

# Quantum algorithms: Variational quantum algorithms

2025/07/28

Shunta Kikuchi



## 菊地 駿太

職種：IT Specialist (IBMC)

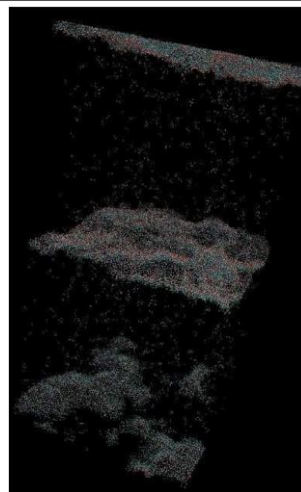
### プロフィール（略歴）

#### 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)

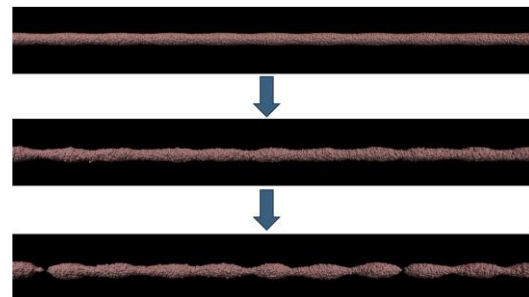
#### 研究内容：

- ・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
- ・マイクロ領域における、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

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

※  $|0\rangle$ 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 $\varepsilon_0$ 、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 $E[\psi_0]$ が書けるときの、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 $\varepsilon_0$ 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 $\varepsilon$ 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)

→ $\varepsilon$ 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

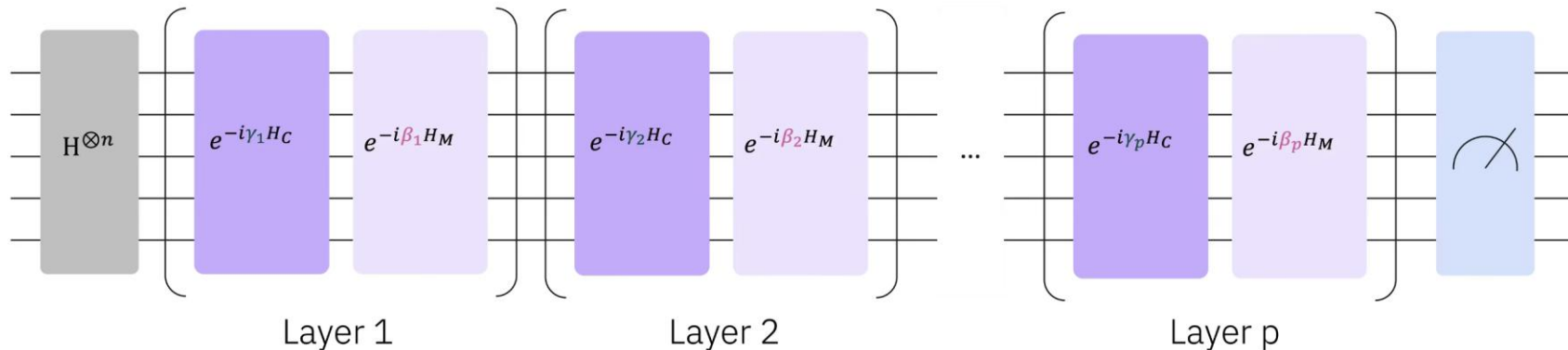
→本スライドでは、QAOAを詳しく説明

# 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 $H^{\otimes n}|0\rangle$ )とユニタリ行列 $U(\theta)$ を用いて設定

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

→  $U(\theta)$ 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 $\beta$ と $\gamma$ で $U(\theta)$ を最適化)



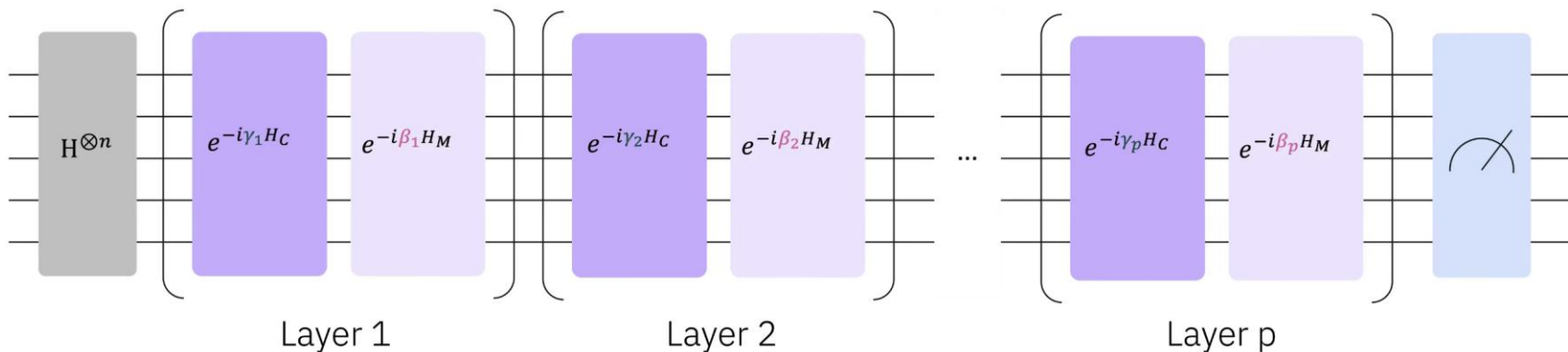
※  $H_C$ は解きたい問題を、 $H_M$ は初期状態を表すハミルトニアン(量子断熱計算を基に設計)

※ 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 $\varepsilon$ 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 $\beta, \gamma$ )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

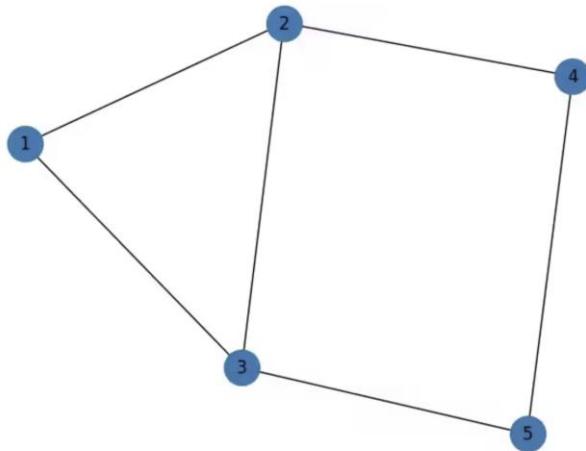


# 最適化問題とは？

- ・ 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



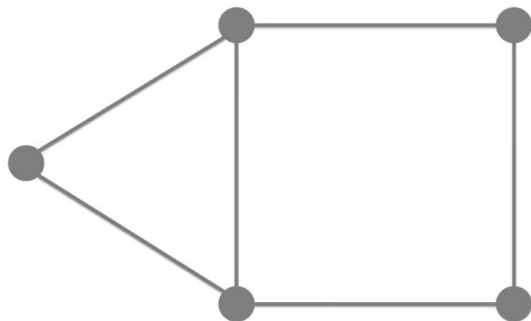
# Max-Cut問題とは？

- ・ 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

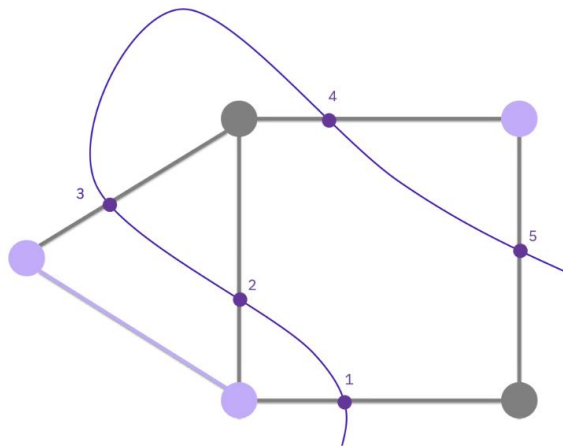
→基本的には厳密解を求めることが難しい(NP-hard)

※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

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

- ・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。

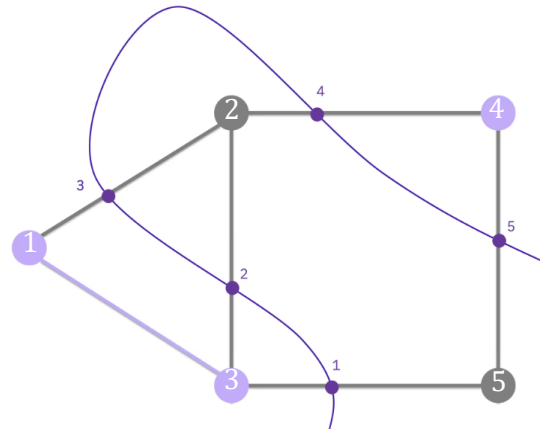
→最大化する目的関数： $\sum_{(i,j)} [x_i(1 - x_j) + x_j(1 - x_i)]$ ,

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

※  $(x_i, x_j) = (0,1), (1,0)$  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 :  $\sum_{(i,j)} [x_i(1-x_j) + x_j(1-x_i)]$  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。

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

※  $Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$  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  $Z_i = I^{n-i-1} \otimes Z \otimes I^{\otimes i-1}$

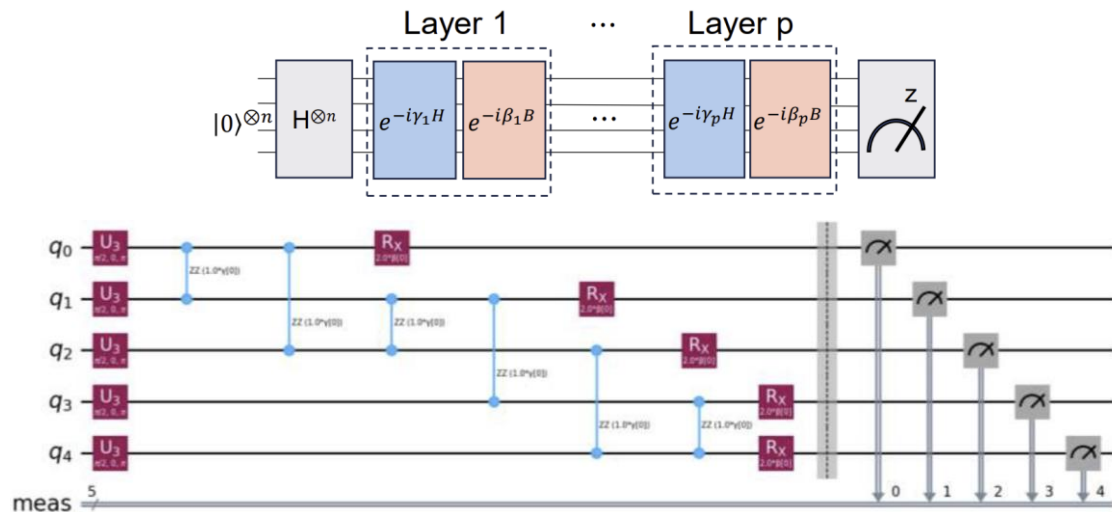
# QAOAを使って解を得る

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

$$H = \frac{1}{2} (Z_1 Z_2 + Z_1 Z_3 + Z_2 Z_3 + Z_2 Z_4 + Z_3 Z_5 + Z_4 Z_5)$$

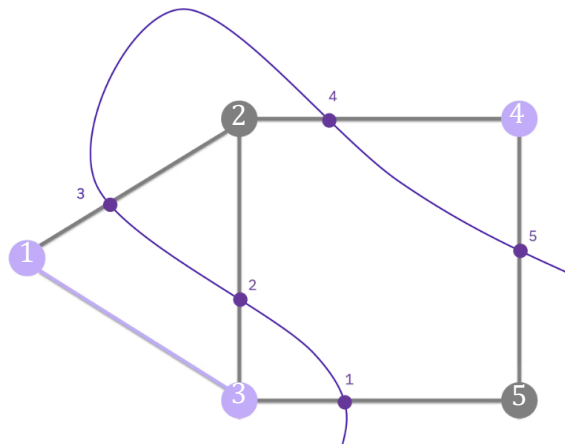
- QAOAを使用して、 $2p$ 個の $\beta$ と $\gamma$ でコスト関数を最適化(回路は $p = 1$ の場合)



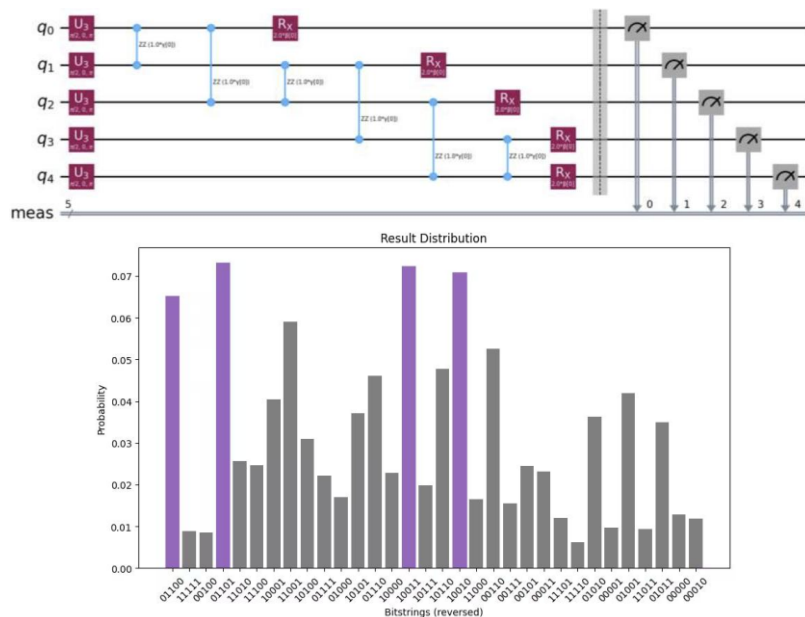
# 実機による計算結果

$$H = \frac{1}{2} (Z_1 Z_2 + Z_1 Z_3 + Z_2 Z_3 + Z_2 Z_4 + Z_3 Z_5 + Z_4 Z_5)$$

※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



Qt

Q Search

Quantum Tokyoへようこそ

学習コンテンツ

- Qiskitの始め方
- IBM Quantum Platform 教材 日本語版
- IBM Research Blog 日本語版
- [(E)] Qiskitテキストブック 日本語版
- [(E)] Qiskitテキストブック(Qiskitコース) 日本語版
- [(E)] Qiskitドキュメント・チュートリアル 日本語版リンク集
- IBM Quantum Challenge び
- Qiskit Global Summer School (Qiskit夏の学校) 資料 日本語版
- Quantum Tokyo 過去イベント資料
- Qiskitコミュニティ関連イベント案内

その他：IBM Quantumの便利なツール

## 量子ビット、量子ゲート、量子回路

沼田 新史(19 Apr 2024)  
Translated by Kifumi Numata

講義ノートのPDFは近日公開予定です。一部のコード スニペットは静的イメージであるため、非推奨になる可能性があることに注意してください。

この実験を実行するための QPU 時間は 約5秒です。

### 1. 紹介

ビット、ゲート、および回路は、量子コンピューティングの基本的な構成要素です。量子ビットと量子ゲートを用いた回路モデルによる量子計算を学び、重ね合わせ、測定、エンタングルメントの復習も行います。

このレッスンでは、次のことを学びます。

- 単一量子ビットゲート
- ブロッホ球
- 重ね合わせ
- 測定
- 2量子ビットゲートとエンタングルメント状態

この講義の最後には、ユーティリティスケールの量子コンピューティングに不可欠な回路の演算について学びます。

### 2. Computation as a diagram

量子ビットを使用する場合もビットを使用する場合も、入力が必要な出力に変換するためにそれらを実行する必要があります。少数のビット用の非常に単純なプログラムでは、このプロセスを **回路図** と呼ばれる図で表すと便利です。左下の図が古典回路の例、右下の図が量子回路の例です。どちらの場合も、左側に入力があり、出力が右側で、その間に演算が記号によって表されます。演算に用いられる記号は、主に歴史的な背景から「ゲート」と呼ばれます。



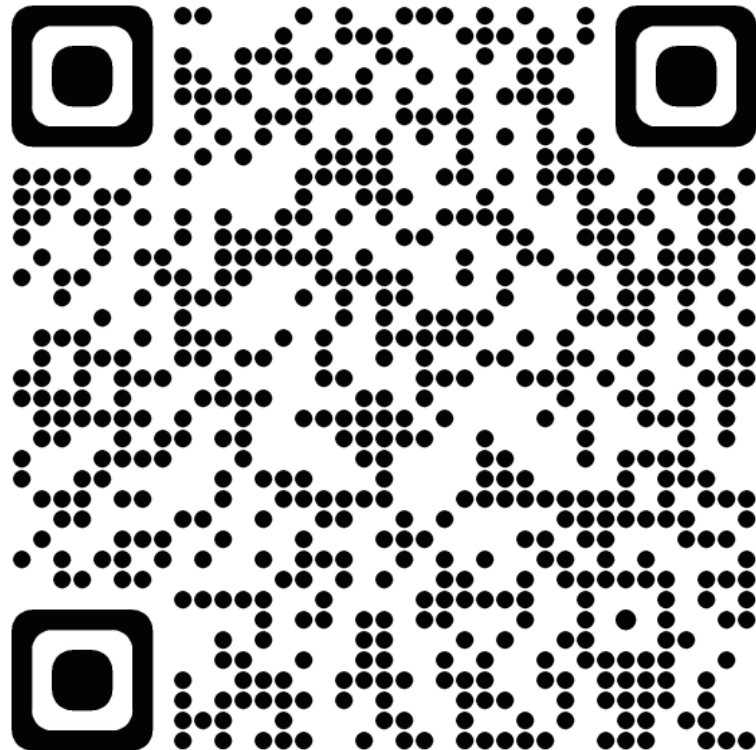
### 3. 単一量子ビットゲート

#### 3.1 量子状態とブロッホ球

量子ビットの状態は、 $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  の重ね合わせの状態を表します。任意の量子ビットは以下のように表します。

$$\psi = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

ここで  $\alpha$  と  $\beta$  は、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  を満たす複素数で、確率振幅と呼ばれます。



# 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>

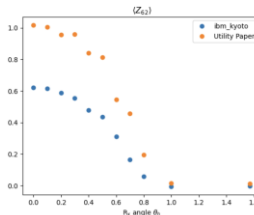
1. はじめに (飛ばします)
2. 量子ビット・量子ゲート・量子回路 (7/7(月))
3. 量子テレポーテーション (7/16(水))
4. グローバーのアルゴリズム (7/16(水))
5. 量子位相推定 (7/28(月))
6. 量子変分アルゴリズム (7/28(月))
7. 量子系のシミュレーション
8. 古典計算によるシミュレーション
9. 量子ハードウェア
10. 量子回路の最適化
11. 量子エラー緩和
12. 量子ユーティリティーの実験 I
13. 量子ユーティリティーの実験 II
14. 量子ユーティリティーの実験 III

Jupyter notebookの和訳 :

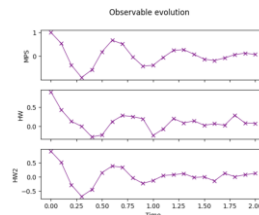
<https://quantum-tokyo.github.io/introduction/courses/utility-scale-quantum-computing/overview-ja.html>



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

