Quantum algorithms:
Variational quantum algorithms

2025/07/28

Shunta Kikuchi

菊地 駿太

職種：IT Specialist (IBMC)

プロフィール（略歴）

経歴：

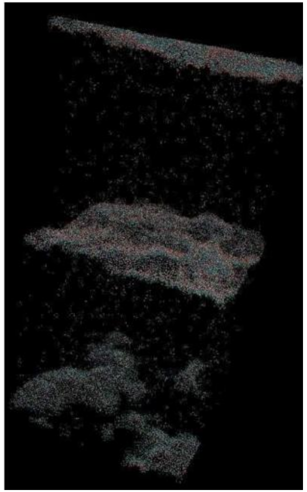
- ～2024年　修士号取得 (分野：応用物理・ソフトマター)
- 2024年～　博士課程 (社会人ドクター、分野変わらず)
- 2024年～　日本アイ・ビー・エム入社(コンサルタント部門)

研究内容：

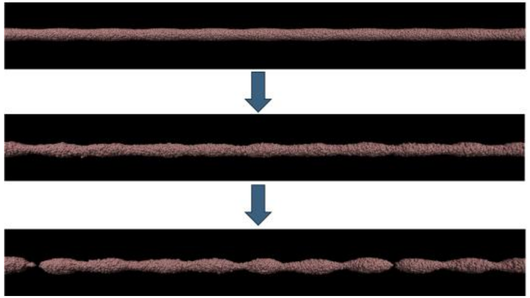
・スパコンを用いた分子動力学シミュレーション

・膜や流体現象をモデル化して計算

・ミクロ領域における、熱揺らぎの影響を調査



膜揺らぎの研究
(J. Chem. Phys., **158** 12 (2023))



界面の不安定性の研究
(arXiv:2507.13786 (2025))

今回のトピック

- 期待値とは？
- 変分原理とは？
- 変分量子アルゴリズム(VQA)について
- 量子近似最適化アルゴリズム(QAOA)について
- 最適化問題とは？
- QAOAでMax-cut問題を解く

期待値とは？

確率統計における確率P

$$1 = \sum_i P_i$$

確率統計における期待値E(例：さいころ)

$$E(x_i) = \sum_i x_i P(X = x_i)$$

規格化された状態ベクトル$|\psi\rangle$

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle$$

量子力学における物理量A(行列も取りうる)の期待値$\langle A\rangle$

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \neq A\langle\psi|\psi\rangle$$

期待値の例

量子力学における物理量Aの期待値$\langle A\rangle$

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle.$$

例1：ハミルトニアンHが$H\,|\psi_0\rangle = \varepsilon_0|\psi_0\rangle$を満たすとき、$\varepsilon_0$はスカラーなので

$$\langle H\rangle = \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\varepsilon_0|\psi_0\rangle = \varepsilon_0\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \varepsilon_0.$$

※行列形式で考えると、固有値を求める操作に対応。

例2： $|\psi\rangle = \begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}$における、演算子$Z = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$の期待値は、$\alpha, \beta$が複素数なので

$$\langle Z\rangle = \langle\psi|Z|\psi\rangle = \begin{bmatrix}\alpha^* & \beta^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = |\alpha|^2 - |\beta|^2.$$

※ $|0\rangle$だと1になり、 $|1\rangle$だと-1になる。

変分原理とは？

ハミルトニアンHの真の基底状態におけるエネルギー固有値がε_0、対応する状態ベクトルが$|\psi_0\rangle$

$$E[\psi_0] = \langle\psi_0|H\,|\psi_0\rangle = \varepsilon_0,$$

とエネルギー期待値$E[\psi_0]$が書けるとき、試行関数$|\psi\rangle$における$E[\psi]$は

$$E[\psi] = \langle\psi|H\,|\psi\rangle = \varepsilon \geq \varepsilon_0$$

となる。これを変分原理と呼ぶ(証明略)。

・ハミルトニアンHに対するε_0を求めることは一般に難しい。

※ n量子系では、ハミルトニアンHは$2^n \times 2^n$の行列であり計算量が大きくなる

→変分原理を用いてより低いεを探索することで、固有値の近似値を求めることが出来る。

変分定理を活用したアルゴリズム(VQA)

$$E[\psi] = \langle\psi| H |\psi\rangle = \varepsilon \geq \varepsilon_0$$

・変分原理を用いて量子変分アルゴリズム(VQA)が開発されている

例：量子変分固有値ソルバー(VQE)

→εを出来るだけ小さくするために、変分原理を活用するソルバー

→物性物理や応用化学で応用される

※chapter2. では、scipyのminimizeを使用して実装

量子近似最適化アルゴリズム(QAOA)

→コスト関数の近似解を求めるために、変分原理を活用するアルゴリズム

→最適化問題で応用される

→本スライドでは、QAOAを詳しく説明

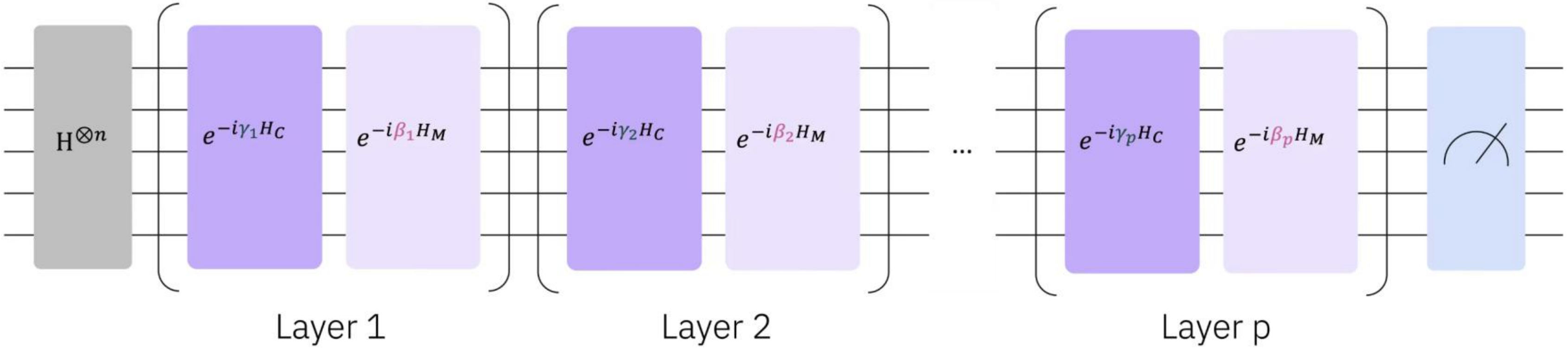
QAOAとは？

・最適化問題に対する近似値を得ることを目標に、変分原理を活用するアルゴリズム

・初期状態を既知な行列(例えば$\mathrm{H}^{\otimes n}|0\rangle$)とユニタリー行列$U(\theta)$を用いて設定

$$|\psi(\theta)\rangle \equiv U(\theta)\mathrm{H}^{\otimes n}|0\rangle$$

→ $U(\theta)$を最適化することで、筋の良い$|\psi\rangle$を求める。(下図はp組のβとγで$U(\theta)$を最適化)



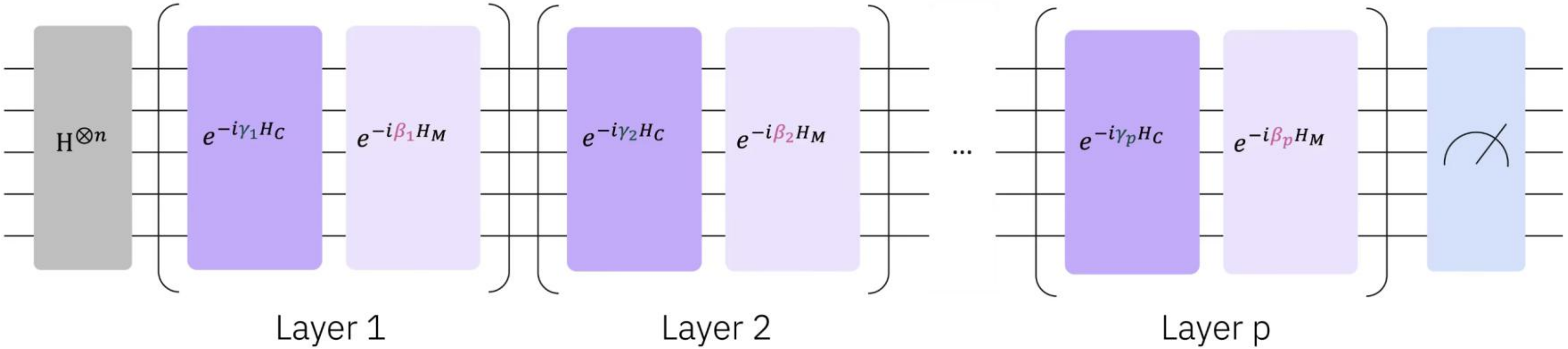
※ H_Cは解きたい問題を、H_Mは初期状態を表すハミルトニアン(量子断熱計算を基に設計)

※QiskitではQAOAAnsatzで実行可能(H_C, H_Mも作成してくれる)

QAOAの特徴

- $2^n \times 2^n$の行列となるハミルトニアンHに対し、$2p$個のパラメータを最適化することで固有値εを最小化する

- 「量子回路を実行→コスト関数を計算しパラメータ(下図の場合はβ, γ)を更新」を繰り返す
→量子アルゴリズムと古典アルゴリズムのハイブリッド計算



最適化問題とは？

・以下の3つの要素で構成される問題

　・決定変数(離散or整数)

　・目的関数(最小化or最大化する関数)

　・拘束条件(なしor不等式or等式)

・解の候補が膨大にあり(組み合わせ爆発)、厳密解・近似解を求めることが難しい

・ヒューリスティックな(発見的な)アルゴリズムを使用して筋の良い解が求められている

→今回は、QAOAで最適化問題を解いてみる

QAOAの最適化問題への適用

・以下の手続きで最適化問題を解く

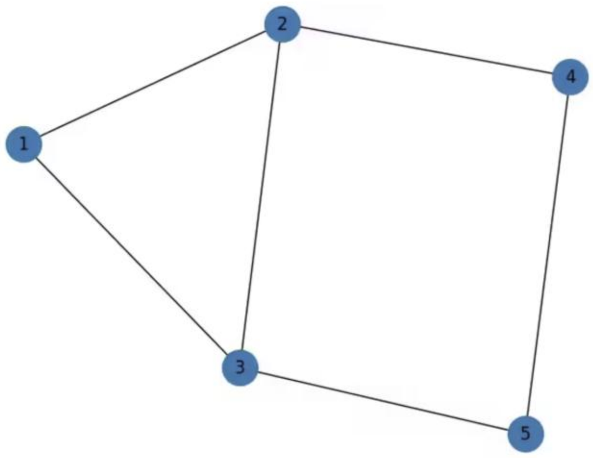
  ・問題をQUBO形式へ定式化

  ・定式化した問題をハミルトニアンへ変換

  ・QAOAを使ってハミルトニアンに対する固有値を最適化

  ・最適化された固有値が、問題に対する筋の良い解を与える(はずである)

・今回はMax-Cut問題を解く



Max-Cut問題とは？

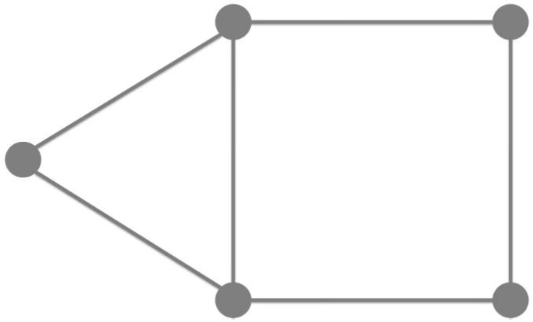
・グラフに対して、ノードを2分割する際に、エッジそれぞれの重みの和を最大化する方法を

探索する問題

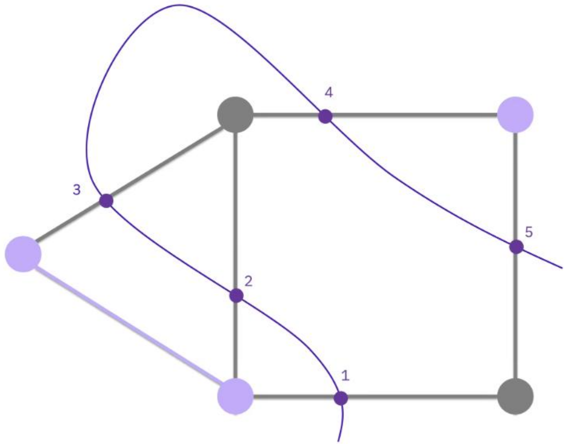
→基本的には厳密解を求めることが難しい(NP-hard)

※画像処理やクラスタリング等に応用

・今回は各重みが1(辺の数が最大になる問題)として問題を解く



– 今回取り扱うグラフ



– 2分割した例(この場合は5か所)

Max-Cut問題の定式化

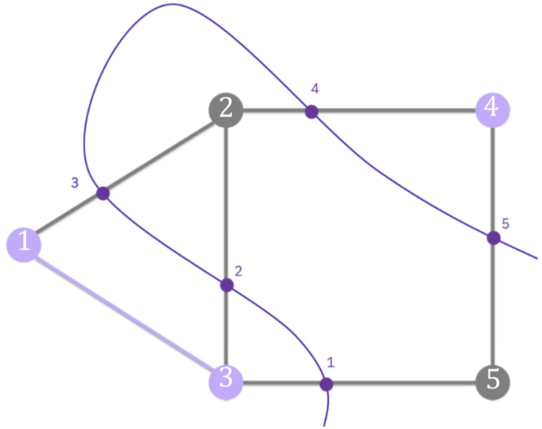
・各ノードは最終的に二分されるので、それぞれのノードに1 or 0を割り振る

$\rightarrow x_i \in \{0,1\}, i \in \{1,2,3,4,5\}$

・エッジでつながっているノード間で値が異なる場合、そこで分割が行われているため、それを1として数え上げる。

→最大化する目的関数：$\sum_{(i,j)}[x_i(1-x_j)+x_j(1-x_i)]$,

$(i,j) \in [(1,2),(1,3),(2,3),(2,4),(3,5),(4,5)]$



※ $(x_i,x_j)=(0,1),(1,0)$のとき1、$(x_i,x_j)=(0,0),(1,1)$のとき0

※QUBO形式とする必要がある(2次まで、制約条件なし、変数が二値)

QUBO：Quadratic Unconstrained Binary Optimization

ハミルトニアンへ変換

目的関数：$\sum_{(i,j)}\left[x_i\left(1-x_j\right)+x_j(1-x_i)\right]$ where $(i,j) \in [(1,2),(1,3),(2,3),(2,4),(3,5),(4,5)]$.

変数：$x_i \in \{0,1\}, i \in \{1,2,3,4,5\}$.

・変数x_iを変数z_iに変換した後、パウリの演算子Zへ変換する。

$$x_i = \frac{1-z_i}{2} \text{ where } z_i \in \{-1,1\}, z_i \to Z_i (= I \otimes \cdots Z \cdots \otimes I)$$

※ $\mathrm{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$の固有値は$\langle 0|Z|0\rangle = 1, \langle 1|Z|1\rangle = -1$,であるため。$i$番目のqubitに変換

・加えて、変分原理の性質上、-1をかけて最小化問題へ

目的関数,変数：$\sum_{(i,j)}\left[-\frac{1}{2}(1-z_i z_j)\right], z_i \in \{-1,1\}$

ハミルトニアンH：$\sum_{(i,j)}\frac{1}{2}Z_i Z_j - \sum_{(i,j)}\frac{1}{2}I^{\otimes n}$ where $Z_i = I^{n-i-1} \otimes Z \otimes I^{\otimes i-1}$

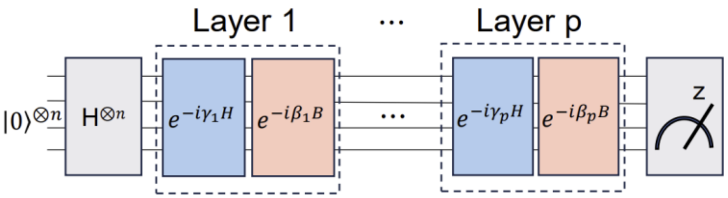
QAOAを使って解を得る

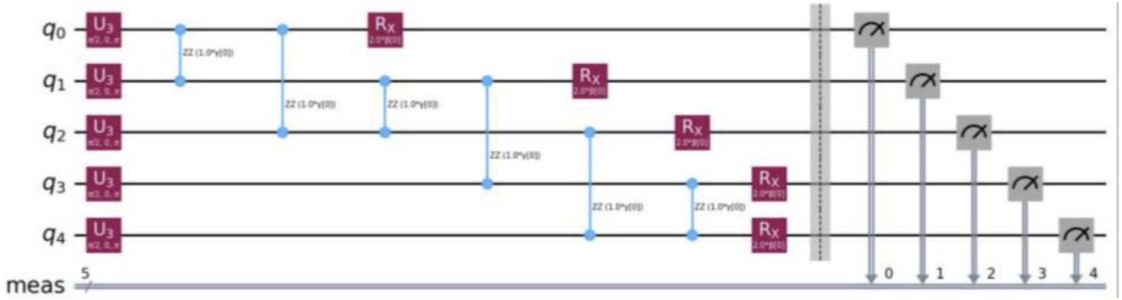
ハミルトニアンH： $\sum_{(i,j)} \frac{1}{2} Z_i Z_j$ where $(i,j) \in [(1,2),(1,3),(2,3),(2,4),(3,5),(4,5)]$

※定数項$-\sum_{(i,j)} \frac{1}{2} I^{\otimes n}$は省略

$$H = \frac{1}{2}(Z_1Z_2 + Z_1Z_3 + Z_2Z_3 + Z_2Z_4 + Z_3Z_5 + Z_4Z_5)$$

・QAOAを使用して、 2p個のβとγでコスト関数を最適化(回路は$\mathrm{p} = 1$の場合)

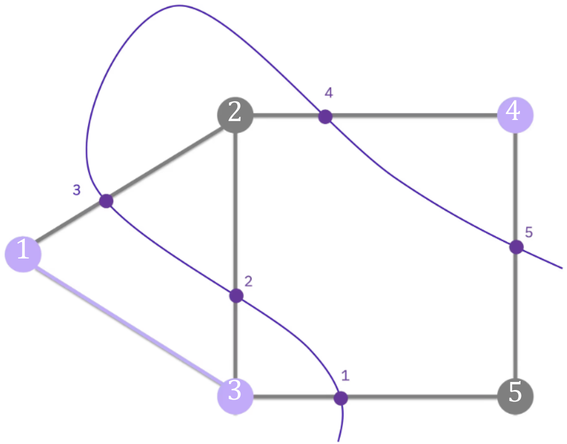




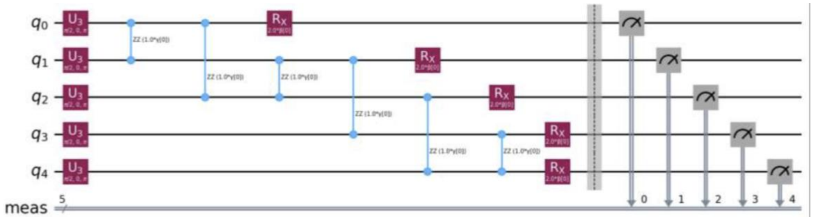
実機による計算結果

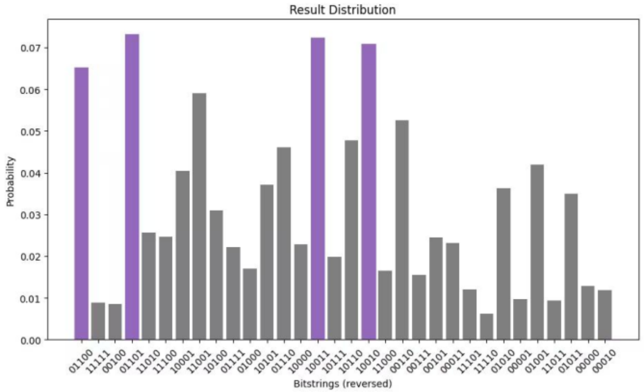
$$H=\frac{1}{2}(Z_1Z_2+Z_1Z_3+Z_2Z_3+Z_2Z_4+Z_3Z_5+Z_4Z_5)$$

※最小の固有値： -5,対応する$|\psi\rangle=|00110\rangle,|11001\rangle,|10110\rangle,|01001\rangle$



$|\psi\rangle=|10110\rangle,|01001\rangle$の場合





→最小固有値に対応する$|\psi\rangle$の確率が高い

まとめ

・$\langle\psi|A|\psi\rangle$で物理量$A$の期待値が計算できる

→行列形式の量子力学で考えると、固有値を求める操作に対応

・試行関数を用いて計算された固有値は真の固有値よりも大きい(変分定理)

→これを用いてVQAが開発され(例：QAOA)、最適化問題へ応用

・最適化問題は、解の候補が膨大であり解くことが難しい

→今回はQAOAでMax-Cut問題の近似解を求めた

・問題に対して定式化→ハミルトニアンへ変換することで、量子回路上に乗せることが可能

最後に：もっと勉強したい方へ

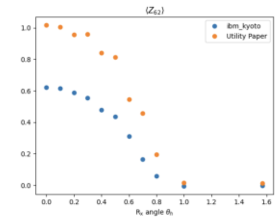
IBM Quantum Learning
「Utility-scale quantum computing」の日本語解説

元のコース：https://quantum.cloud.ibm.com/learning/en/courses/utility-scale-quantum-computing

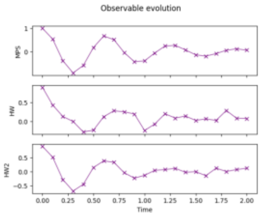
1. はじめに (飛ばします)
2. 量子ビット・量子ゲート・量子回路 (7/7(月))
3. 量子テレポーテーション (7/16(水))
4. グローバーのアルゴリズム (7/16(水))
5. 量子位相推定 (7/28(月))
6. 量子変分アルゴリズム (7/28(月))
7. 量子系のシミュレーション
8. 古典計算によるシミュレーション
9. 量子ハードウェア
10. 量子回路の最適化
11. 量子エラー緩和
12. 量子ユーティリティーの実験 I
13. 量子ユーティリティーの実験 II
14. 量子ユーティリティーの実験 III

Jupyter notebookの和訳：
https://quantum-tokyo.github.io/introduction/courses/utility-scale-quantum-computing/overview-ja.html

I. Nature paper (127 qubits x 60 entangling gates)



II. 1D Transverse Ising model (70 qubits x 80 entangling gates)



III. The largest GHZ state challenge