Kawasaki Quantum Summer Camp 2024

量子最適化

Aug 1, 2024

松尾惇士
Atsushi Matsuo
IBM Quantum

川崎市 KAWASAKI CITY UTokyo IBM Quantum

海外から来た友達と遊園地へ

アトラクションを回るルートを考える

午後6時に入園して、閉園時間午後10時まで、どの順番でアトラクションを回ると最も無駄なく移動できるか？

考慮（こうりょ）すべきことは何か

・訪問する順番

・移動距離

アトラクションを回るルートを考える

Qiskit

午後6時に入園して、閉園時間午後10時まで、どの順番でアトラクションを回ると最も無駄なく移動できるか？

９個だけ好きなアトラクションを選んだとして、巡回路は何通りあるか？

９の階乗

9! = 9 x 8 x 7 x 6 x 5 x 4 x 3 x 2 x 1

= 362880通り

現実的にはもっと多くの変数を考慮すべき

Qiskit

午後6時に入園して、閉園時間午後10時まで、どの順番でアトラクションを回ると最も**満足度**を高められるか？

考慮すべきことは何か？

- どのアトラクションを選択するか
- アトラクションの数
- 移動距離
- 待ち時間
- 乗車時間
- 閉園までの時間
- アトラクションの好み（満足度）

最適化問題とは

たくさんの選択肢の中から「最も良い」ものを見つける問題

普段の生活の中でも知らず知らずのうちにみんな解いている

- 友達と遊園地に行ったとき
- おこづかいをどう使うか
- 放課後の時間の使い方
- 文化祭やイベントの準備
- 通学ルートの選択

問題を数学的に扱うためには定式化が必要！

定式化とは？

Qiskit

解きたい問題を数式であらわすこと

目的関数・・・最小化または最大化したいもの

- 最小化：コスト、距離、重量、処理時間
  - 例）AからBへ最短時間で行く経路を求める

- 最大化：利益、価値、生産高、効率、満足度
  - 例）300円の予算で最も満足度の高い遠足に持っていくお菓子を決める

定式化のお作法

Qiskit

目的関数：最小化または最大化したいもの
（最小化：園内の移動距離、最大化：満足度、報酬）

(最小化) Minimize ～ (最大化) Maximize ～

制約条件：探すべき変数がある集合に含まれることを指す
（閉園時間まで t=4時間、アトラクション数、2回連続で
同じアトラクションには乗車しないルール, etc.）

Subject to ～ 具体的な制約条件の記述

巡回セールスマン問題

与えられるデータ：n個の地点と2地点間の距離

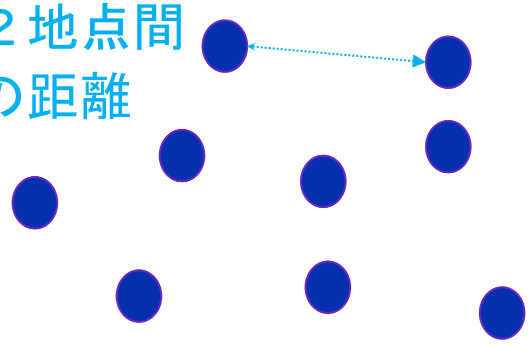
条件：すべての地点を１度ずつ通り元の

目標：総距離をできるだけ短くしたい

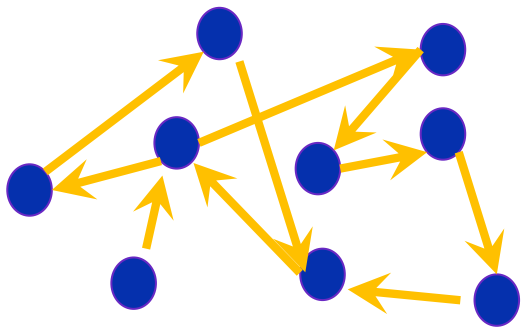
点（頂点）とそれをつなぐ線（辺）で
構成されたものを”グラフ“と呼びます。

数学にはグラフ理論という分野があり、
そこではグラフについての様々な問題を扱います

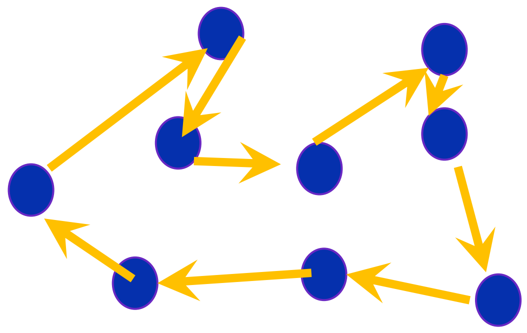
２地点間
の距離



N個の地点



ある巡回路



別の巡回路

巡回路の選び方はn! = n(n-1)(n-2)・・・2・1通り　　n → ∞　**n!**　→　**組合せ爆発!**

量子コンピューターでは
どうアプローチして解くのでしょうか？

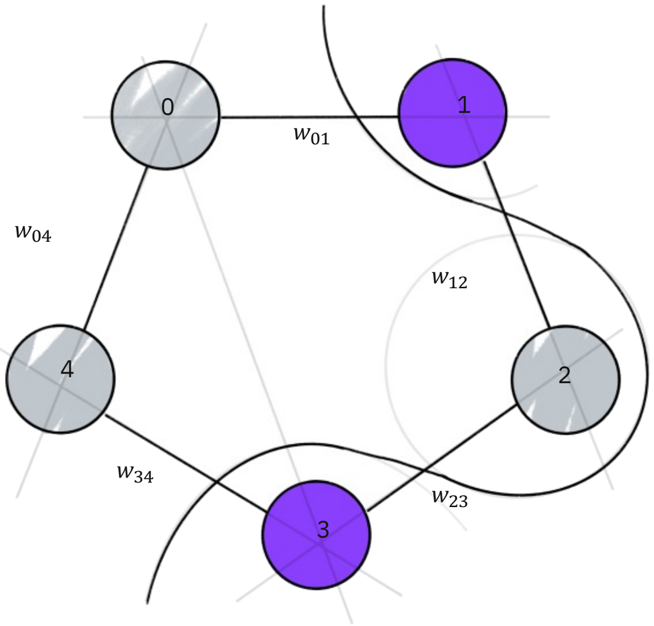
最適化問題では目的関数をハミルトニアンにする

化学の問題の場合、分子のエネルギー（ハミルトニアン）の最小値を求めた

最適化問題の目的関数をハミルトニアンで表すことで、
量子コンピューターで最適化問題を扱うことができる

最大カット問題

マーケティング戦略： 個々人の影響の度合いが分かっている場合に
無料の試供品をどの人に配れば、利益が最大になるか？



多くの人々が相互に作用し影響を及ぼしあうシステム

- グラフの頂点：個人
- 頂点間の結合：個人がお互いの購買決定に影響を与えるか
- 重みw_{ij} ：i が試供品を手に入れた後に、j が製品を購入する確率

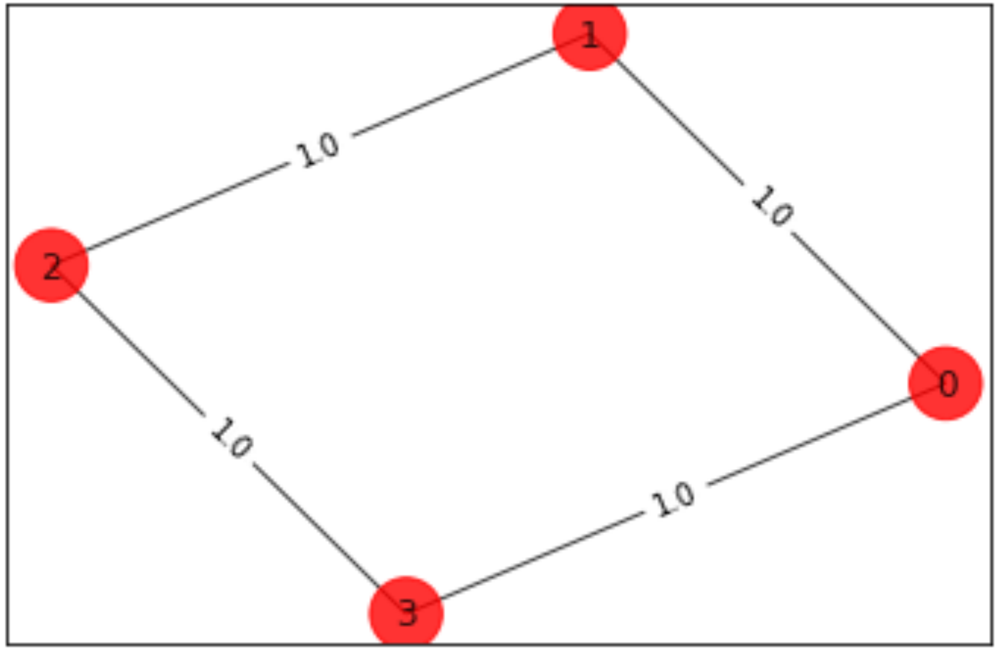
頂点を二つのグループ（試供品をあげる、あげない）に分けるとき、
どの頂点の間の結合をカットすれば、カットされた重みの合計が最大になるか？

ハミルトニアン

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{i,j}\left(1 - Z_i Z_j\right)$$

（ここで、$Z_i = \{1, -1\}$, $w_{i,j}$ は重み）　：最小値とそのときのZ_iの値を求める

最大カット問題の例



左のグラフの場合、

頂点数４，辺の数４

辺は(0, 1), (1, 2), (2, 3), (3, 0)にある
*それぞれの辺の重みは1.0

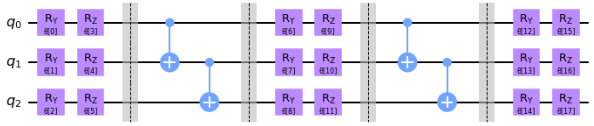
ハミルトニアンは以下のようになる

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{i,j}\left(1 - Z_i Z_j\right)$$
$$= \frac{1}{2}(Z_0 Z_1 I_2 I_3 + I_0 Z_1 Z_2 I_3 + I_0 I_1 Z_2 Z_3 + Z_0 I_1 I_2 Z_3) - 4$$

量子コンピュータと古典コンピュータを組み合わせて最小の固有値を求める

① 目的関数（ハミルトニアン）とパラメーター付き量子回路（PQC）を準備

$$H = \frac{1}{2}\sum_{e_{ij}\in E}(I - Z_i Z_j)$$



② PQCを量子コンピュータ上で実行し、量子状態を作成

③ 作成した量子状態を観測しハミルトニアンを評価

④ 古典コンピューターで次の試行用のパラメーターを計算

ハミルトニアンの最小固有値の固有ベクトルを求めるまで繰り返す

パラメーター付き量子回路の作成方法が違う

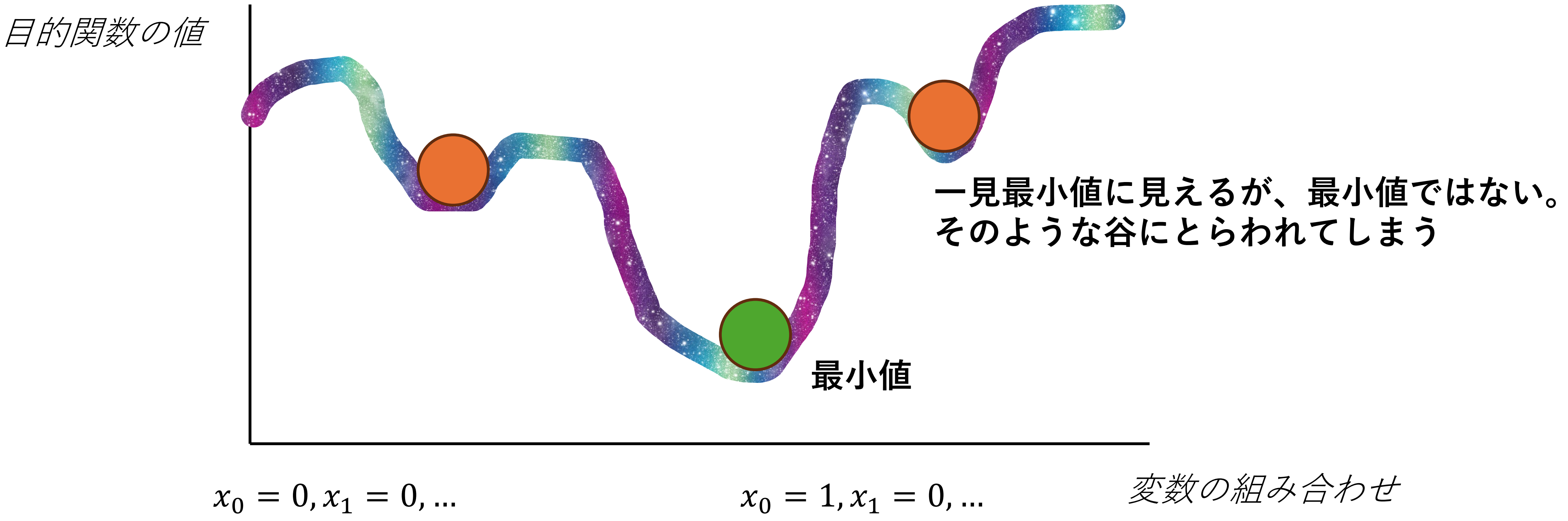
- VQEの場合
  - ある化学の問題→ハミルトニアン→アンザッツは既存のものから選ぶ

- QAOAの場合
  - ある最適化問題→ハミルトニアン→アンザッツ
  - アンザッツは問題によって異なるものが自動的に生成される

計算のイメージについて、二次関数の場合

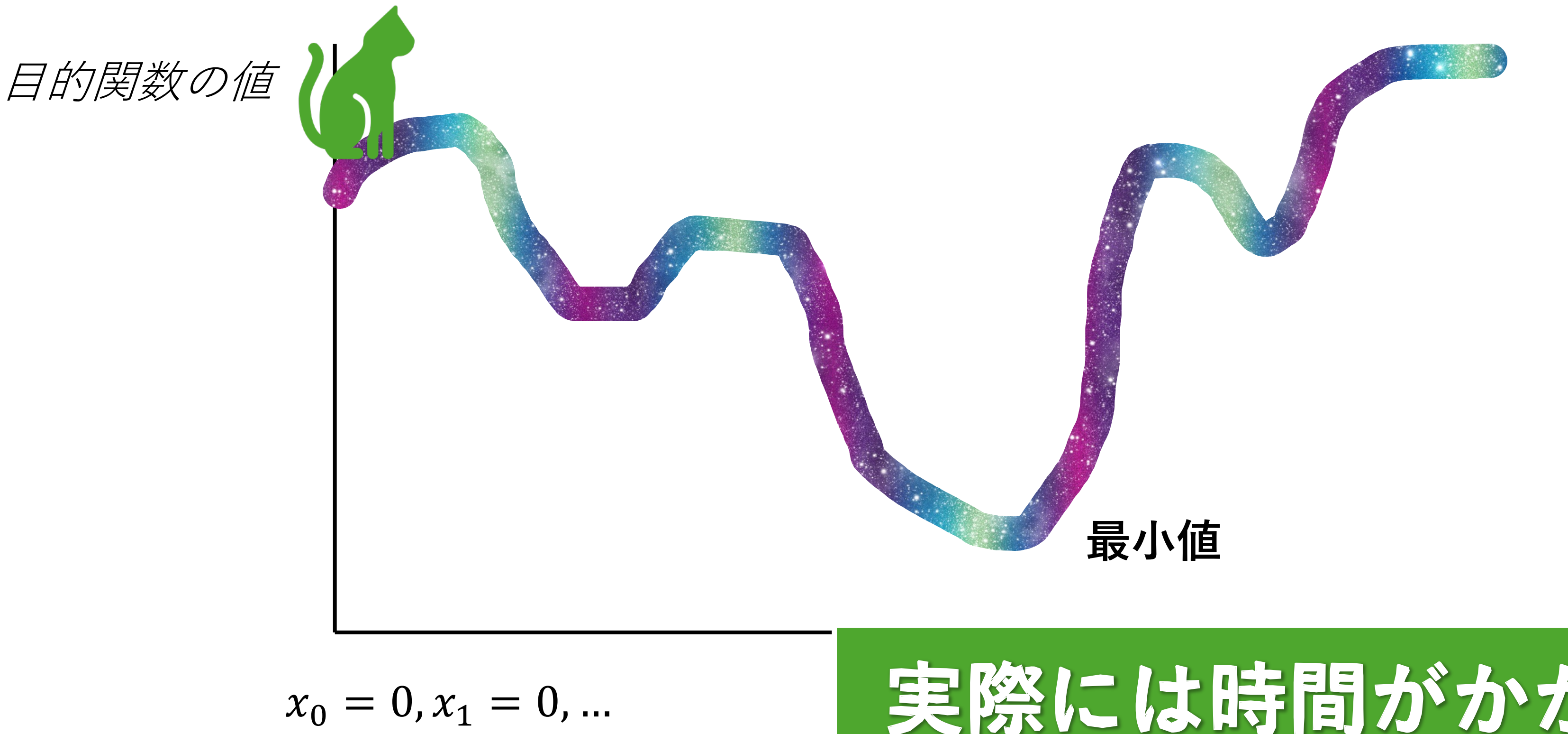
谷の底、谷は１つ。最小の値を見つけるのは簡単

複雑な目的関数の山と谷の中で最小な値を見つけるのは大変



量子計算の場合（イメージ図）

十分な時間をかければ山と谷を貫通できる



実際には時間がかかりすぎるので近似アルゴリズムを利用する

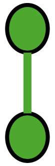
ハンズオン

実際にプログラムを動かしてみましょう！

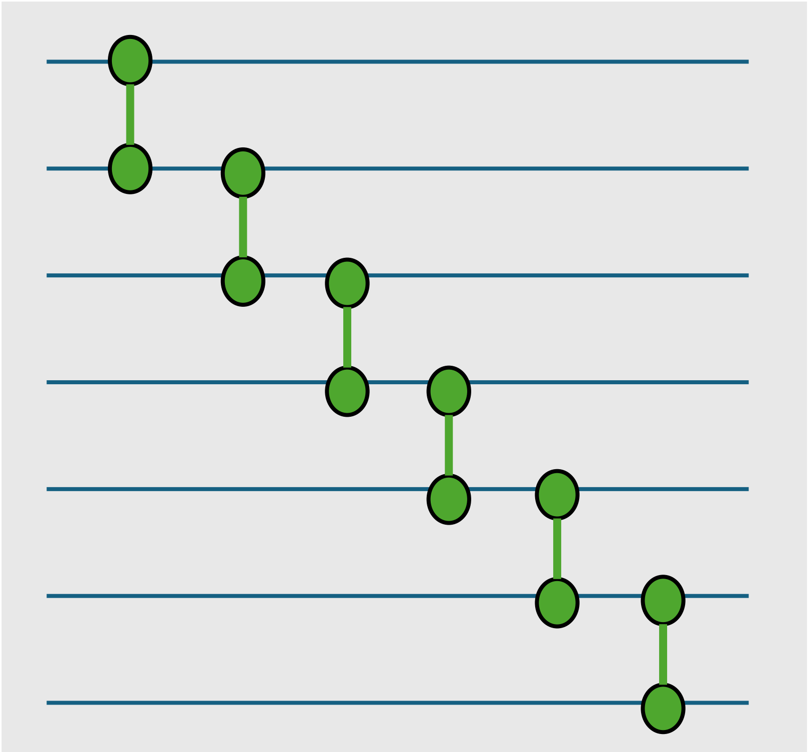
付録

量子回路最適化の例

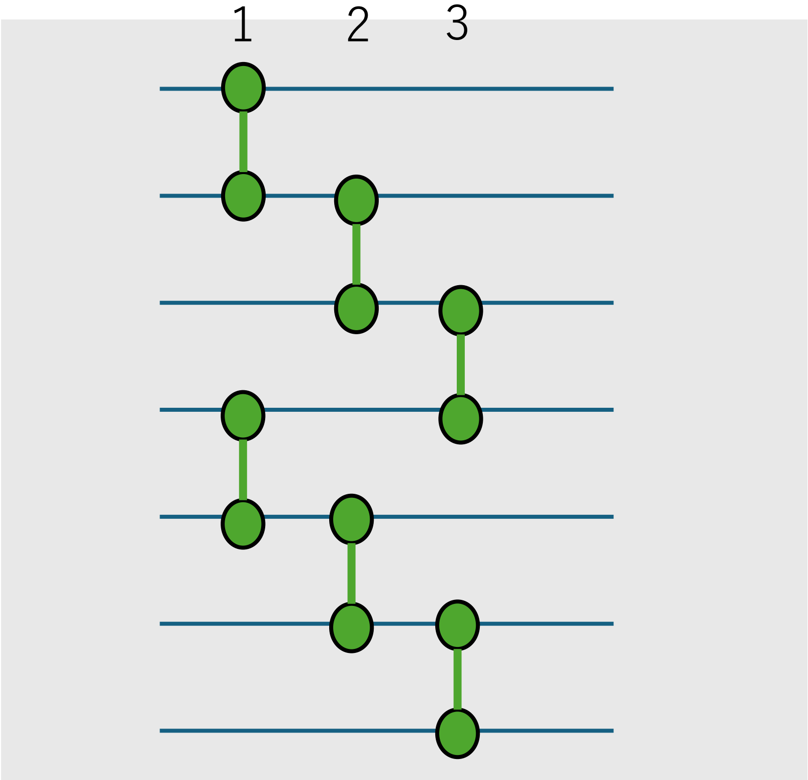
入れ替え可能な量子ゲートの入れ替えをして並列実行可能なものを前にもってくる



量子ゲートの中には順番を入れ替えても結果が変わらないものがあり、QAOAで使用される左図のRZZゲートもその内の一つ



最適化なしの場合、階段状に続く



最適化ありの場合、量子回路の深さを浅くできる