆらぎを与える横磁場を完全に切るまでの時間を示す定数である. この系の時間発展を p 段のパラメータ付き量子ゲートを接続した回路で計算することを考える. パラメータ付きゲート $U_M(\beta)$, $U_P(\gamma)$ を, 回路パラメータを β, γ として,

$$U_M(\beta) = \exp(-i\beta H_M) \quad (4)$$

$$U_P(\gamma) = \exp(-i\gamma H_P) \quad (5)$$

と定義すると, 時間発展した系の状態 $|\psi(\beta_1, \gamma_1, \dots, \beta_p, \gamma_p)\rangle$ は Trotter 分解を適用して, 近似的に次式で表される.

$$|\psi(\beta_1, \gamma_1, \dots, \beta_p, \gamma_p)\rangle = U_M(\beta_p) U_P(\gamma_p) \dots U_M(\beta_1) U_P(\gamma_1) |+\rangle \quad (6)$$

ここで, $|+\rangle$ は H_M の基底状態を表している.

QAOA では, ターゲットハミルトニアンのエネルギーが最小となる回路パラメータは古典計算で探索する必要がある. そのため, 回路の段数が増えるにつれてパラメータの探索に要する時間が長くなり, 計算の高速化が困難となる.

2.2 RQAOA

RQAOA は QAOA をベースとしつつ, 量子ビット間の相関を使ってエネルギー最小となる状態を再帰的に決定していく. 先ず, 最初に行った QAOA で得られた状態を $|\psi_1\rangle$ とする. σ_z^i を i 番目の量子ビットに作用するパウリの Z 行列として, ビット間の相関の期待値

$$M_{ij} = \langle \psi_1 | \sigma_z^i \sigma_z^j | \psi_1 \rangle \quad (7)$$

が最大になるスピン変数の組 z_i, z_j を取り出し, (8)式に従って一方の変数を消去する.

$$z_j = \text{sgn}(M_{ij}) z_i \quad (8)$$

ここで, $\text{sgn}(M_{ij})$ は M_{ij} の符号を表す.

変数の消去によって, コスト関数は 1 変数だけ少ないものに更新されるので, 再度 QAOA を実行して(7)式を観測し, (8)式で変数を消去する. 変数の数がしきい値を下回るまで反復したら, 残りの変数からなるコスト関数の最適化問題は古典アルゴリズムを使って解く.

RQAOA は, 対象とする問題の規模を徐々に小さくしていくことで求解を容易にし, より良い解が得られるようにする.

2.3 FALQON

FALQON は, 古典制御理論で用いられるリアプノフ関数

に基づいてフィードバック量を求め、エネルギーが最小となる回路パラメータを逐次決定するアルゴリズムである。そのため、QAOAにおける古典コンピュータによるパラメータの探索処理が不要となる。

FALQONの理論的な背景について説明する。FALQONの時間発展は、(9)式で表される。

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = (\mathbf{H}_P + \beta(t)\mathbf{H}_d) |\psi\rangle \quad (9)$$

\mathbf{H}_P はターゲットハミルトニアン、 \mathbf{H}_d は(2)式と同じ量子ゆらぎ項である。 $\beta(t)$ はフィードバック量を表す。FALQONでのリアプノフ関数 $V(t)$ は(10)式で定義される。

$$V(t) = \langle \psi(t) | \mathbf{H}_P | \psi(t) \rangle \quad (10)$$

ここで、 $\psi(t)$ は時刻 t での状態である。古典制御のリアプノフの安定定理によれば、 $V(t)$ の時間微分が(11)式

$$\frac{d}{dt} V(t) \leq 0 \quad (11)$$

を満たす場合、 $t \rightarrow \infty$ で状態 $\psi(t)$ が収束することが知られている。

$V(t)$ の時間微分は(9)、(10)式から[10]、

$$\frac{d}{dt} V(t) = A(t)\beta(t) \quad (12)$$

$$A(t) = \langle \psi(t) | i[\mathbf{H}_d, \mathbf{H}_P] | \psi(t) \rangle \quad (13)$$

と表される($[\mathbf{H}_d, \mathbf{H}_P] = \mathbf{H}_d\mathbf{H}_P - \mathbf{H}_P\mathbf{H}_d$ である)から、(11)を満たす最も単純な $\beta(t)$ は、

$$\beta(t) = -A(t) \quad (14)$$

で与えられる。

図 1に1段分のFALQONの回路ブロックを示す。この回路を作用させた後の状態 $|\psi_1\rangle$ は、初期状態を $|\psi_0\rangle$ とすると、時間ステップ Δt の時間発展ゲート $\mathbf{U}_P = \exp(-i\Delta t\mathbf{H}_P)$ 、 $\mathbf{U}_d(\beta) = \exp(-i\beta\Delta t\mathbf{H}_d)$ を用いて、

$$|\psi_1\rangle = \mathbf{U}_d(\beta_1)\mathbf{U}_P|\psi_0\rangle \quad (15)$$

となる。この状態での(13)式の観測値を A_1 とすると、次段のフィードバック量 β_2 は $\beta_2 = -A_1$ と求められる。FALQONアルゴリズムは、この過程を回路の段数分くり返してターゲットハミルトニアンの基底状態を与える β_1, β_2, \dots を順次決定する。パラメータ最適化後の回路ブロック図を図 2に示す。

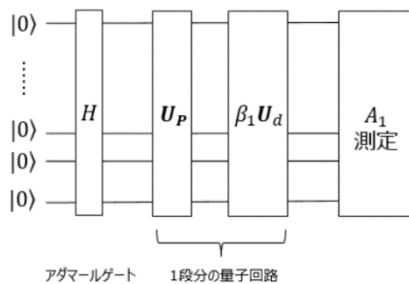


図 1 FALQON 回路ブロック

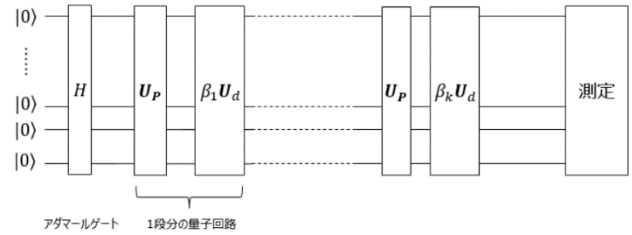


図 2 パラメータ最適化後の回路ブロック

3. FALQON の課題

FALQON を実際の問題に適用した場合、どのような課題があるのかを検証するため、シミュレーションを行った。本報告では、巡回セールスマン問題を例としてシミュレーションを行う。

3.1 問題の定式化

問題に対応するハミルトニアンを定式化する場合、まず問題を QUBO 式に変換する必要がある[11]。(16)式に QUBO 式の一般的な形を示す。

$$\mathbf{H}_P = \sum_{i,j} Q_{ij}x_i x_j + \sum_i Q_{ii}x_i \quad (16)$$

ここで、 x_i は2値{0,1}をとる変数であり、 Q_{ij} は解く問題に応じて決まる行列の成分である。(16)式を量子コンピュータで扱うことができるハミルトニアンに変換するには、 x_i を2値{1,-1}のスピนว変数 σ_i に変数変換してイジングモデルに変換する必要がある。スピนว変数へは(17)式に従って変換できる。

$$x_i = \frac{1 - \sigma_i}{2} \quad (17)$$

(18)式に巡回セールスマン問題の QUBO 式を示す。

$$\mathbf{H}_P = \sum_{i,j} d_{ij}x_i^\tau x_j^{\tau+1} + A \sum_i \left(\sum_\tau x_i^\tau - 1 \right)^2 + A \sum_i \left(\sum_i x_i^\tau - 1 \right)^2 \quad (18)$$

ここで、 d_{ij} は都市 i, j 間の距離、変数 x_i^τ は時刻 τ において都市 i を訪問している場合 $x_i^\tau = 1$ 、していない場合 $x_i^\tau = 0$ である。 A は制約条件に対する重み付けを変化させるためのハイパーパラメータである。(18)式の第1項は移動距離を表すコスト関数であり、第2項はある都市を1度だけ訪問する制約である。第3項は同時に複数の都市を訪問しないようにする制約である。

3.2 計算機シミュレーション

FALQON の動作を確認するため、計算機シミュレーションによってエネルギー期待値とフィードバック量の評価を行った。評価指標はエネルギー期待値とフィードバック量、および観測頻度が最大となる解とした。

シミュレーションで用いたパラメータを表 1 に示す。

FALQON の回路設定として、時間発展ゲートの段数を 50、時間ステップを 0.01、トロッター分解の分割数を 1 とした。(18)式におけるハイパーパラメータ A は、都市間の最大距離に都市数を乗じた値に設定した。これは、制約条件を違反した場合に、コストの増分が常に移動距離より大きくなるようにするためである。QUBO 行列の成分は正規化して $[-1, 1]$ の範囲になるようにした。シミュレータには Qiskit Aer を用いた。

巡回セールスマン問題の都市数は 4 とした。また、各都市は 1 辺の長さが 1 の正方形の頂点となるように配置した。

シミュレーションの結果を図 3, 図 4 に示す。図 3 は横軸に回路の段数、縦軸にその時点でのエネルギー期待値を図示している。また、図 4 では、縦軸をフィードバック量としている。これらの図から、系のエネルギーが単調減少すること、フィードバック量が収束していることがわかる。このことから、FALQON が期待通りの制御をしていることがわかる。

図 5 に、解の頻度分布の一例を示す。この図では、横軸に観測されたビット列の 10 進数表現、縦軸に出現確率をとり、出現確率が高い 10 個の解を表示させている。この図から、出現確率が最大の解はビットがすべて 0 となっていることがわかる。これはどの都市も訪問しない解であり、このことから実行可能解を求められていないことがわかる。

表 1 シミュレーション条件

FALQON 回路段数	50
トロッター分割数	1
時間ステップ	0.01
ハイパーパラメータ A	2 都市間の最大距離 × 都市数
シミュレータ	Qiskit Aer

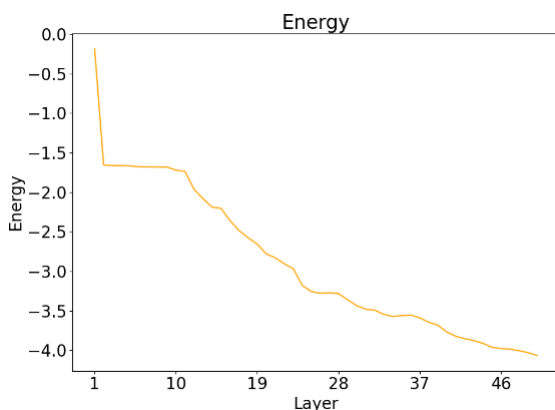


図 3 エネルギー期待値の結果

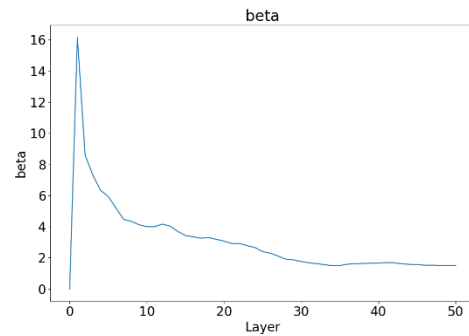


図 4 フィードバック量 β の結果

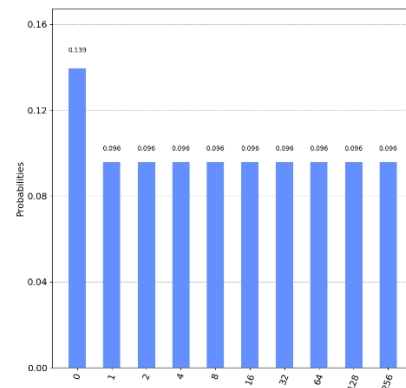


図 5 解のヒストグラム

4. 提案手法

4.1 利得制御

本報告では、上述した FALQON の課題に対する改良方法として、量子アニーリングに着想を得たフィードバック利得制御手法を提案する。はじめに背景となる量子アニーリングの収束条件について説明し、提案手法であるフィードバック利得制御について示す。

4.1.1 量子アニーリングの収束条件[12][13]

量子アニーリングでは、全体のハミルトニアン H はターゲットハミルトニアン H_P と量子ゆらぎ項 H_d の重みつき和

$$H = H_P + \Gamma(t)H_d \quad (19)$$

と表される。 $\Gamma(t)$ は制御変数であり、量子ゆらぎの強さを調整するために使われる。

(19) 式のハミルトニアンが与えられた場合、時間変化する状態がターゲットハミルトニアンの基底状態に収束する十分条件は、ある正数 t_0 が存在して、 $t > t_0$ で $\Gamma(t)$ が (20) 式として与えられることである。

$$\Gamma(t) = a(\delta t + c)^{-\frac{1}{2N-1}} \quad (20)$$

ここで、 N は量子ビット数、 a, c は定数、 δ は $\delta \ll 1$ を満たす微小量である。

4.1.2 フィードバック利得制御

(19) 式と (9) 式の右辺を比較すると、FALQON の $\beta(t)$ と量子アニーリングの $\Gamma(t)$ が対応していることが見てとれる。

ここから、 $\beta(t)$ が(20)式と同じように時間変化すれば、FALQONの結果もターゲットハミルトニアン基底状態に収束することが期待できる。

そこで、(11)の不等式を満たし、かつ $\beta(t)$ が(20)式のように時間変化させる方法として、 $\beta(t)$ の包絡線が(20)式に比例するように $\beta(t)$ に乗算する利得を制御すること(フィードバック利得制御または単に利得制御)を考える。

利得制御で用いる $\beta(t)$ は式(14)に利得を乗算した(21)式で表される。

$$\beta(t) = -A(t)\Gamma(t) \quad (21)$$

ここで、 $\Gamma(t)$ は(20)式で与えられる。

$\Gamma(t)$ の定数 a, c の決定方法について以下に示す。FALQONの回路の段数を L 、時間ステップを Δt として、 δ を固定すると、 a, c は $\Gamma(t)$ の $t = 0$ における値 G_0 と $t = L\Delta t$ における値 G_∞ から求められる。実際、

$$G_0 = a(\delta \times 0 + c)^{\left(-\frac{1}{2N-1}\right)} \quad (22)$$

$$G_\infty = a(\delta \times L\Delta t + c)^{\frac{1}{2N-1}} \quad (23)$$

から連立方程式を解けば、

$$a = G_\infty (\delta \times L\Delta t + c)^{\frac{1}{2N-1}} \quad (24)$$

$$c = \frac{\delta \times L\Delta t}{\left(\frac{G_0}{G_\infty}\right)^{(2N-1)} - 1} \quad (25)$$

となる。

4.2 RFALQON

4.1節のフィードバック利得制御手法の他にFALQONの求解性能を改善する手法として、RQAOAにおけるRecursive操作をFALQONに適用するRFALQONを提案する。

RQAOAはQAOAを再帰的に用いて量子ビット間の相関を計算し変数を徐々に消去することで、対象とする問題の規模を小さくし求解を容易にしている。この再帰的な変数消去操作はQAOAの計算とは独立しているため、FALQONを再帰的に用いて変数消去操作を行うことは可能である。また、RQAOAと同様に対象とする問題の規模を徐々に小さくできることから、求解性能の改善が期待できる。

4.2.1 RFALQONの計算方法

RQAOAと同様に、最初にFALQONを実行し得られた状態を $|\psi(t)\rangle$ とする。ここで、 $\psi(t)$ は時刻 t での状態である。 σ_z^i を i 番目の量子ビットに作用するパウリのZ行列として、ビット間の相関の期待値

$$M_{ij} = \langle \psi(t) | \sigma_z^i \sigma_z^j | \psi(t) \rangle \quad (26)$$

が最大になるスピン変数の組 z_i, z_j を取り出し、(8)式に従って一方の変数を消去する。これに伴い、1変数だけ少ないコスト関数が計算でき、再度FALQONを実行して(26)式を観測し、(8)式で変数を消去する。再度FALQONを実

行する際は、新たに初期状態 $|\psi_0\rangle$ から(9)式に従い時間発展を行う。変数の数がしきい値を下回るまで反復したら、残りの変数からなるコスト関数の最適化問題は、RQAOAと同様に古典アルゴリズムを使って解く。

5. 動作検証

提案手法の有効性を確認するため、計算機シミュレーションによる評価を実施した。

5.1 フィードバック利得制御の効果確認

ここでは、従来のFALQONでは求解が失敗していた4都市の巡回セールスマン問題が、利得制御の導入によって解けることを確認する。

フィードバック利得制御によって、期待通りにFALQONの改善が実現されることを確認するため、利得制御を導入した場合のフィードバック量と、エネルギー期待値の評価を行った。

シミュレーションで用いたパラメータを表2に示す。

FALQONの回路設定、都市の配置、距離は、3.2節と同様とした。利得制御のパラメータは、横磁場の初期値を 1.0×10^2 、最終値を 1.0×10^{-1} とした。微小量は 1.0×10^{-4} に設定した。シミュレータはQiskit Aerを使用した。

シミュレーションの結果を図6、図7に示す。図6は横軸に回路の段数、縦軸にその時点でのエネルギー期待値を示す。図7の縦軸は回路の段数に対するフィードバック量を示している。フィードバック利得制御を追加した場合においても、図3、図4と同様に、FALQONで期待される動作をしていることがわかる。図8に解のヒストグラムを示す。図8から、最も出現頻度の高いビット列が10進表現で4680, 6210, 8580, 9345, 16920, 18450, 33060, 33825の8つであることがわかる。この解の1つを2進表現に直して図示したものを図9に示す。この図から、この解が最短距離で全都市を周る解であることがわかる。また、残りの7つの解も訪問する都市の順序が異なるだけで、最適解となっている。

以上から、利得制御がFALQONの求解性能の改善に有効であることが確認できた。

表2 シミュレーション条件

FALQON 回路段数	50
トロッター分割数	1
時間ステップ	0.01
ハイパーパラメータA	2都市間の最大距離×都市数
横磁場の初期値 G_0	1.0×10^2
横磁場の最終値 G_∞	1.0×10^{-1}
微小量 δ	1.0×10^{-4}
シミュレータ	Qiskit Aer

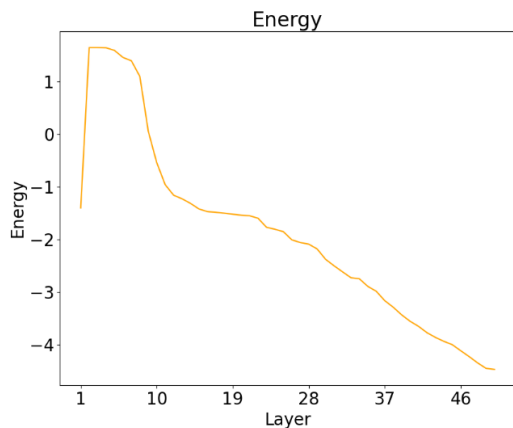


図 6 利得制御時のエネルギー期待値

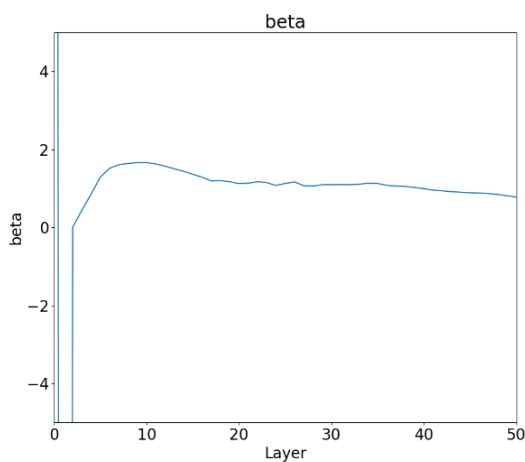


図 7 利得制御時のフィードバック量

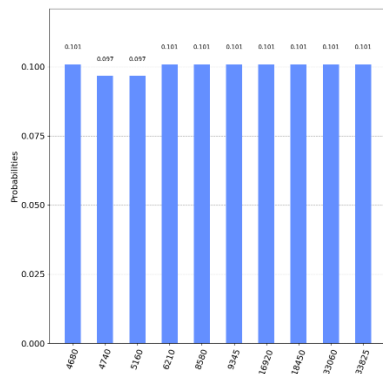


図 8 解のヒストグラム

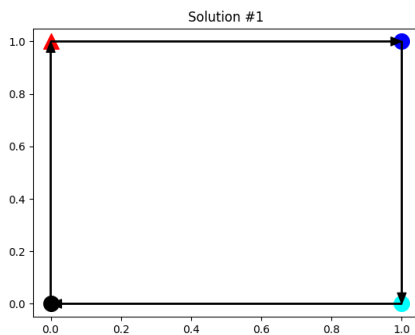


図 9 最大頻度の解

5.2 様々な問題に対する比較

ここでは、巡回セールスマン問題を含む様々な最適化問題に対する提案手法の有効性を検証し、問題の違いによる求解性能を比較する。

5.2.1 比較検証に用いるアルゴリズムと最適化問題

比較に用いるアルゴリズムは、提案手法であるフィードバック利得制御を導入した FALQON と RFALQON、さらに 2 つの提案手法を組み合わせたフィードバック利得制御を導入した RFALQON とした。また参考として、QAOA と RQAOA、通常の FALQON も合わせて比較した。

比較する最適化問題は、巡回セールスマン問題の他に次の 4 つの問題とした。

- 最大カット問題 (Maxcut problem)

最大カット問題は無向グラフのノードを 2 つのクラスタに分類するとき、クラスタ間にまたがるエッジの本数(またはエッジの重みの合計)を最大にする問題である。目的関数は次のように表せる。 w_{ij} はノード (i, j) 間を結ぶエッジにかかる重みである。

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{i < j} \frac{1}{2} w_{ij} (1 - z_i z_j) && (27) \\ & \text{subject to} && z_i \in \{-1, 1\} && \forall i \end{aligned}$$

- 数分割問題 (Number partition problem)

数分割問題は n 個の整数を 2 つの集合に分けるときに、各々の集合内の数の和がもう一方の集合内の数の和と等しくなるように分ける問題である。目的関数は次のように表せる。 n_i は i 番目の数字である。

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && \left(\sum_i n_i z_i \right)^2 && (28) \\ & \text{subject to} && z_i \in \{-1, 1\} && \forall i \end{aligned}$$

- グラフ分割問題 (Graph partition problem)

グラフ分割問題は、無向グラフ $G = (V, E)$ のノードを 2 つのクラスタに等分割するとき、クラスタ間にまたがるエッジの数を最小化する問題である。目的関数と制約条件は次のようになる。 n はノードの数である。

$$\begin{aligned} & \text{minimize} && \sum_{(i, j) \in E} x_i (1 - x_j) + (1 - x_i) x_j && (29) \\ & \text{subject to} && \sum_{i \in V} x_i = \frac{n}{2} \\ & && x_i \in \{0, 1\} && \forall i \in V \end{aligned}$$

- 最大クリーク問題 (Maximum state set problem)

最大クリーク問題は、最大安定集合問題とも呼ばれる問題である。無向グラフ $G = (V, E)$ において、エッジでつながっていないノードの集合を安定集合と呼ぶ。この問題は、安定集合を作るとき、この集合に含まれるノードの数を最大にする問題である。目的関数と制約条件は次のようになる。

$$\begin{aligned} & \text{maximize} && \sum_{i \in V} x_i && (30) \\ & \text{subject to} && x_i + x_j \leq 1 && \forall (i, j) \in E \\ & && x_i \in \{0, 1\} && \forall i \in V \end{aligned}$$

今回は、複数の最適化アルゴリズムで様々な問題を解いて近似比 α を求め、この値を評価指標として比較した。近似

比 α は(31)式で求められる。

$$\alpha = \frac{\langle H_p \rangle}{\langle H_p \rangle_{min}} \quad (31)$$

ここで $\langle H_p \rangle$ は、各アルゴリズムにより得られた、出現頻度が最大の量子状態におけるターゲットハミルトニアン H_p のエネルギーであり、 $\langle H_p \rangle_{min}$ は $\langle H_p \rangle$ の最小値である。今回は、 $\langle H_p \rangle_{min}$ は事前に古典アルゴリズムによって求めた。さらに、各問題で α を同等の条件で比較するため、各問題における QUBO 式の係数の値を正規化してシミュレーションを行なった。

また、今回の比較検証についても、各問題各アルゴリズムでの評価は 5.1 節と同様に 10 回実施し、近似比 α の平均を最終的な評価指標とした。FALQON とフィードバック利得制御を導入した FALQON については、フィードバック量の平均値も求め評価指標とした。

シミュレーションで用いたパラメータを表 3 に示す。

FALQON, RFALQON, フィードバック利得制御を導入した FALQON, フィードバック利得制御を導入した RFALQON の 4 種での回路設定は、時間発展ゲートの段数を 50 とした。利得制御のパラメータは 5.1 節と同じく、横磁場の初期値を 1.0×10^2 、最終値を 1.0×10^{-1} とした。微小量は 1.0×10^{-4} に設定した。シミュレータは ReNomQ を使用した。

5.2.2 比較検証結果

シミュレーションの結果を図 9, 図 10 に示す。これらの図における巡回セールスマン問題 (TSP : Traveling Salesman Problem) の結果は 3 都市の場合のものであり、その他の最適化問題は、変数の数が 6 個 (使用する量子ビット数が 6) の場合の結果である。

図 9 は 5 種類の最適化問題に対して、6 種類の最適化アルゴリズムを用いた場合の近似比 α の平均値をヒストグラムで示したグラフである。10 回評価時の分散をそれぞれ黒線のエラーバーで示している。また、青色は QAOA, 赤色は RQAOA, 緑色は FALQON, 橙色は RFALQON, 水色はフィードバック利得制御を導入した FALQON, 紫色はフィードバック利得制御を導入した RFALQON の結果をそれぞれ示している。近似比が 1 に近付くほど、最適解に近い結果が得られたことになる。比較結果より、巡回セールスマン問題と最大クリーク問題において、提案手法である Recursive 操作の FALQON への適用、およびフィードバック利得制御により、近似比が改善していることが分かる。

図 10 は図 9 における FALQON と、フィードバック利得制御を導入した FALQON でのフィードバック量を示している。青色の結果は巡回セールスマン問題での結果であり、赤色は最大カット問題, 緑色は数分割問題, 橙色はグラフ分割問題, 水色は最大クリーク問題の結果である。また、実線は通常の FALQON における結果であり、破線はフィードバック利得制御を導入した FALQON における結果である。さらに、全ての結果は 10 回の評価の平均値を示し

ており、色のついた範囲は標準偏差の幅を表している。図 10 より、全ての結果において、フィードバック量 β が収束している様子が確認できる。但し、フィードバック利得制御を導入した場合、導入前と比較して、全ての問題において収束時の値および標準偏差が小さくなっている。

以上の結果から、特定の問題に対しては、提案手法である Recursive 操作の FALQON への適用と、フィードバック利得制御が、求解性能の改善に有効であることがわかった。

表 3 シミュレーション条件

FALQON 回路段数	50
Trotter 分割数	1
時間ステップ	0.01
ハイパーパラメータ A	巡回セールスマン問題 : 2 都市間の最大距離 × 都市数 グラフ分割問題, 最大クリーク問題 : 5
横磁場の初期値 G_0	1.0×10^2
横磁場の最終値 G_∞	1.0×10^{-1}
微小量 δ	1.0×10^{-4}
サンプリング回数	4096
シミュレータ	ReNomQ

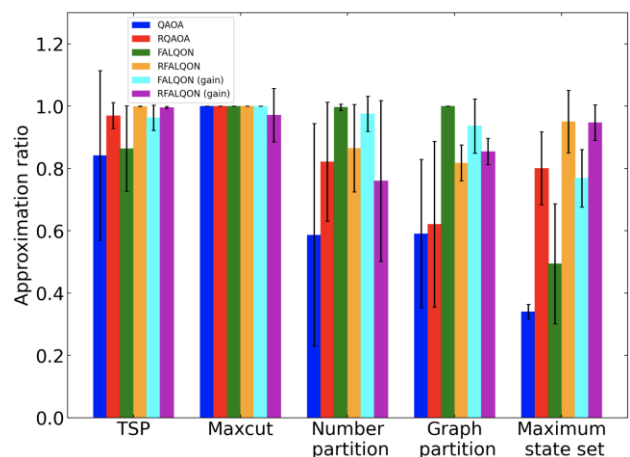


図 9 様々な問題における各アルゴリズムの近似比

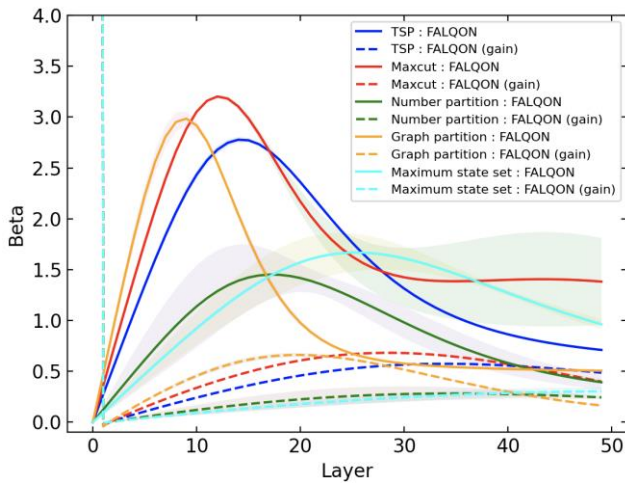


図 10 様々な問題における FALQON と利得制御時の FALQON のフィードバック量

5.3 考察

前述の通り、筆者らが提案する Recursive 操作を FALQON へ適用した RFALQON と、フィードバック利得制御は、巡回セールスマン問題および最大クリーク問題に対しては有効であるが、その他の問題に対しては効果が確認できなかった。これらの問題を比較してみると、巡回セールスマン問題と最大クリーク問題は、他の問題に比べて、より複雑な制約条件を含んでいることが分かる。即ち、量子状態に対するエネルギーカーブが複数の谷を持つ。式(11)から、FALQON はエネルギーが小さくなる状態へ進むようにフィードバック量を決定していくが、エネルギーの谷が複数あるような複雑な問題に対してはフィードバック制御が上手く実施できず、提案手法はこれを改善する一助になったと考える。

現実世界で解くべき問題は様々な制約条件を含むため、提案手法はこのような問題に対して効果を発揮できる可能性がある。

6. むすび

本報告では、組合せ最適化問題を解く FALQON アルゴリズムの改良について検討を行い、求解性能の改善を実現するための方法として、再帰的に FALQON を実行する RFALQON と、フィードバック量に対する利得制御の2つを提案し、シミュレーションでその有効性を確認した。具体的には、複雑な制約条件を含む組合せ最適化問題に対し、従来手法である QAOA, RQAOA, FALQON と比較して、提案手法がより良い結果を与えることを明らかにした。

筆者らが所属するパナソニックでは、現場プロセスイノベーションをターゲットとした実ビジネスに対して本技術の適用検討を進めているが、実世界で対象となる問題には様々な制約条件を含むため、提案手法による性能の改善が期待できる。

また、筆者らが提案する手法は、今後の NISQ の発展に伴い、大規模かつ複雑な組合せ最適化問題を高速に解く可能性を与える。

今後は、提案手法が有効となる問題の種類や規模について、更なる検討を進める予定である。

参考文献

- [1] P. Festa, "A brief introduction to exact, approximation, and heuristic algorithms for solving hard combinatorial optimization problems," 2014 16th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON), 2014, pp. 1-20.
- [2] 柳浦睦憲, 茨木俊秀, "組合せ最適化問題に対するメタ戦略について," 信学論 (D-I), vol.J83-D-I, no.1, pp.3-25, Jan. 2000.
- [3] E. Farhi, J. Goldstone and S. Gutmann. "A quantum approximate optimization algorithm," arXiv preprint arXiv:1411.4028, 2014.
- [4] Zhou, Leo, et al. "Quantum approximate optimization algorithm: Performance, mechanism, and implementation on near-term devices," Physical Review X 10.2 (2020): 021067.
- [5] J. Choi and J. Kim, "A Tutorial on Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA): Fundamentals and Applications," 2019 International Conference on Information and Communication Technology Convergence (ICTC), 2019, pp. 138-142.
- [6] Stefan H. Sack and Maksym Serbyn, "Quantum annealing initialization of the quantum approximate optimization algorithm," Quantum 5, 491. 2021.
- [7] S. Bravyi, et al., "Obstacles to State Preparation and Variational Optimization from Symmetry Protection," arXiv:arXiv:1910.08980, 2019.
- [8] S. Bravyi, et al., "Hybrid quantum-classical algorithms for approximate graph coloring," arXiv:2011.13420, 2020.
- [9] A. B. Magann, K. M. Rudinger, M. D. Grace, and M. Sarovar, "Feedback-based quantum optimization," arXiv preprint arXiv:2103.08619, 2021.
- [10] S. Grivopoulos and B. Bamieh, "Lyapunov-based control of quantum systems," 42nd IEEE International Conference on Decision and Control (IEEE Cat. No.03CH37475), 2003, pp. 434-438 Vol.1.
- [11] A. Lucas, "Ising formulations of many np problems," Frontiers in physics, vol. 2, p. 5, 2014.
- [12] 西森秀稔, "<講義ノート>量子アニーリングの数理," 物性研究・電子版, vol.3, no.4, pp.1-24, Aug 2014.
- [13] T. Kadowaki and H. Nishimori, "Quantum annealing in the transverse ising model," Phys. Rev.E, vol.58, no.5, pp.5355, 1998.