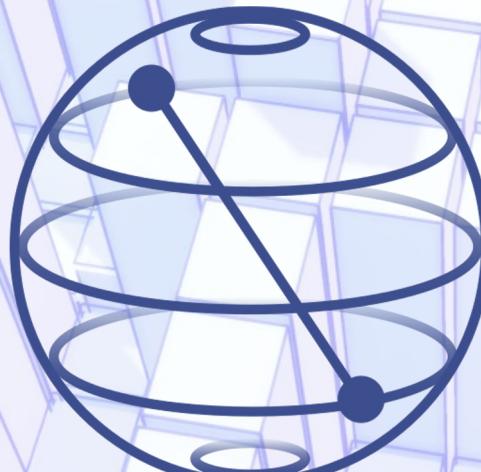


Quantum Tokyo 特別講演シリーズ

2023/2/21



巡回セールスマン問題を
量子コンピューターで
解いてみよう！

Qt

松尾 悅士
日本アイ・ビー・エム株式会社 東京基礎研究所

松尾 悅士

Researcher, IBM Quantum

Qiskit

- Qiskit アプリケーションモジュールの開発
特にQiskit Optimization、Qiskit Machine Learning

Research

- 量子回路の最適化
- 変分量子アルゴリズム

Community

- IBM Quantum Challenge
- 初心者向けのチュートリアル等



ピュアピュア俱楽部という同人サークルで活動もしてます
リョウコちゃんが登場する「量子ガール2」を執筆中！

目次

- 1** 量子ビット・量子ゲート・量子回路
- 2** 変分量子アルゴリズム
Variational Quantum Algorithm (VQA)
- 3** 巡回セールスマン問題
- 4** 問題に特化したPQC (Problem-specific PQC)

目次

1

量子ビット・量子ゲート・量子回路

2

変分量子アルゴリズム
Variational Quantum Algorithm (VQA)

3

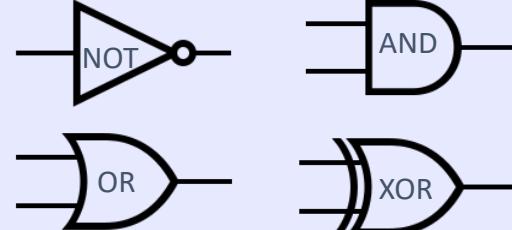
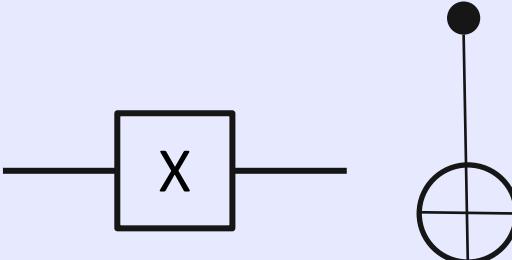
巡回セールスマン問題

4

問題に特化したPQC (Problem-specific PQC)

古典ビット/ゲートと量子ビット/ゲートまとめ

IBM Quantum

	Classical	Quantum
Bit	Scalar Either 0 or 1	Vector $ 0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $ 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ n qubit = a vector of length 2^n
Gate	Boolean function NOT, AND, OR, XOR etc. 	Unitary Matrix X, Z, H, CNOT etc. 

量子回路: 量子計算を表現するモデル

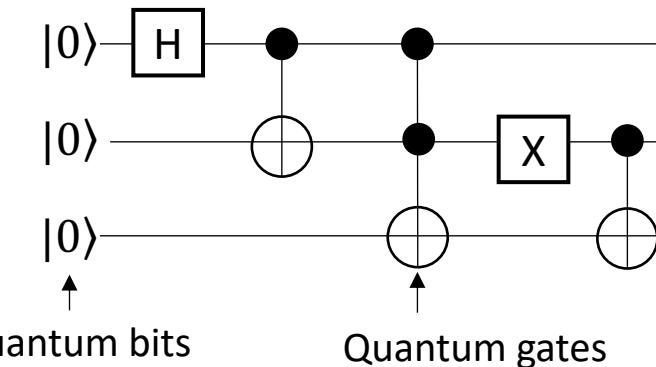
- 量子ビット（各横線）と量子ゲート（各図形）を含む
- 量子ビットに適用される一連の演算をグラフィカルに表現
- 時間は左から右へ流れる

対応するハードウェアが物理的に存在するわけではない

- 量子ゲートは物理的なシステムに対する操作を表す
- プログラムのようなもの
- 量子回路=量子アルゴリズム

Example of a quantum circuit

Maps $|000\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|011\rangle + |101\rangle)$

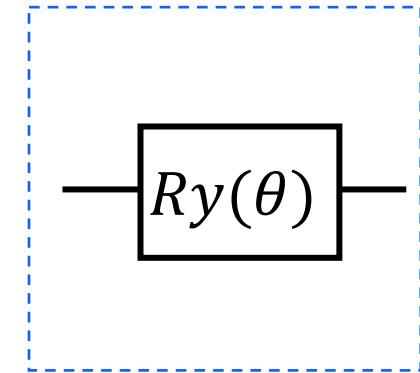


パラメータ付きゲートの例: Ry Gate

IBM Quantum

Ryゲートの行列表現: $Ry(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$

- Ryゲートは内部にパラメータ θ を持つ。



パラメータ θ を調整することで、異なる確率振幅を持つ重ね合わせ状態を作ることができる

- 例 : $Ry\left(\frac{\pi}{3}\right)|0\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle$

パラメータ付きゲートには、Ry以外にもRx、Rz、Rzzなどの種類があり、

パラメータ付きゲートは変分量子アルゴリズムにおいて重要な役割を担っている

目次

1

量子ビット・量子ゲート・量子回路

2

変分量子アルゴリズム

Variational Quantum Algorithm (VQA)

3

巡回セールスマン問題

4

問題に特化したPQC (Problem-specific PQC)

変分量子アルゴリズム (1/3)

IBM Quantum

ハミルトニアンの最小の固有値を求めるために利用される

- 例： 入力：ハミルトニアン H 、出力：最小固有値 λ_{min}

ハミルトニアンは重み付けされたパウリ項の和として表すことができる

- Pauli項はPauli行列I, X, Yのテンソル積。例： $H = 0.8 * (X \otimes Y \otimes Z) + 0.5 * (Z \otimes Y \otimes Z)$

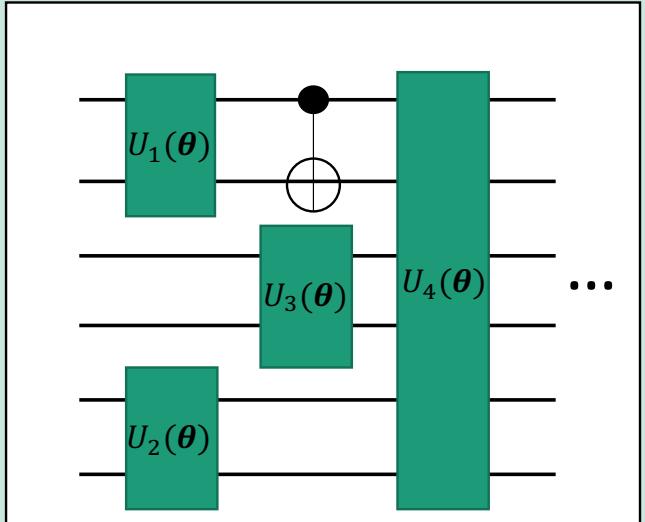
量子コンピュータと古典コンピュータの両方を用いて変分法により解を求める

- 変分原理に基づく： $\lambda_{min} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle$
- 期待値 $\langle \psi | H | \psi \rangle$ は与えられたハミルトニアン H と量子状態 $|\psi\rangle$ から計算可能
- $\langle \psi | H | \psi \rangle$ を最小化する $|\psi\rangle$ を求める

量子の部分

- **パラメーター付き量子回路** (Parametrized Quantum Circuit, **PQC**) を用いて量子状態 $|\psi(\theta)\rangle \equiv U(\theta)|\psi_0\rangle$ を作る（アンザツとよく呼ばれる）
- $|\psi(\theta)\rangle$ とハミルトニアン H を用いた観測結果から期待値 $\langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$ を求める

Prepare an ansatz $|\psi(\theta)\rangle$ by a PQC



古典の部分

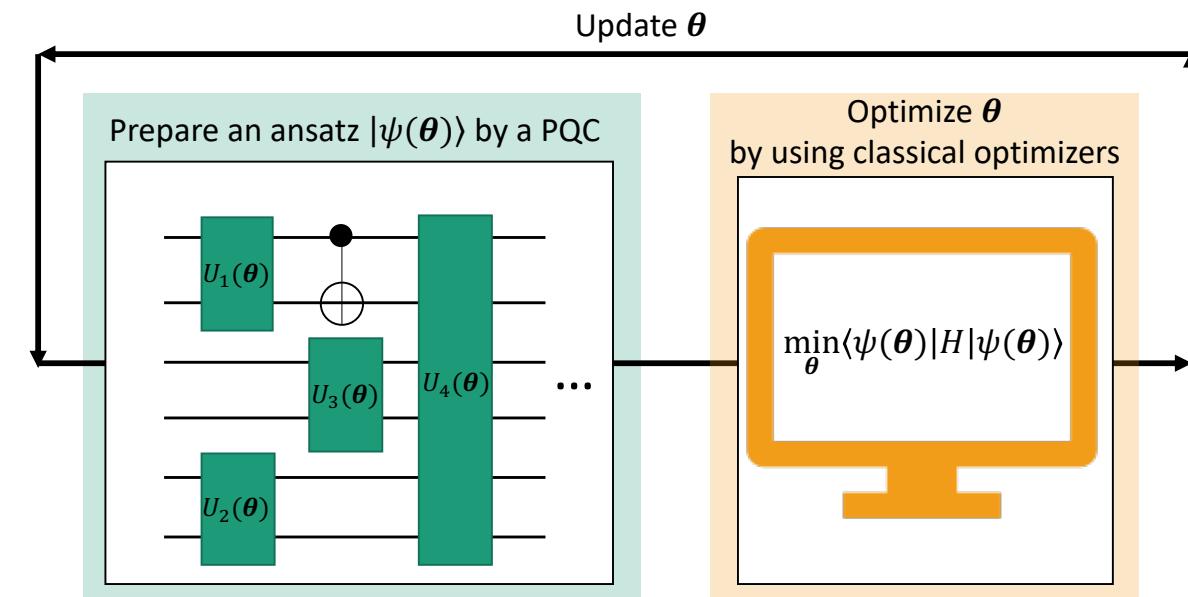
- **古典の最適化手法** (例、Nelder-Mead法) により θ を更新し、より小さい $\langle\psi|H|\psi\rangle$ を探す

変分量子アルゴリズム (3/3)

IBM Quantum

変分量子アルゴリズムのまとめ

- **量子コンピュータと古典コンピュータの両方を繰り返し用いる**
- **量子部分**：パラメーター付き回路を用いてアンサツ $\psi(\theta)$ を準備し、期待値 $\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ を求める
- **古典部分**：より小さい期待値を求めるため古典の最適化手法を用いて θ を更新する



変分量子固有値ソルバー

IBM Quantum

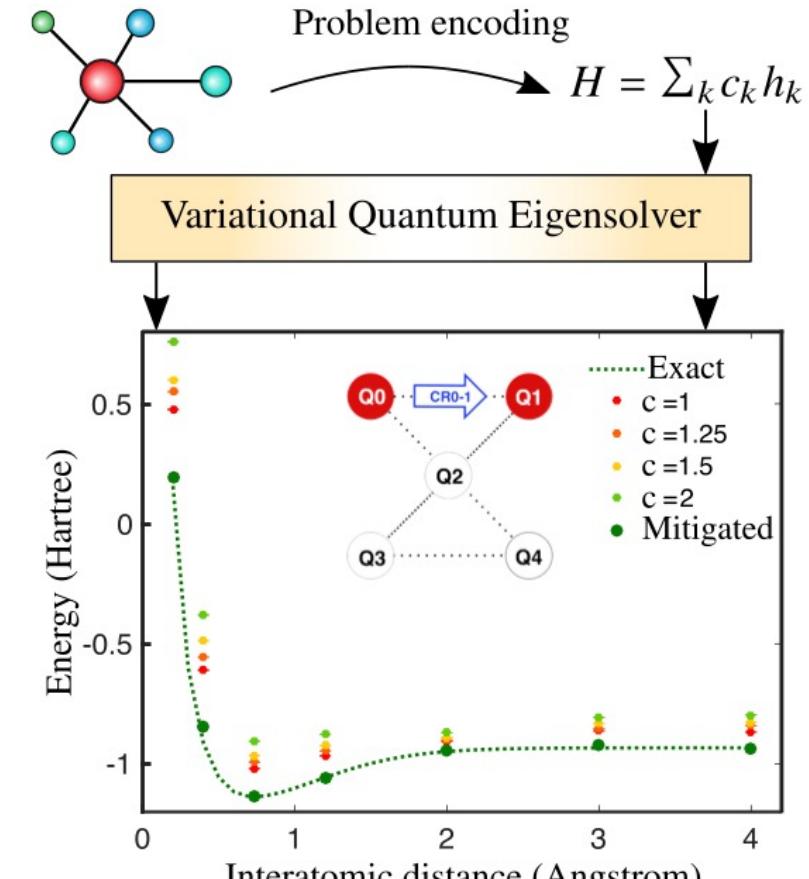
Variational Quantum Eigensolver (VQE)

VQEは変分量子アルゴリズムの一つでハミルトニアンの最小の固有値を求めるために用いられる

元々は量子化学計算で分子の基底エネルギーの値を求めるために開発された

- 量子化学の問題をハミルトニアンにエンコードし、最小の固有値を求める

最適化問題をハミルトニアンにエンコードすることで最適化問題にも応用可能



(図の引用：参考文献[1])

参考文献[1]: Abhinav Kandala, Kristan Temme, Antonio D Córcoles, Antonio Mezzacapo, Jerry M Chow, and Jay M Gambetta, "Error mitigation extends the computational reach of a noisy quantum processor," Nature 567, 491– 495 (2019).

VQEのための量子回路例 (1/2)

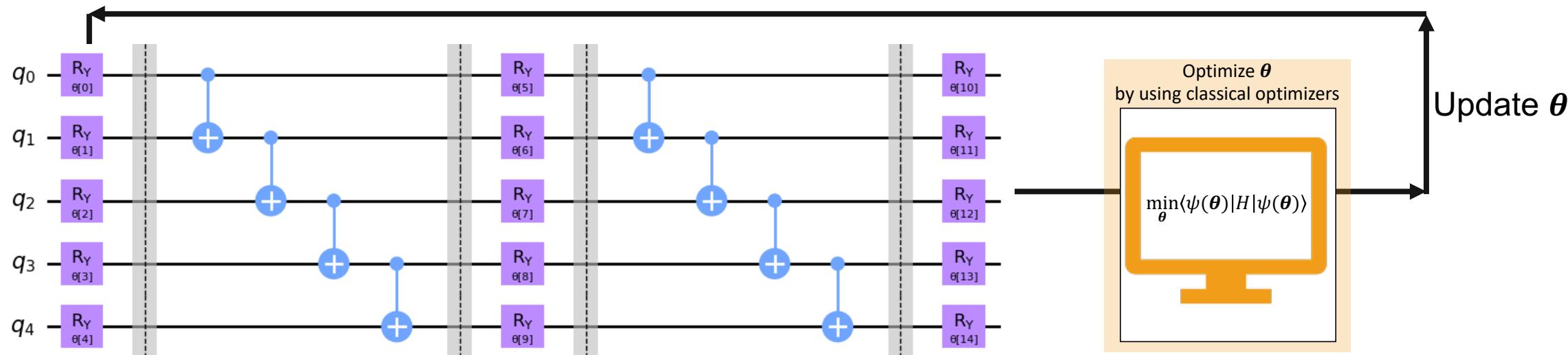
IBM Quantum

よく使われるPQCの例

- 1量子ビットゲート: Ry, RyRz, etc
- 2量子ビットゲート: CNOT, CZ, etc
- 2量子ビットの配置パターン: Linear, Ring, Full, etc.

Liner Ry PQC 深さ2

1量子ビットはRy, 2量子ビットはCNOT
CNOTの配置方法はlinearでパターンが2回繰り返されている



VQEのための量子回路例 (2/2)

IBM Quantum

VQE用のPQCは主にヒューリスティックベースで作られる

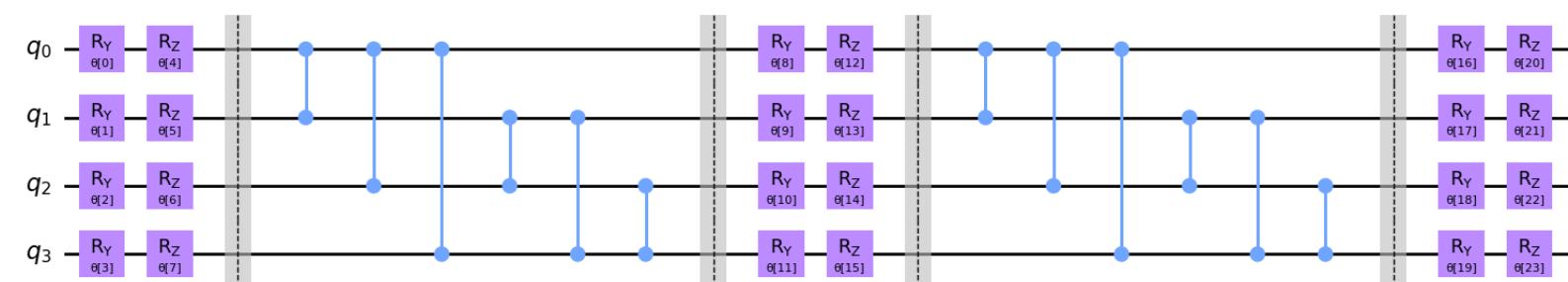
ハードウェアのトポロジーを考慮したPQCも存在している

- 例: ハードウェアのトポロジー上でCNOTがかけられる所だけにかける等

Full RyRz CZ PQC 深さ2

1量子ビットはRyとRz, 2量子ビットはCZ

CZの配置方法は全結合でパターンが2回繰り返されている



目次

1

量子ビット・量子ゲート・量子回路

2

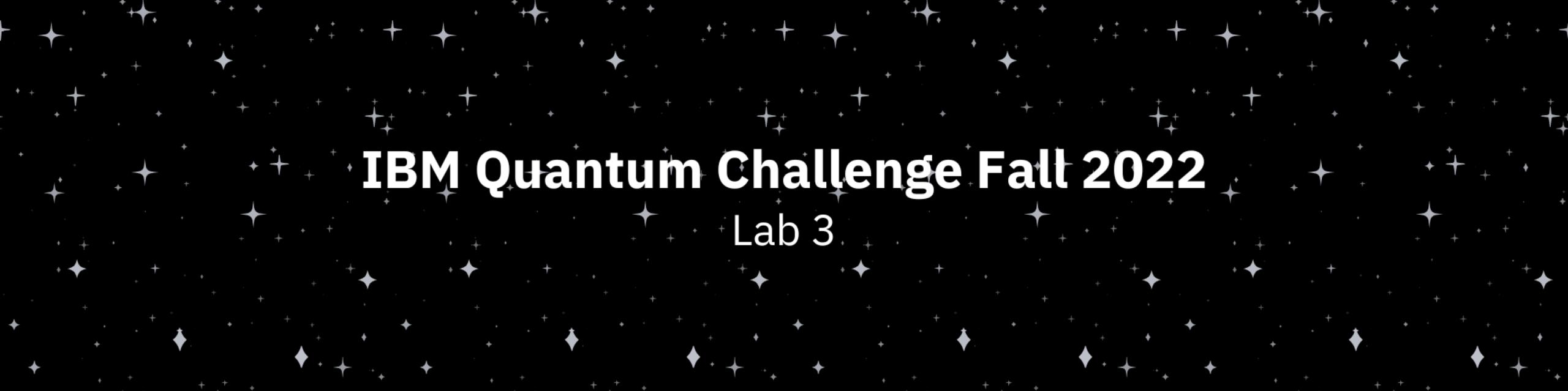
変分量子アルゴリズム
Variational Quantum Algorithm (VQA)

3

巡回セールスマン問題

4

問題に特化したPQC (Problem-specific PQC)



IBM Quantum Challenge Fall 2022

Lab 3

以降は昨年行われた**IBM Quantum Challenge Fall 22のLab3のJupyter notebook**を用いて解説していきます。

量子コンピューターを用いて最適化問題を解く方法について初心者の方でも
わかりやすいように書かれてるので興味がある方は一度読んでみてください。

ibm-quantum-challenge-fall-22/content/lab-3/lab3-ja.ipynb

<https://github.com/qiskit-community/ibm-quantum-challenge-fall-22/blob/main/content/lab-3/lab3-ja.ipynb>

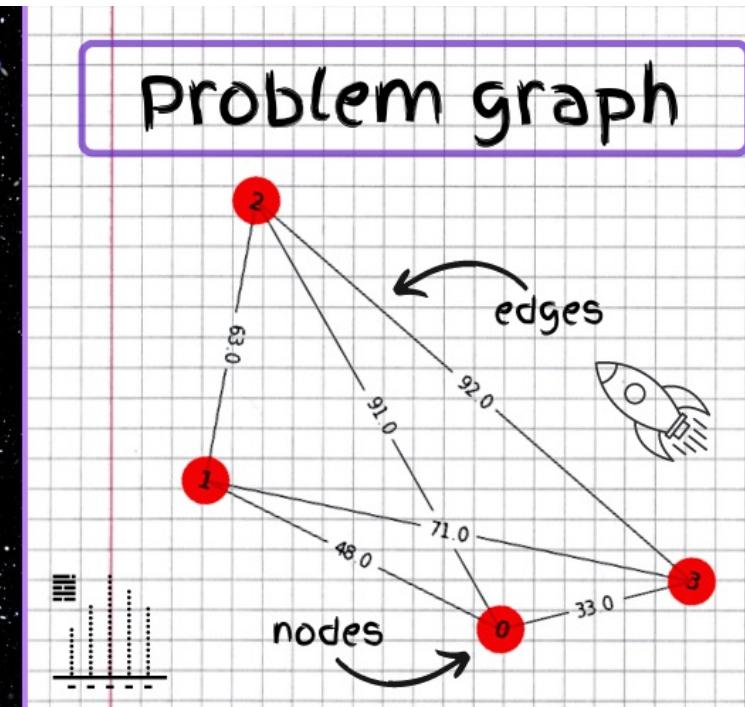
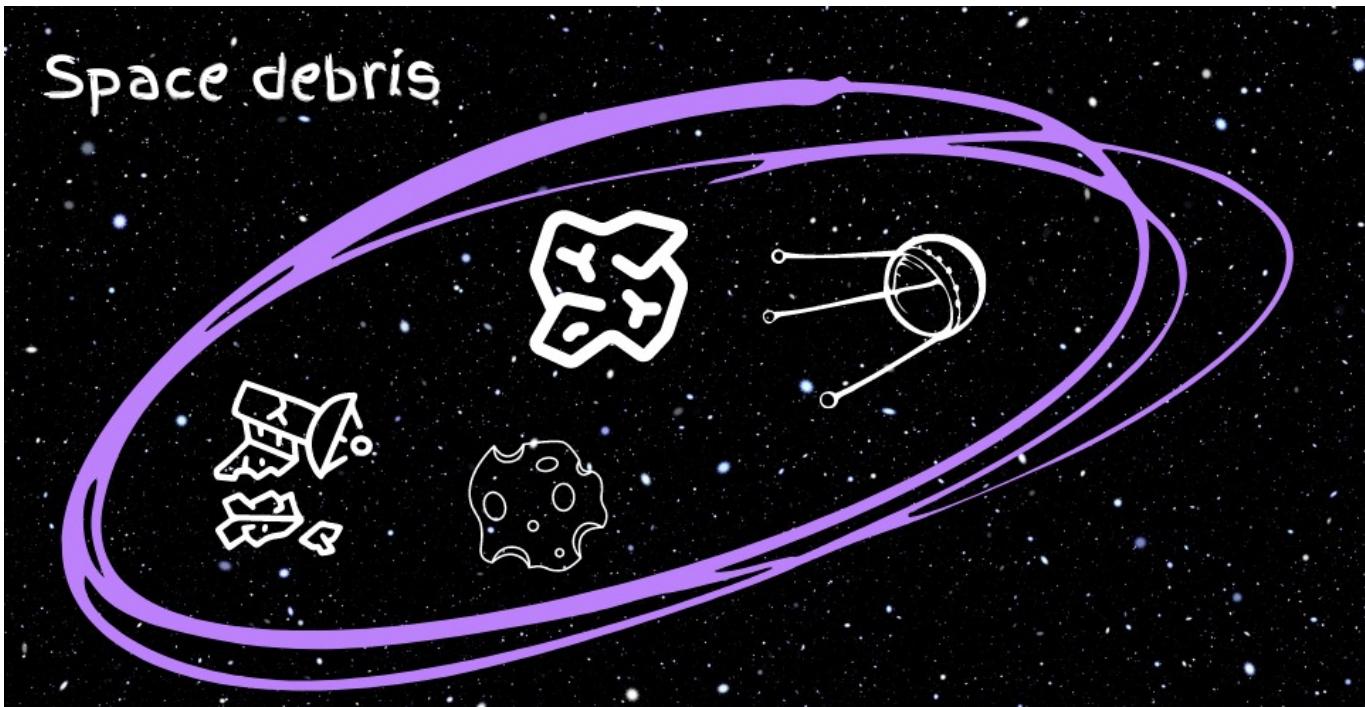
巡回セールスマン問題

Traveling Salesman Problem (TSP)

街から街へ商品を売りに行くセールスマンがすべての都市を訪問し、自分の出発した都市に戻る最短経路を見つける問題

- NP困難というとても難しい問題の一つとして有名。都市数が多くなると指数関数的に難しくなる

IBM Quantum Challenge 2022 Fallではドローンでスペースデブリ（宇宙ゴミ）を回収して戻ってくるための最短経路を見つける問題として出題されている



巡回セールスマン問題の定式化

都市数が N の場合、 N^2 個のバイナリ変数を使用

$x_{v,p}$ のインデックスの v は都市名を p は何番目に訪問するかを表現

- 例: $x_{2,3} = 1$ の場合、都市 2 を 3 番目に訪問する
- $W_{u,v}$ は都市間の距離を表す

赤い制約と**青い制約**は各列の内、ある一つの変数が1で
残り全ての変数は0という条件を表している

- 青い制約**は p 番目に訪問する都市はどれか一つだけ
- 赤い制約**は v 番目の都市は一回だけしか訪問しない

$x_{1,1}$ が 1 の場合、 $x_{2,1}$ から $x_{N,1}$ は0、 $x_{1,2}$ から $x_{1,N}$ も0

$$\text{Minimize} \sum_{(u,v) \in E} W_{u,v} \sum_{p=1}^N x_{u,p} x_{v,p+1}$$

$$\text{Subject to} \sum_{v=1}^N x_{v,p} = 1, \quad p = 1 \dots N$$

$$\sum_{p=1}^N x_{v,p} = 1, \quad v = 1 \dots N$$

$$x_{v,p} \in \{0, 1\}$$

巡回セールスマン問題の
制約を表現した図

$x_{1,N}$	$x_{2,N}$	• • •	$x_{N,N}$
•	•	•	•
$x_{1,2}$	$x_{2,2}$	• • •	$x_{N,2}$
$x_{1,1}$	$x_{2,1}$	• • •	$x_{N,1}$

目次

1

量子ビット・量子ゲート・量子回路

2

変分量子アルゴリズム
Variational Quantum Algorithm (VQA)

3

巡回セールスマン問題

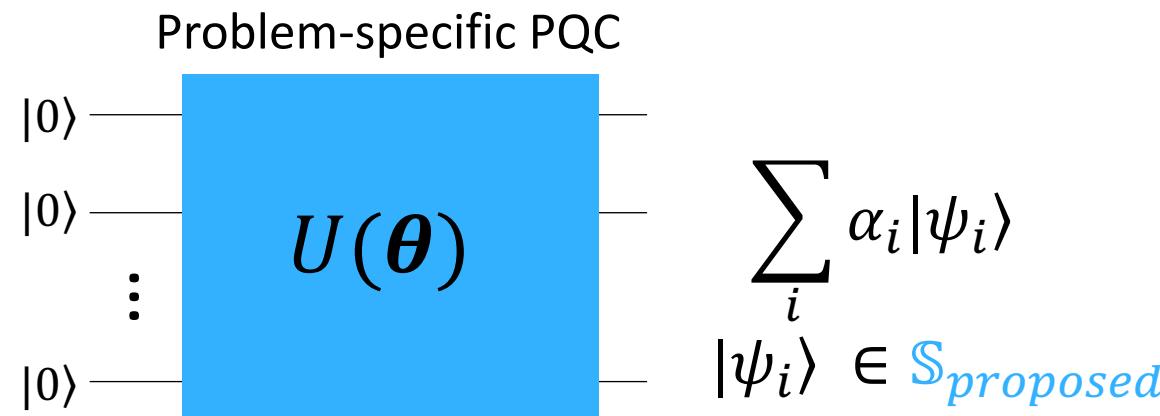
4

問題に特化したPQC (Problem-specific PQC)

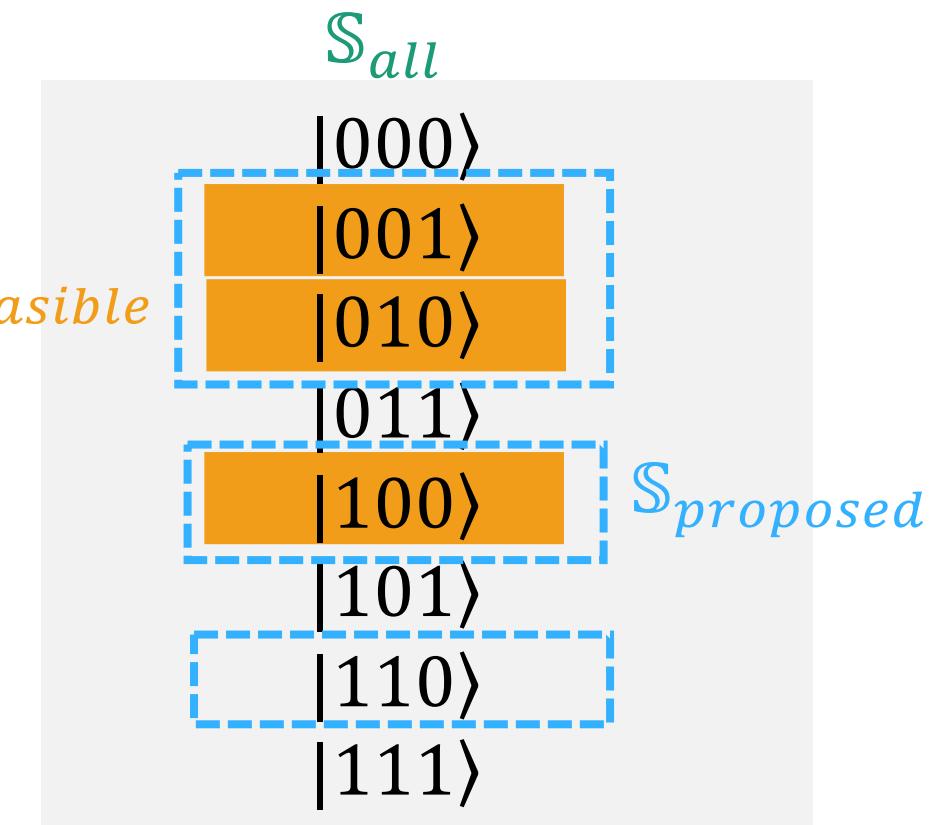
問題に特化したPQC (Problem-specific PQC) の概要

IBM Quantum

問題の制約を考慮したPQCを問題ごとに作成することでVQEの探索空間を小さくすることが可能
それにより解の収束の高速化が見込める



Problem-specific PQCを上手くつくることで、 $\mathbb{S}_{proposed}$ に含まれていない状態の確率振幅を0に維持したまま α_i の値だけを調節することができる

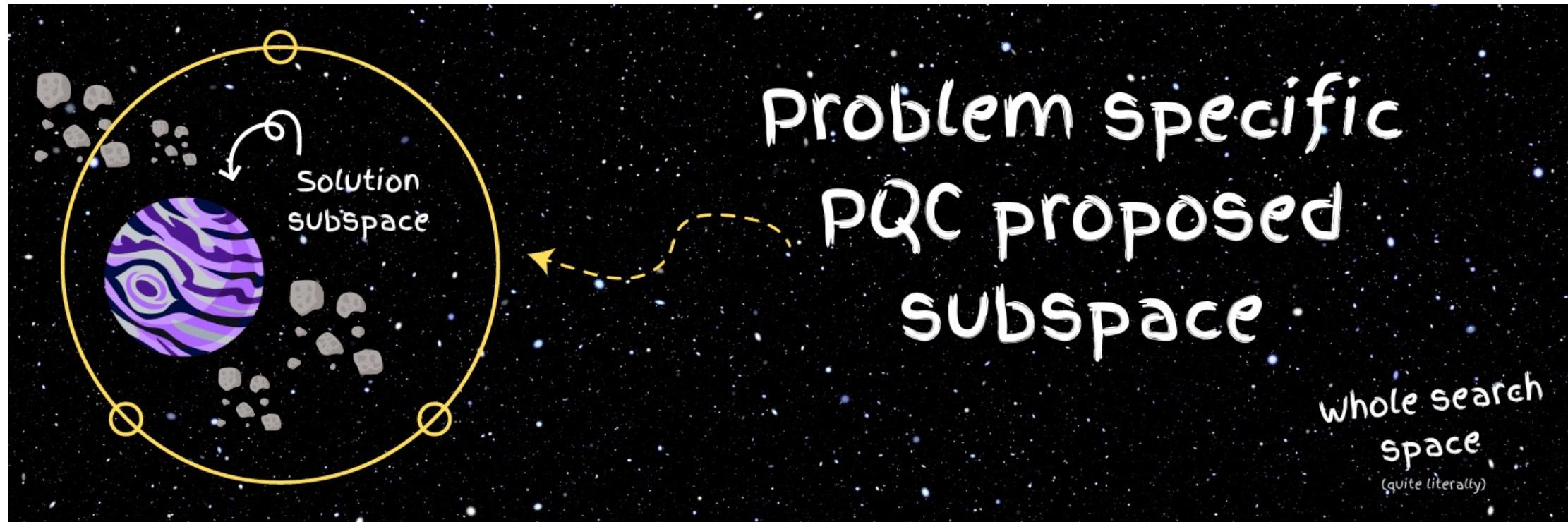


$$|\mathbb{S}_{feasible}| \leq |\mathbb{S}_{proposed}| \leq |\mathbb{S}_{all}|$$

問題に特化したPQC (Problem-specific PQC) の概要

IBM Quantum

問題の制約を考慮したPQCを問題ごとに作成することでVQEの探索空間を小さくすることが可能
それにより高速化が見込める



一つ目の制約のみを考慮したPQC (1/2)

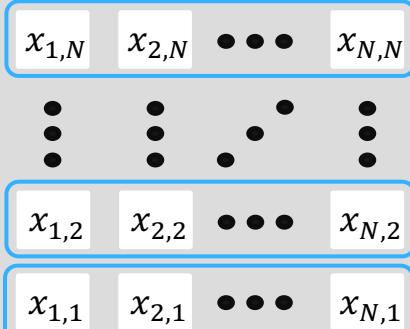
$$\text{Minimize} \sum_{(u,v) \in E} W_{u,v} \sum_{p=1}^N x_{u,p} x_{v,p+1}$$

Subject to $\sum_{v=1}^N x_{v,p} = 1, \quad p = 1 \dots N$

$$\sum_{p=1}^N x_{v,p} = 1, \quad v = 1 \dots N$$

$$x_{v,p} \in \{0, 1\}$$

巡回セールスマン問題の制約を表現した図



最適化問題をハミルトニアンに変換した後、各変数は各量子ビットに相当

$$|10 \dots 0\rangle \\ |01 \dots 0\rangle \\ \vdots \\ |00 \dots 1\rangle$$

一つ目の青い制約では制約図の各行の内、一つの変数が1で残りの変数は0を表している

この条件は一つの量子ビットが $|1\rangle$ で残りの量子ビットが $|0\rangle$ の状態の重ね合わせで構成されている
W stateの各基底に相当

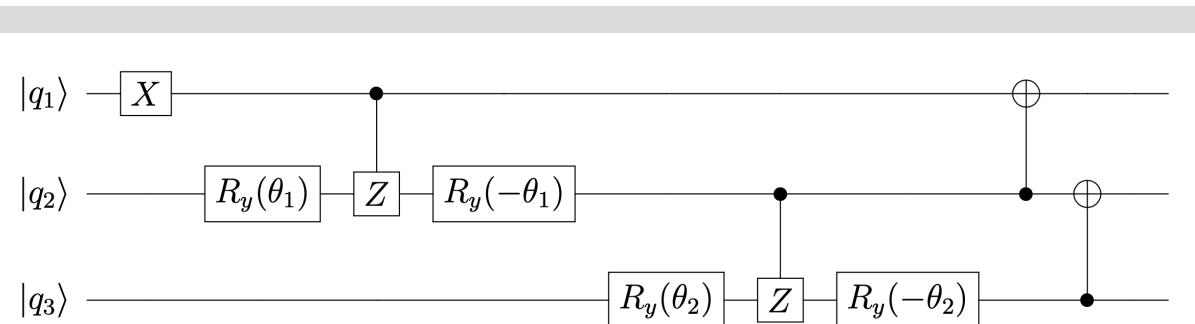
一つ目の制約のみを考慮したPQC (2/2)

W stateの各基底の確率振幅をコントロールする必要がある

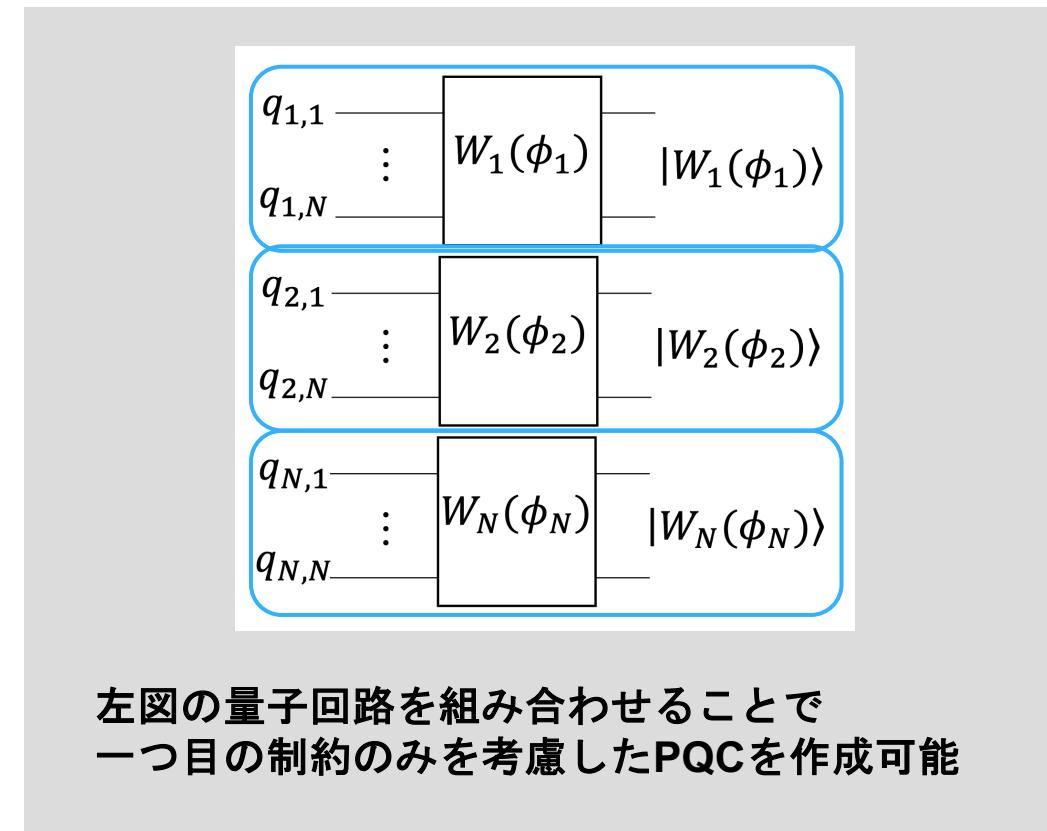
そのためにパラメータ付きのW stateを使う

$$|W(\phi)\rangle = \sum_i \alpha_{i(\phi)} |\psi_i\rangle,$$

$$\sum_i |\alpha_{i(\phi)}|^2 = 1, \quad |\psi_i\rangle \in \{|10\dots0\rangle, |01\dots0\rangle, |00\dots1\rangle\}$$



3量子ビットのパラメーター付きW stateを作成する量子回路

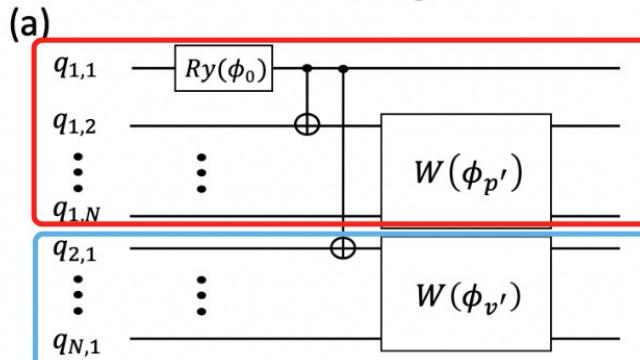


CNOTゲートを用いたL字型制約を考慮したPQC(1/2)

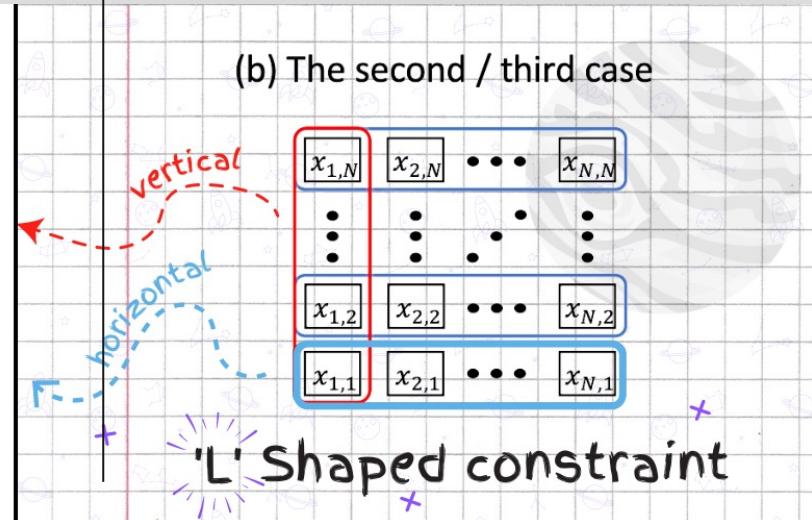
IBM Quantum

$\sum_{v=1} x_{1,v}$ と $\sum_{p=1} x_{p,1}$ の両方 (L字型の制約) を満たすPQC

Section 3.2.2 - Figure 4(a)



(b) The second / third case



$$\text{Minimize} \sum_{(u,v) \in E} W_{u,v} \sum_{p=1}^N x_{u,p} x_{v,p+1}$$

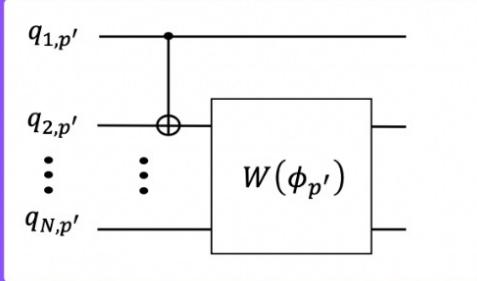
$$\text{Subject to } \sum_{v=1}^N x_{v,p} = 1, \quad p = 1 \dots N$$

$$\sum_{p=1}^N x_{v,p} = 1, \quad v = 1 \dots N$$

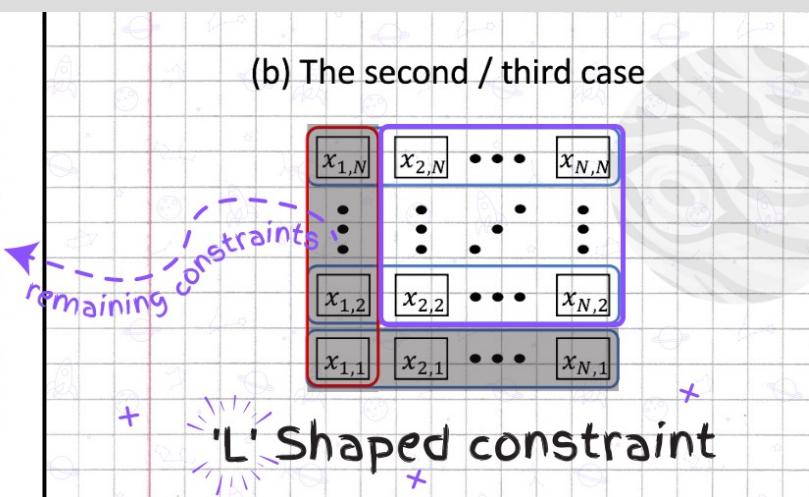
$x_{v,p} \in \{0, 1\}$

Section 3.2.2 - Figure 4(b)

(b)



(b) The second / third case

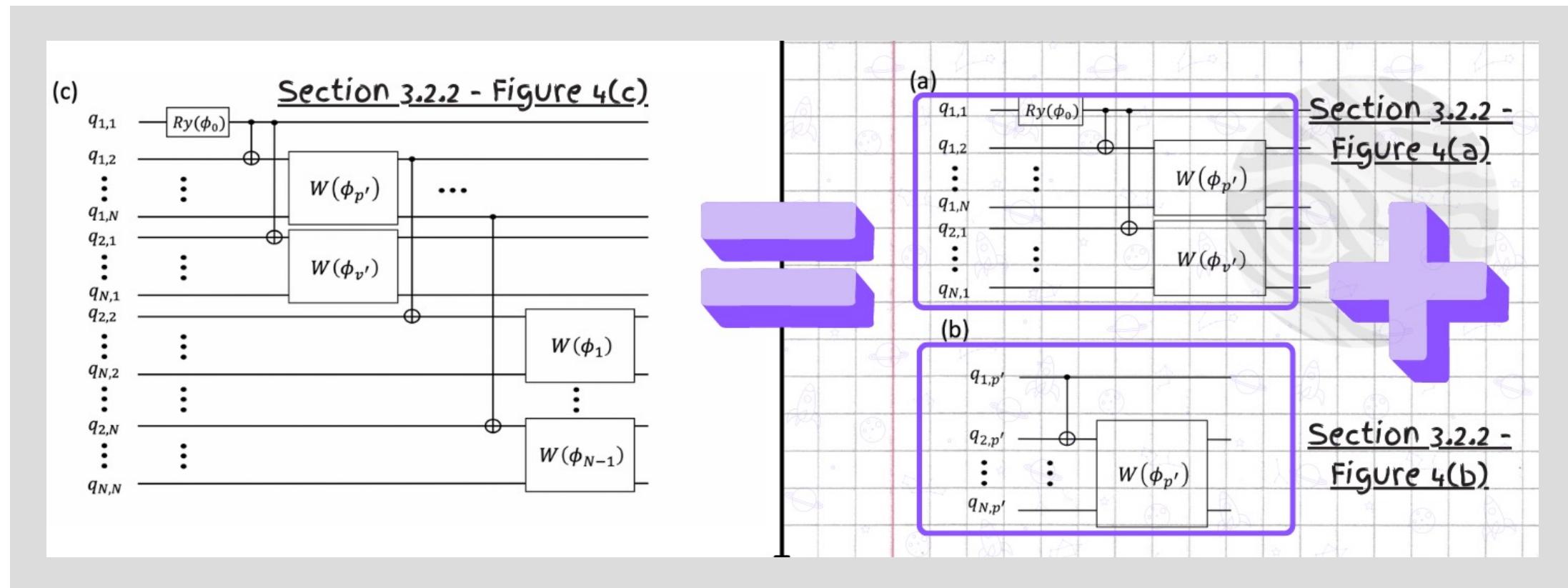


L字型の制約を考慮することでさきほど
のPQCより探索空間を少し小さくできた。
それにより高速化可能

CNOTゲートを用いたL字型制約を考慮したPQC(2/2)

IBM Quantum

L字型制約用のPQCと残りの制約用の2つのPQCを組み合わせることで全体のPQCが完成



全ての制約を考慮したPQC (1/2)

探索空間から制約を破る実行不可能な解をすべて排除する

$$\text{Minimize} \sum_{(u,v) \in E} W_{u,v} \sum_{p=1}^N x_{u,p} x_{v,p+1}$$

$$\text{Subject to } \sum_{v=1}^N x_{v,p} = 1, \quad p = 1 \dots N$$

$$\sum_{p=1}^N x_{v,p} = 1, \quad v = 1 \dots N$$

$$x_{v,p} \in \{0, 1\}$$

$x_{1,N}$	$x_{2,N}$	•••	$x_{N,N}$
•	•	•	•
•	•	•	•
$x_{1,2}$	$x_{2,2}$	•••	$x_{N,2}$
$x_{1,1}$	$x_{2,1}$	•••	$x_{N,1}$

実行可能な解は置換行列（1と0だけで構成された行列で各行と各列がちょうど1つの1を持っている）の形で解釈できる

$N=2$ の置換行列

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

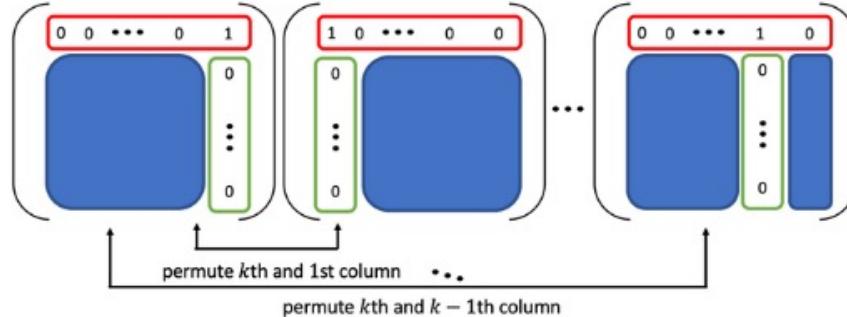
全ての制約を考慮したPQC (2/2)

置換行列に相当する量子状態を作るPQCは、再帰的に構築することが可能

(a)

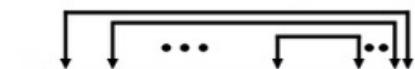
A permutation matrix of size $k - 1$

$$\begin{pmatrix} x_{1,k-1} & x_{2,k-1} & \cdots & x_{k-1,k-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1,2} & x_{2,2} & \cdots & x_{k-1,2} \\ x_{1,1} & x_{2,1} & \cdots & x_{k-1,1} \end{pmatrix} =$$

 k permutation matrices of size k 

(b)

set of CSWAP gates



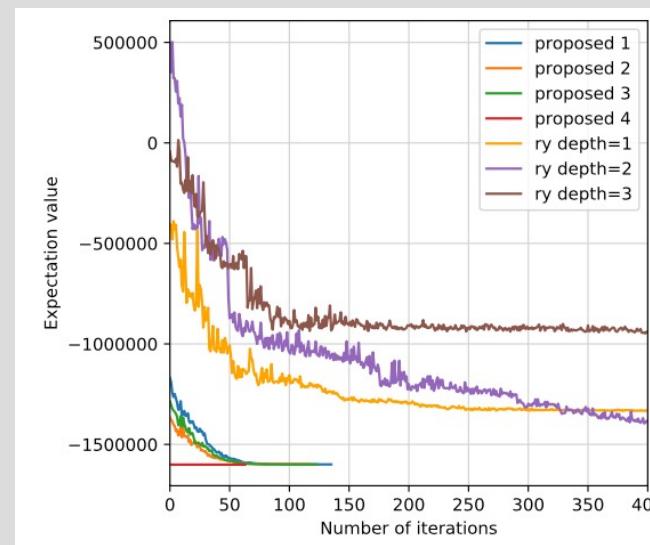
W state

 $|\Psi_{k-1}\rangle$ $|0^{k-1}\rangle$

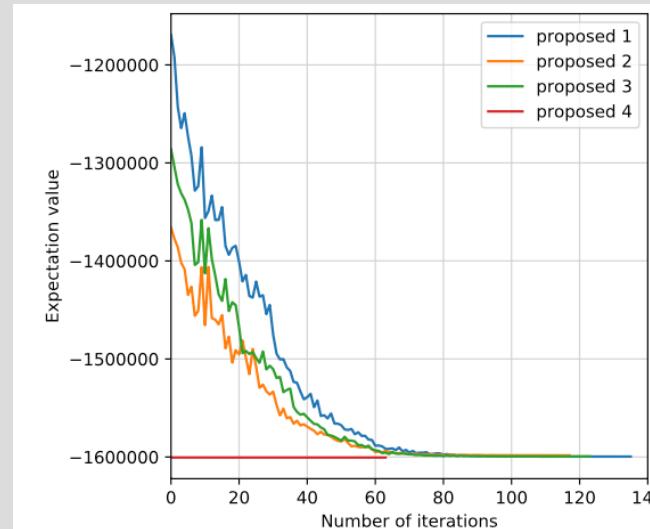
$$\begin{pmatrix} q_{1,k} & q_{2,k} & \cdots & q_{k-1,k} & q_{k,k} \\ q_{1,k-1} & q_{2,k-1} & \cdots & q_{k-1,k-1} & q_{k,k-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ q_{1,2} & q_{2,2} & \cdots & q_{1k-12} & q_{k,2} \\ q_{1,1} & q_{2,1} & \cdots & q_{k-1,1} & q_{k,1} \end{pmatrix}$$

実験結果

IBM Quantum



提案したPQCとRy PQCの比較



上のグラフを拡大したもの

*proposed 1, proposed 2, proposed 4が今回紹介したProblem-specific PQCです

提案したPQCを用いることで収束の速度が大幅に速くなった

- 初期状態の時点でRyと比べて期待値がかなり小さい
- その後60回程度のパラメーターの最適化で解を見つけることができた

収束の速度は基底の集合のサイズに密接に関係している

- Proposed 4 ⊂ Proposed 2 ⊂ Proposed 1

Proposed 4がベストに見えるが、PQCに多くのゲートを使用する

表 1 The comparison of necessary parameters and gates among the proposed problem-specific PQCs and a Ry PCQ for the TSP with n qubits

Necessary resources	Ry	Proposed 1	Proposed 2	Proposed 3	Proposed 4
# of Parameters	$(D + 1)n$	$n - \sqrt{n}$	$n - \sqrt{n} - 1$	$n - \sqrt{n} - 1$	$\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}\sqrt{n}$
# of one-qubit gates	$(D + 1)n$	$2n - \sqrt{n}$	$2n - \sqrt{n} - 4$	$2n - \sqrt{n} - 4$	$n - 1$
# of two-qubit gates	$D(n - 1)$	$2n - 2\sqrt{n}$	$2n - \sqrt{n} - 3$	$2n - 2\sqrt{n} - 2$	$n - \sqrt{n} + 2$
# of CSWAP gates	—	—	—	—	$\frac{1}{3}n\sqrt{n} - \frac{1}{2}n + \frac{1}{6}\sqrt{n} - 1$

VQEは量子コンピュータと古典コンピュータの両方を繰り返し使用して最小固有値を見つける手法

提案手法では決まった形のPQCではなく、問題ごとに問題の制約を考慮したPQCを用いる

今回紹介したPQCは巡回セールスマン問題用のもので以下の三つ

- 一つ目の制約のみを考慮したPQC (横の行のみ)
- L字型制約も考慮したPQC (上記に加え一番左の縦列も同時に考慮)
- すべての制約を考慮したPQC (置換行列の形で解釈)

提案したPQCを用いることで収束の速度が大幅に速くなった