

# 量子計算回数決定法の QAOA適用に向けた検討

○松尾脩平<sup>1</sup> 谷本輝夫<sup>1</sup> 川上哲志<sup>1</sup> 田渕豊<sup>2</sup> 廣川真男<sup>1</sup> 井上弘士<sup>1</sup>

1 九州大学

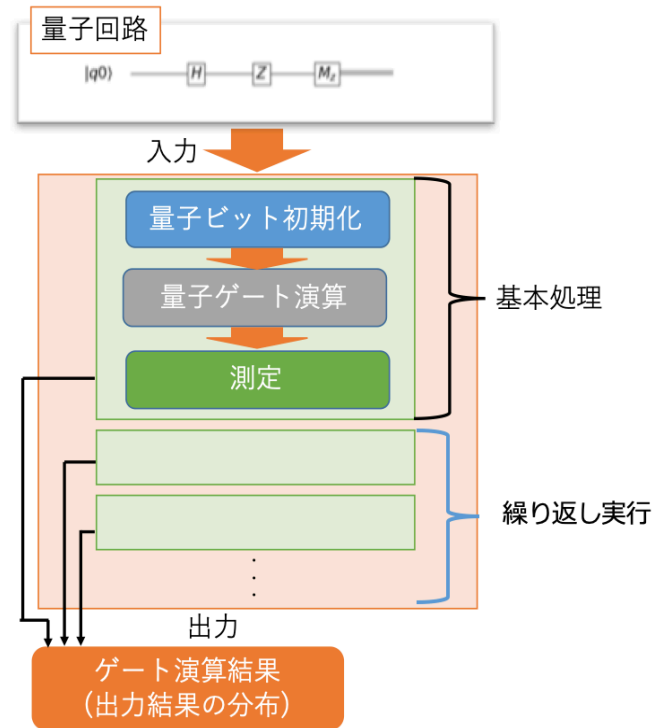
2 東京大学

# 目次

- 背景
  - 量子ゲート方式コンピュータ
  - これまでの取り組みと問題点
  - QAOA概要
- 研究の課題と目的
- 実験方法
- 実験内容と結果
- 考察
- 終わりに

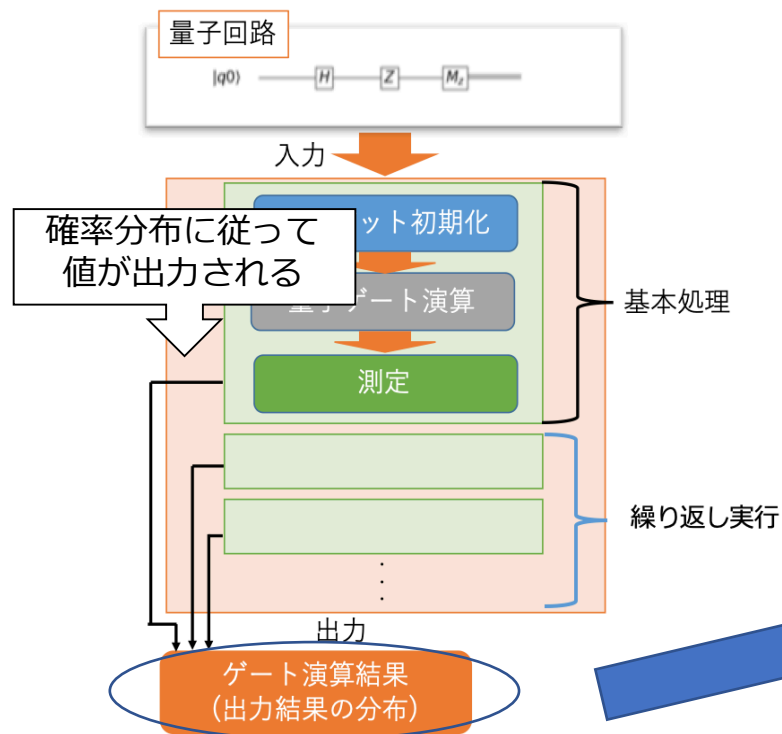
# 量子ゲート方式コンピュータ

- 新たなコンピュータとして量子ゲート方式コンピュータの実現が期待される
- 量子ゲート方式コンピュータの実行モデル

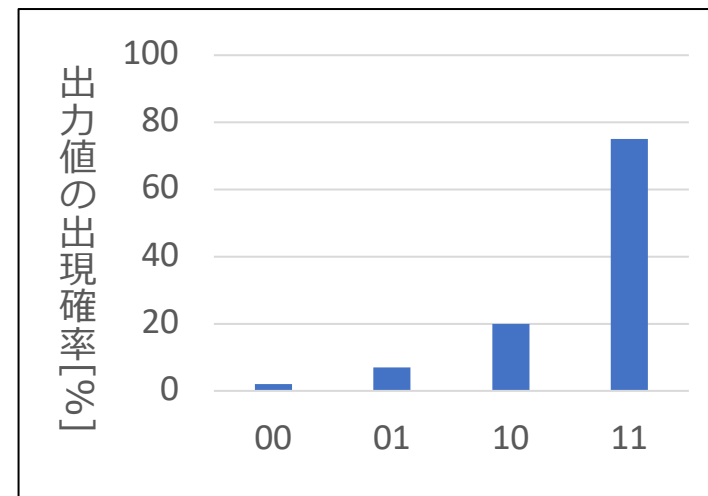


# 量子ゲート方式コンピュータ

- 新たなコンピュータとして量子ゲート方式コンピュータの実現が期待される
- 量子ゲート方式コンピュータの実行モデル

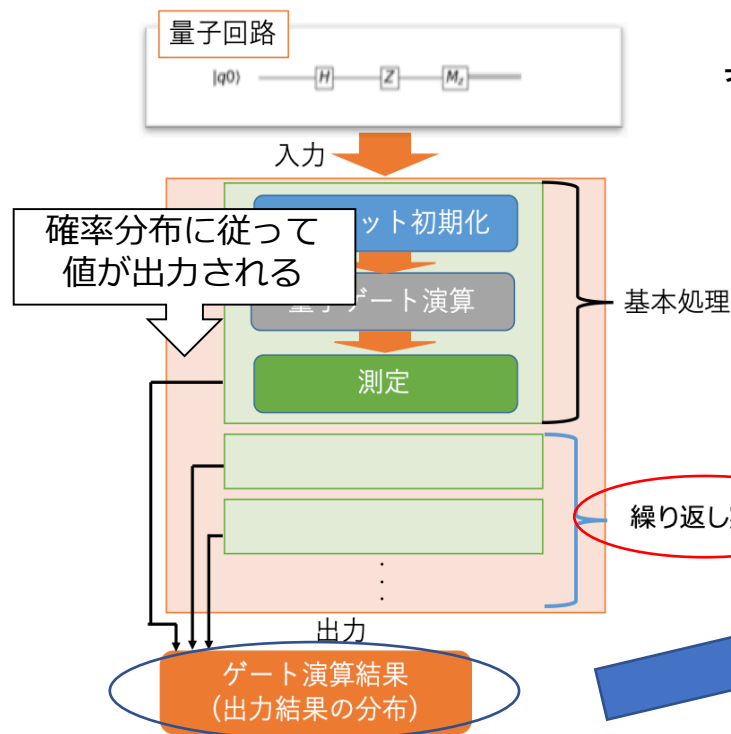


出力結果の確率分布



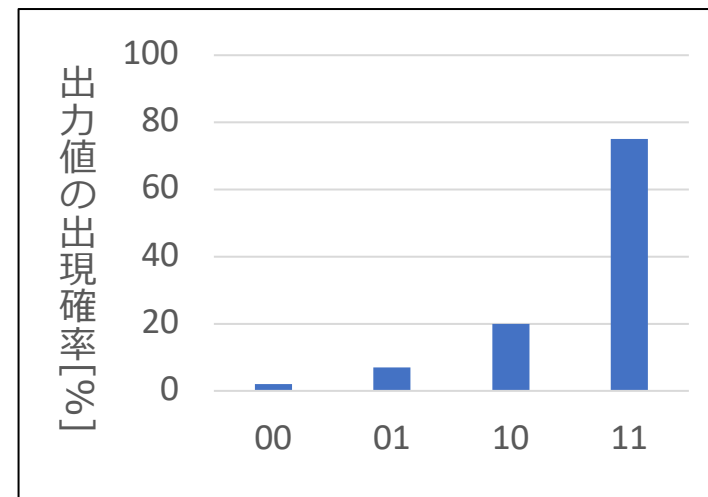
# 量子ゲート方式コンピュータ

- 新たなコンピュータとして量子ゲート方式コンピュータの実現が期待される
- 量子ゲート方式コンピュータの実行モデル



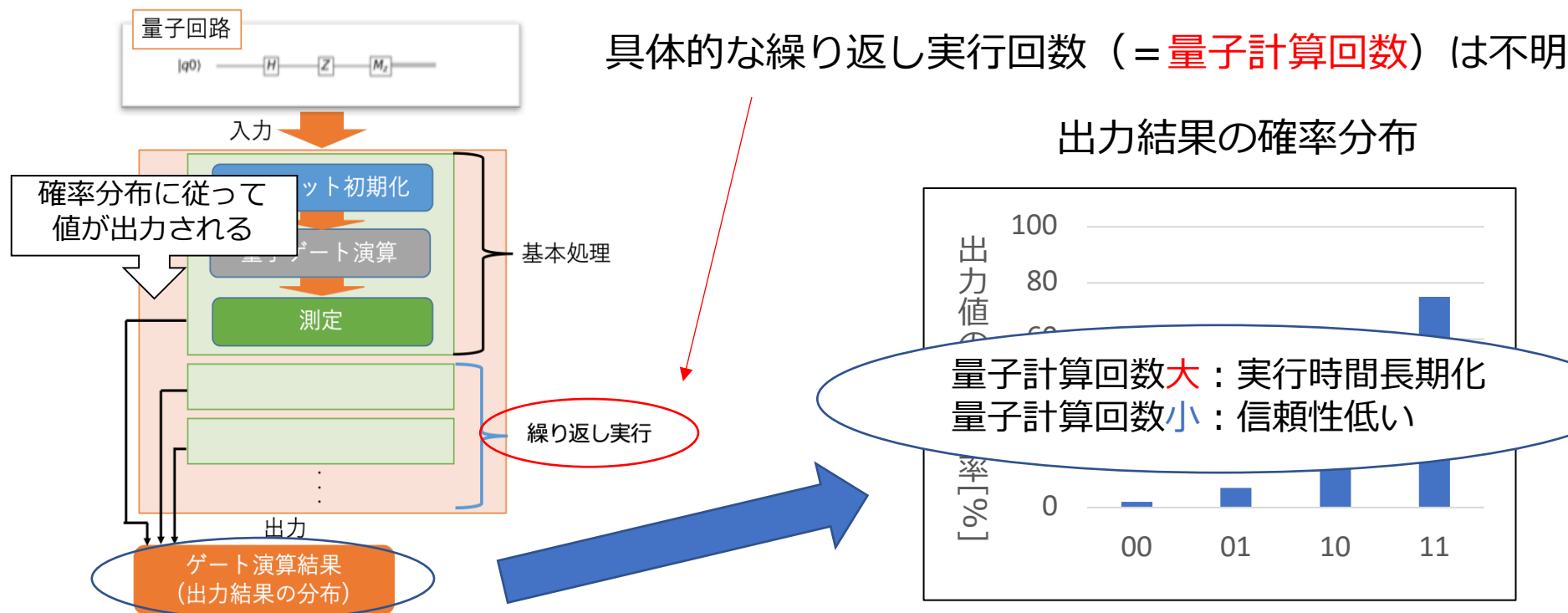
具体的な繰り返し実行回数 (= 量子計算回数) は不明

出力結果の確率分布



# 量子ゲート方式コンピュータ

- 新たなコンピュータとして量子ゲート方式コンピュータの実現が期待される
- 量子ゲート方式コンピュータの実行モデル



# これまでの取り組みと問題点

- 量子計算回数の決定方法・最小化方法の検討<sup>[1]</sup>
  - 量子計算回数を増やせば増やすほど確率分布の推定精度は向上
  - 必要十分な回数が分かれば、精度を維持しつつ実行時間を最小にできる
  - ベイズ推定を使った出力値の生起確率推定

## 問題点

単純なアルゴリズムを対象としたケーススタディに留まっており、  
実用レベルの複雑なアルゴリズムを対象としたケーススタディが不足している

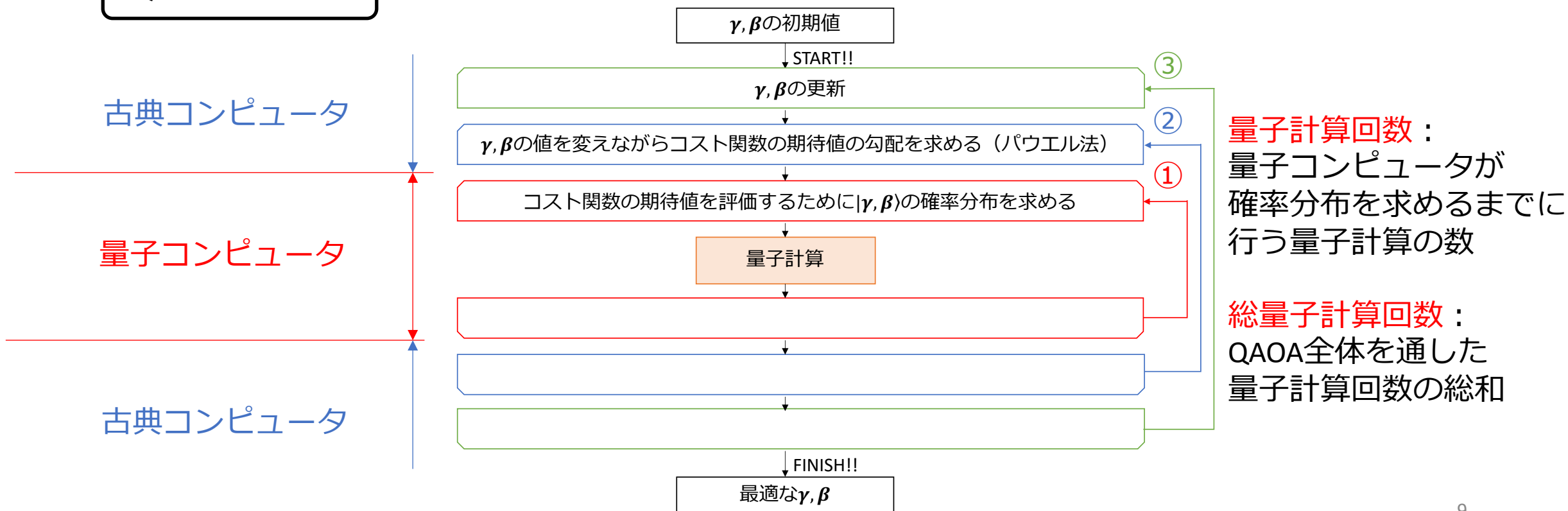


Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) への適用を考える

# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
  - 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
  - 問題を近似して、コスト関数を最小化するパラメータ $\gamma, \beta^{[1]}$ を見つける問題を解く
  - NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) コンピュータで計算することを前提に開発

## QAOAのフロー



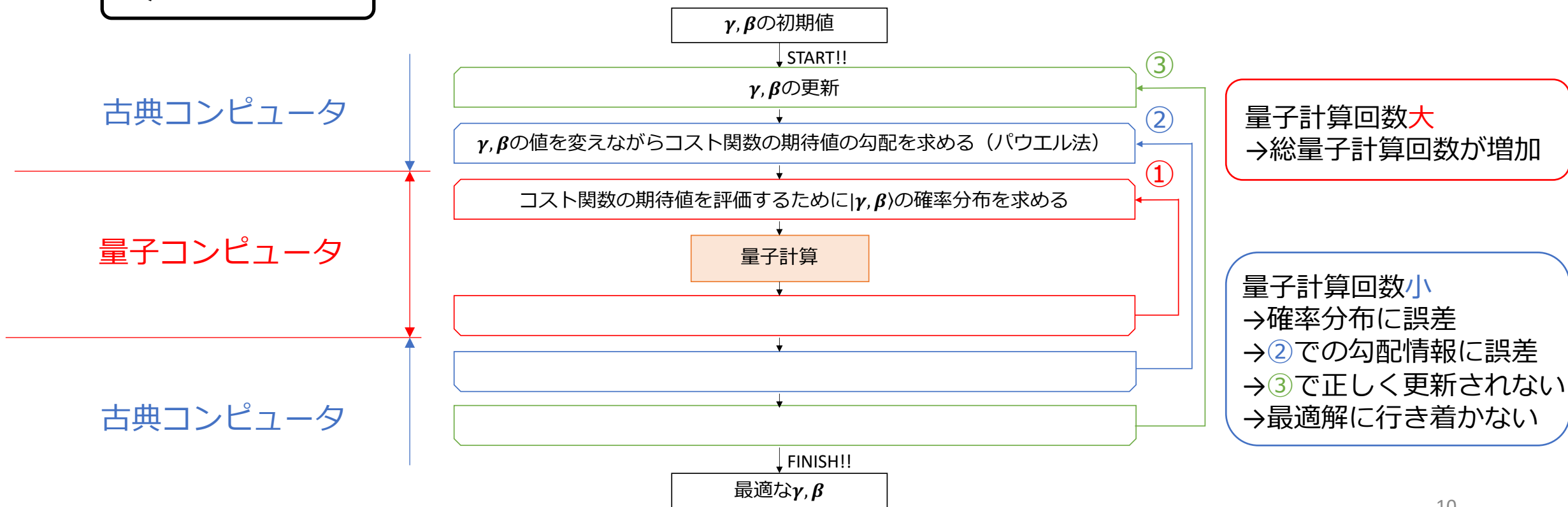
[1].  $\beta, \gamma$ は組み合わせ最適化問題を近似して量子回路に置き換える際に出てくるパラメータ



# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
  - 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
  - 問題を近似して、コスト関数を最小化するパラメータ $\gamma, \beta^{[1]}$ を見つける問題を解く
  - NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) コンピュータで計算することを前提に開発

## QAOAのフロー

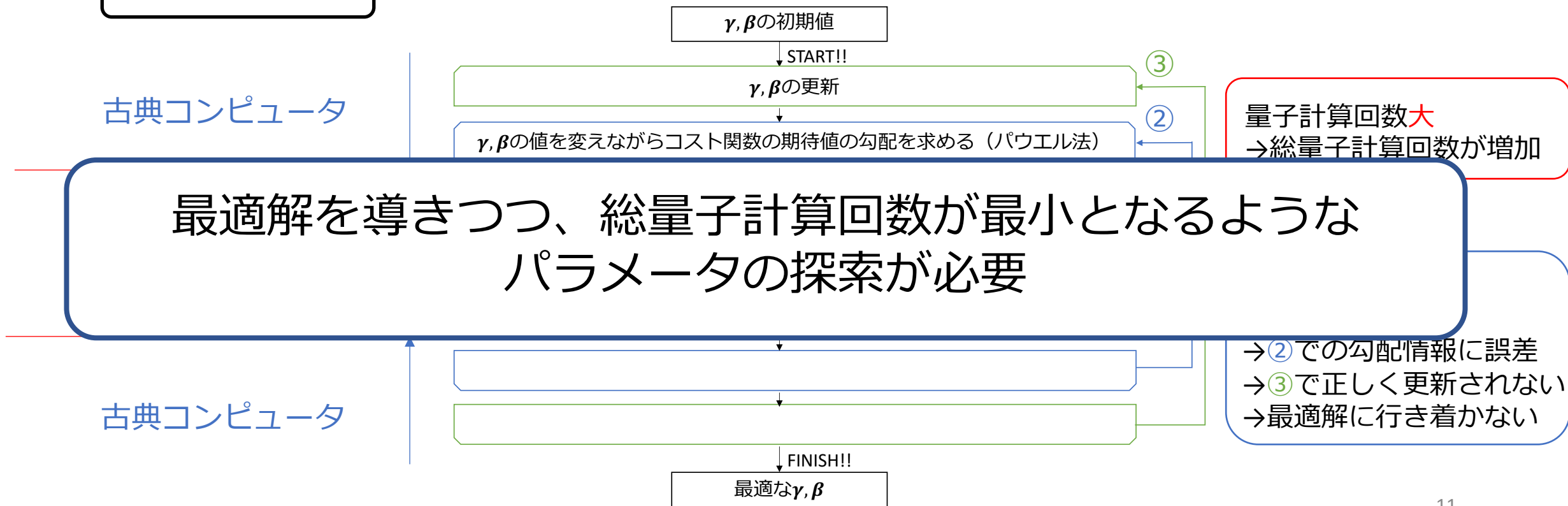


[1].  $\beta, \gamma$ は組み合わせ最適化問題を近似して量子回路に置き換える際に出てくるパラメータ

# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
  - 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
  - 問題を近似して、コスト関数を最小化するパラメータ $\gamma, \beta^{[1]}$ を見つける問題を解く
  - NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) コンピュータで計算することを前提に開発

## QAOAのフロー

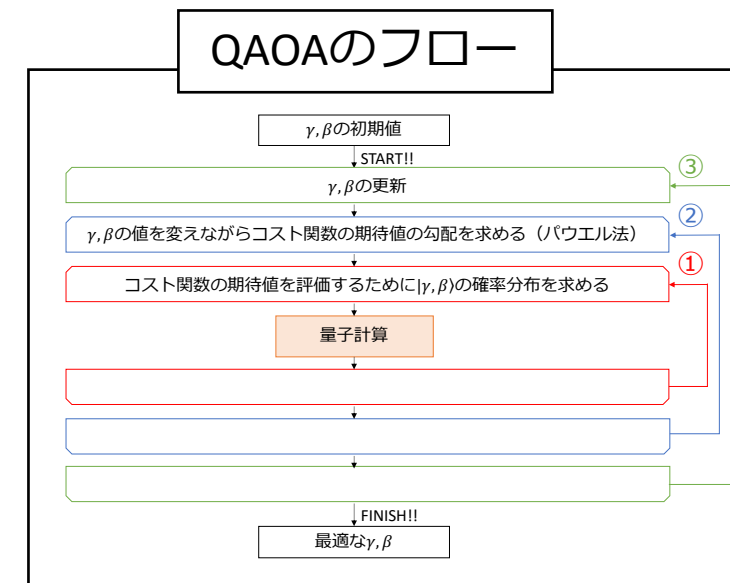


[1].  $\beta, \gamma$ は組み合わせ最適化問題を近似して量子回路に置き換える際に出てくるパラメータ

# 研究の課題と目的

## ・本研究における課題

- パラメータが多く存在  
(①～③の回数、分割数 $P^{[1]}$ など)
- それぞれの繰り返しが互いに与える影響が不明  
(①を少なくすると③が多くなる、など)
- NISQのエラー特性がQAOAの出力や①～③の回数に与える影響が不明



最適解を導きつつ、総量子計算回数が最小となるような  
パラメータの探索が難しい

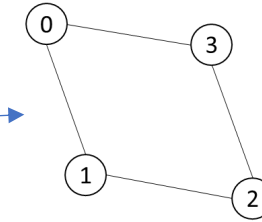
## 本研究の目的

# 量子計算回数（①の回数）とエラー特性がQAOAに与える影響の調査

# 実験方法

- 実験の各種条件

- 対象とした問題：MAXCUT問題
- 量子ビット数：4量子ビット
- 使用シミュレータ：Intel-QSを用いた自作Sim<sup>[1]</sup>
- 考慮したエラー
  - 初期化エラー（Passive reset, Post-selection<sup>[2]</sup>）
  - デコヒーレンス緩和
  - 読み出しエラー
- エラーに関するパラメータ
- $\beta, \gamma$ の初期値：0.1
- P（分割数）：1



デコヒーレンス緩和			
$T_1$		$48.7 \mu s$	
$T_2$		$30.2 \mu s$	
1 量子ビットゲート遅延		$50 ns$	
2 量子ビットゲート遅延		$430 ns$	
基本ゲート		$CNOT, R_X, R_Y, R_Z$	
初期化時の忠実度			
passive reset		93.3%	
passive reset + post-selection		99.8%	
読み出し時の忠実度			
		読み出し後の値	
		$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
読み出し前の値	$ 0\rangle$	99.8%	0.2%
	$ 1\rangle$	2.2%	97.8%

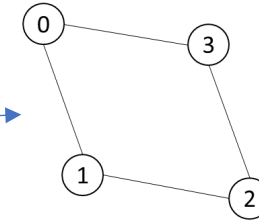
[1]. Tanimoto T, Matsuo S, Kawakami S, Tabuchi Y, Hirokawa M and Inoue K: Practical error modeling toward realistic NISQ simulation, ISVLSI (2020).

[2]. Kono, S., Koshino, K., Tabuchi, Y., Noguchi, A. and Nakamura, Y.: Quantum non-demolition detection of an itinerant microwave photon, Nature Physics, Vol. 14, No. 6, pp. 546–549 (2018).

# 実験方法

## • 実験の各種条件

- 対象とした問題：MAXCUT問題
- 量子ビット数：4量子ビット
- 使用シミュレータ：Intel-QSを用いた自作Sim<sup>[1]</sup>
- 考慮したエラー
  - 初期化エラー（Passive reset, Post-selection<sup>[2]</sup>）
  - デコヒーレンス緩和
  - 読み出しエラー
- エラーに関するパラメータ
- $\beta, \gamma$ の初期値：0.1
- P（分割数）：1



デコヒーレンス緩和			
$T_1$		$48.7\ \mu s$	
$T_2$		$30.2\ \mu s$	
1 量子ビットゲート遅延		$50\ ns$	
2 量子ビットゲート遅延		$430\ ns$	
基本ゲート		$CNOT, R_X, R_Y, R_Z$	
初期化時の忠実度			
passive reset		93.3%	
passive reset + post-selection		99.8%	
読み出し時の忠実度			
		読み出し後の値	
		$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
読み出し前の値	$ 0\rangle$	99.8%	0.2%
	$ 1\rangle$	2.2%	97.8%

量子計算回数

$\left[ \begin{array}{cc} 16 & 512 \\ 32 & 1024 \\ 64 & 2048 \\ 128 & 4096 \\ 256 & 8192 \end{array} \right]$

エラー有無

$\times \left[ \begin{array}{l} \text{理想状態 (ideal)} \\ \text{デコヒーレンス緩和のみ考慮 (decohe)} \\ \text{エラーあり [passive reset] (all-passive)} \\ \text{エラーあり [post-selection] (all-postsel)} \end{array} \right]$

→ 40パターンをそれぞれ1024回実験  
その平均を結果とする

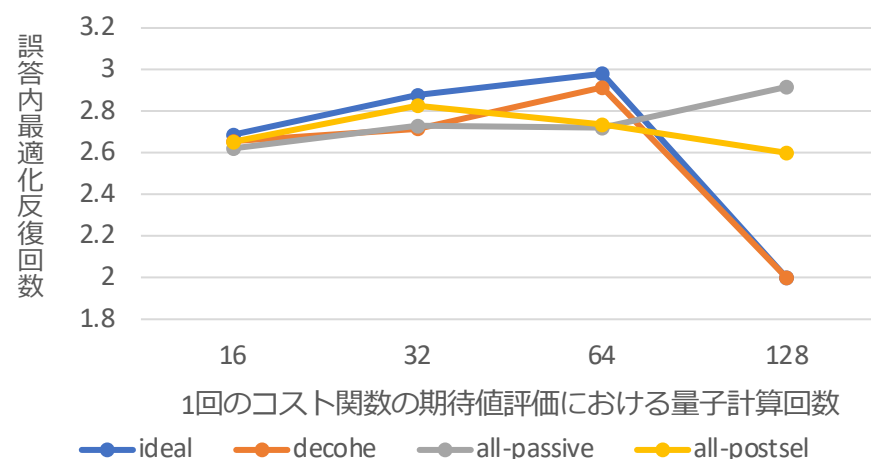
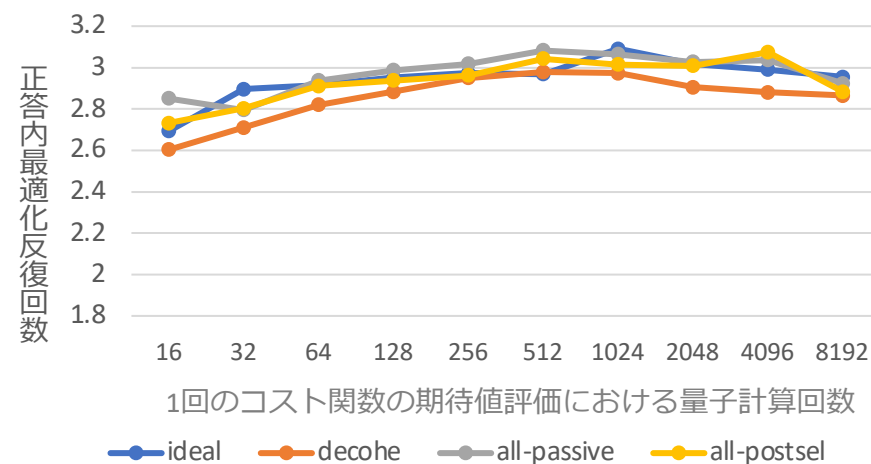
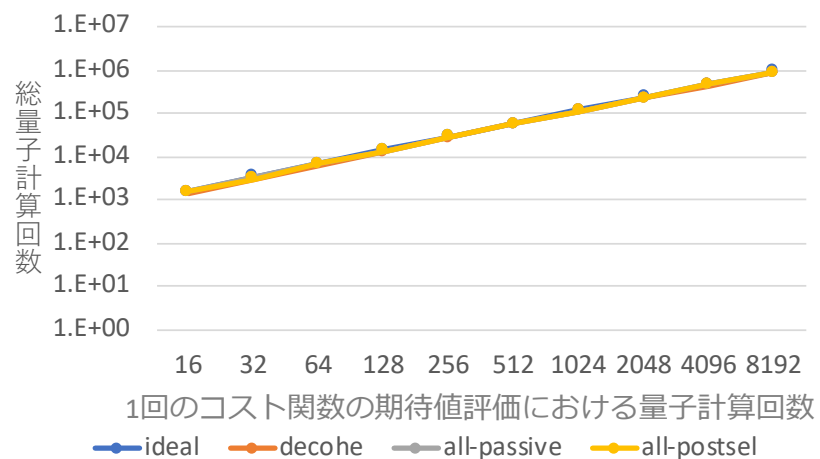
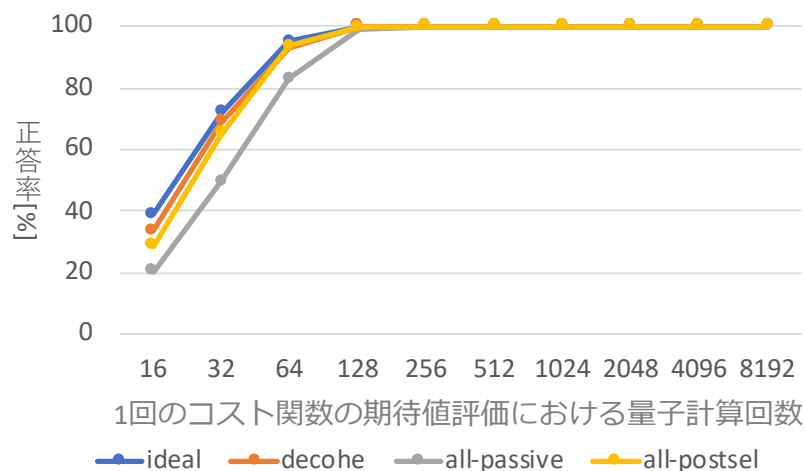
[1]. Tanimoto T, Matsuo S, Kawakami S, Tabuchi Y, Hirokawa M and Inoue K: Practical error modeling toward realistic NISQ simulation, ISVLSI (2020).

[2]. Kono, S., Koshino, K., Tabuchi, Y., Noguchi, A. and Nakamura, Y.: Quantum non-demolition detection of an itinerant microwave photon, Nature Physics, Vol. 14, No. 6, pp. 546–549 (2018).

# 実験内容と結果

実験内容：

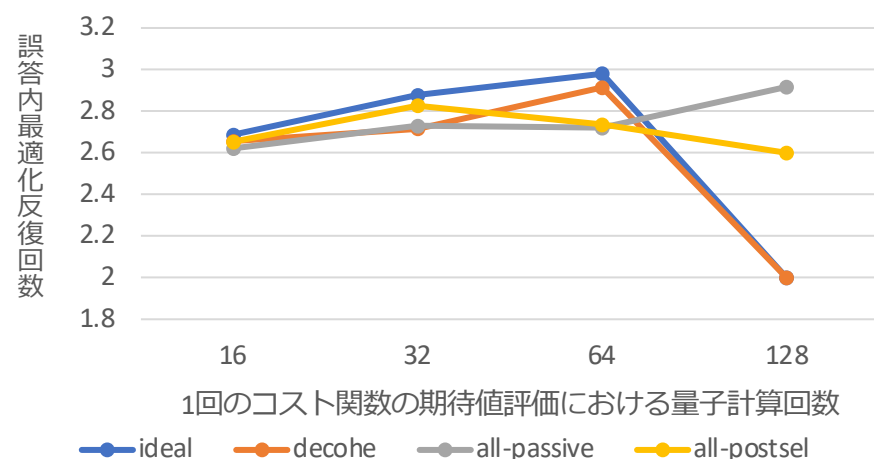
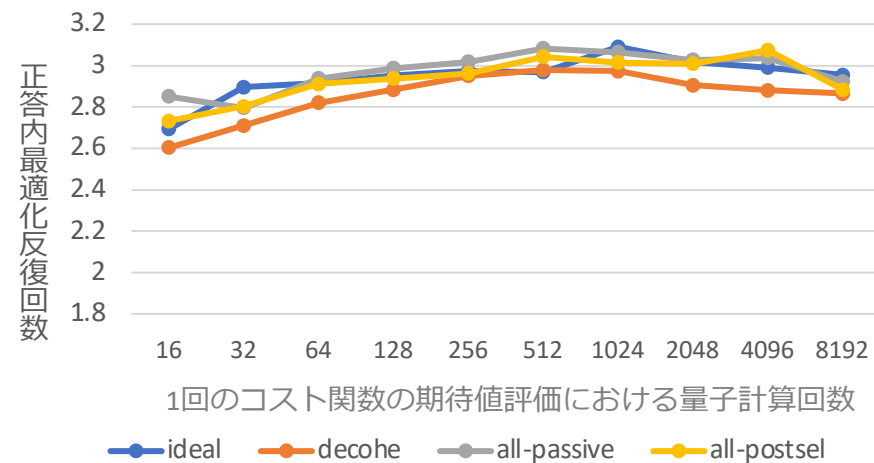
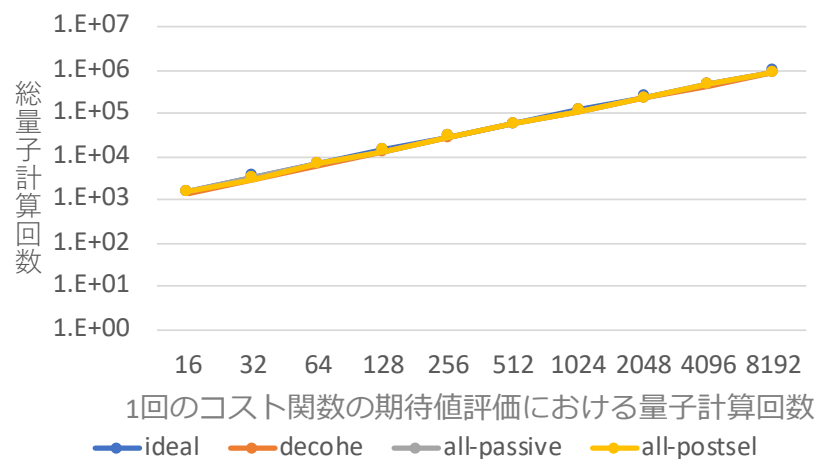
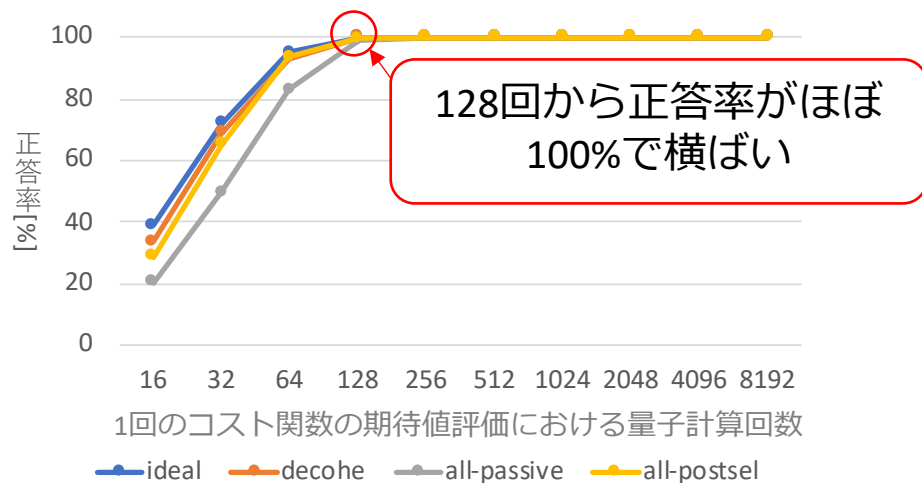
量子計算回数とエラーの有無を変化させながら、QAOAの正答率や最適化反復回数（ $\gamma, \beta$ 更新の回数）、総量子計算回数を調査し関係性を分析



# 実験内容と結果

実験内容：

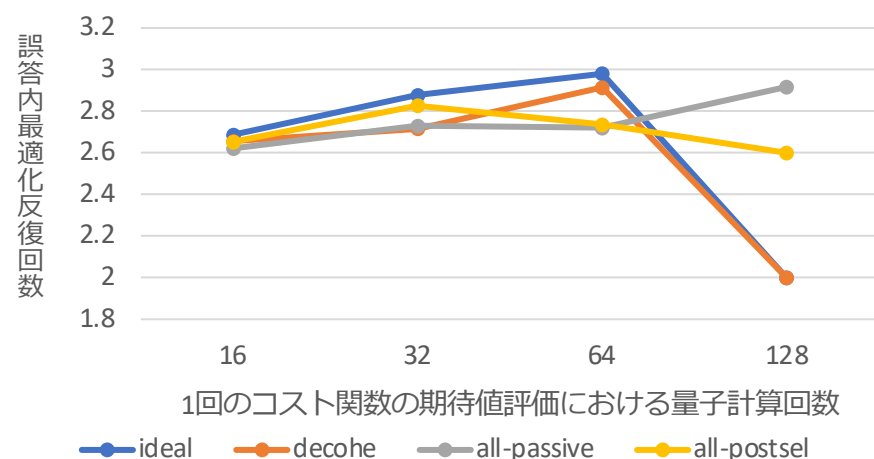
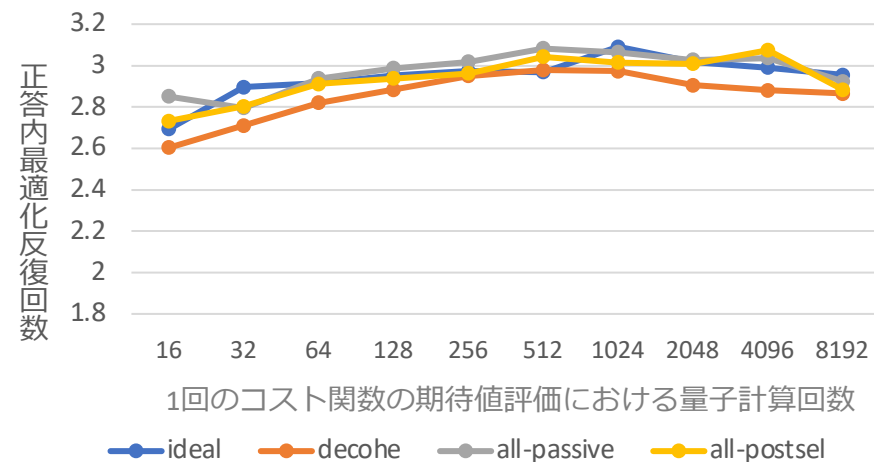
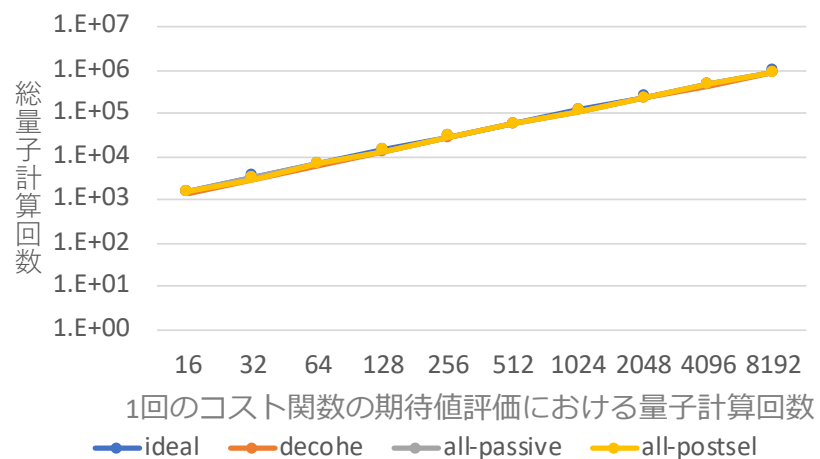
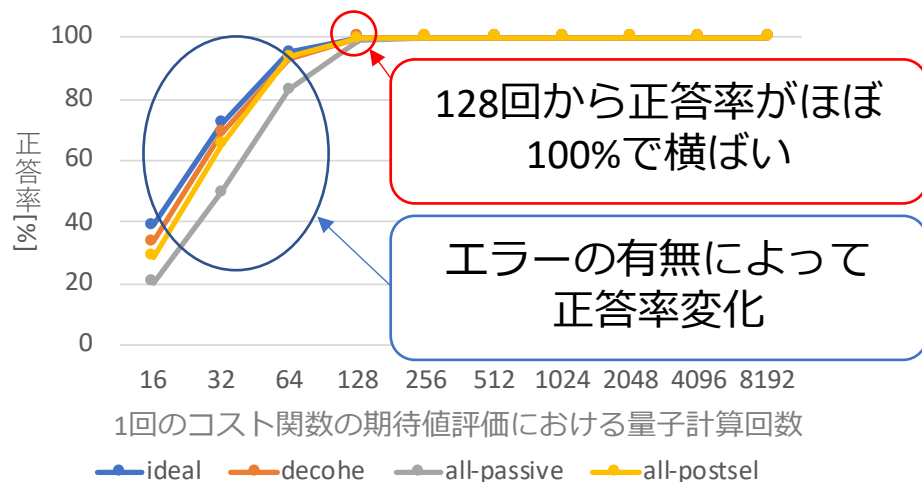
量子計算回数とエラーの有無を変化させながら、QAOAの正答率や最適化反復回数（ $\gamma, \beta$ 更新の回数）、総量子計算回数を調査し関係性を分析



# 実験内容と結果

## 実験内容：

量子計算回数とエラーの有無を変化させながら、QAOAの正答率や最適化反復回数（ $\gamma, \beta$ 更新の回数）、総量子計算回数を調査し関係性を分析

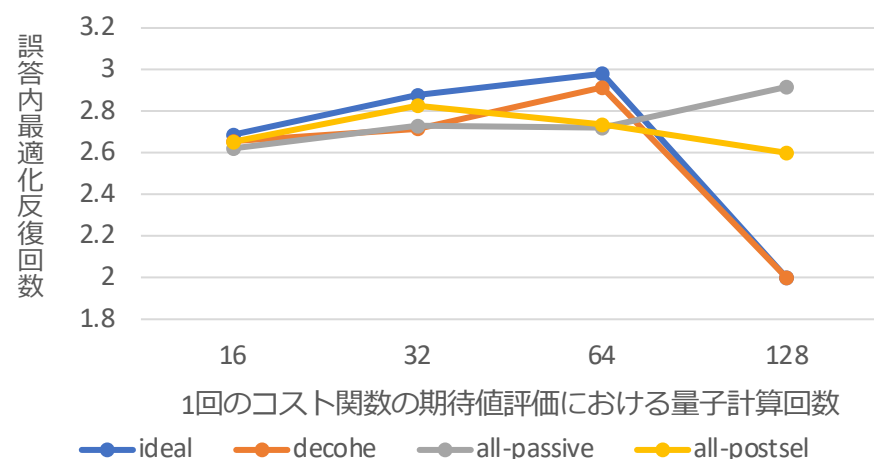
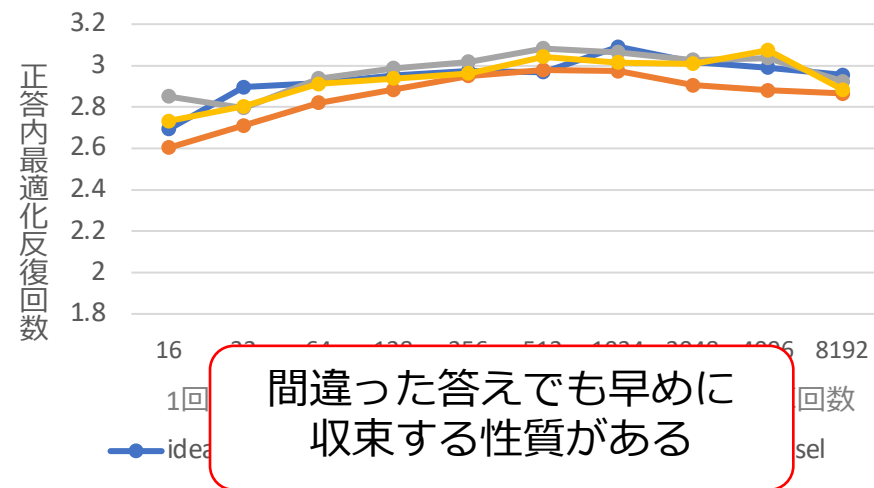
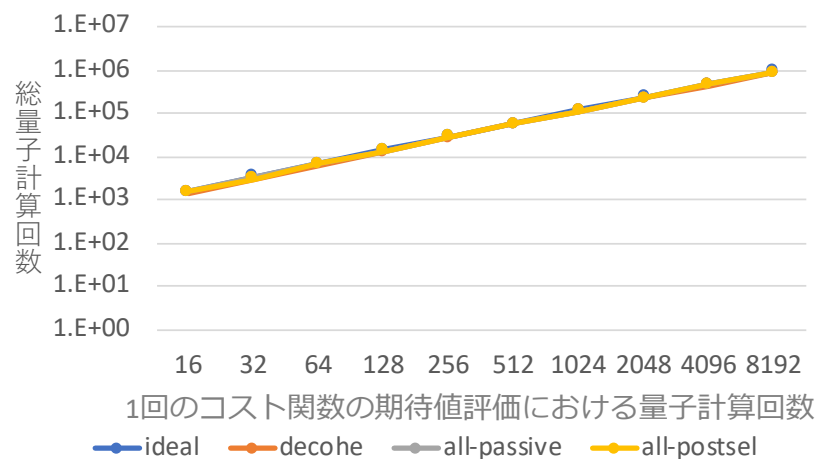
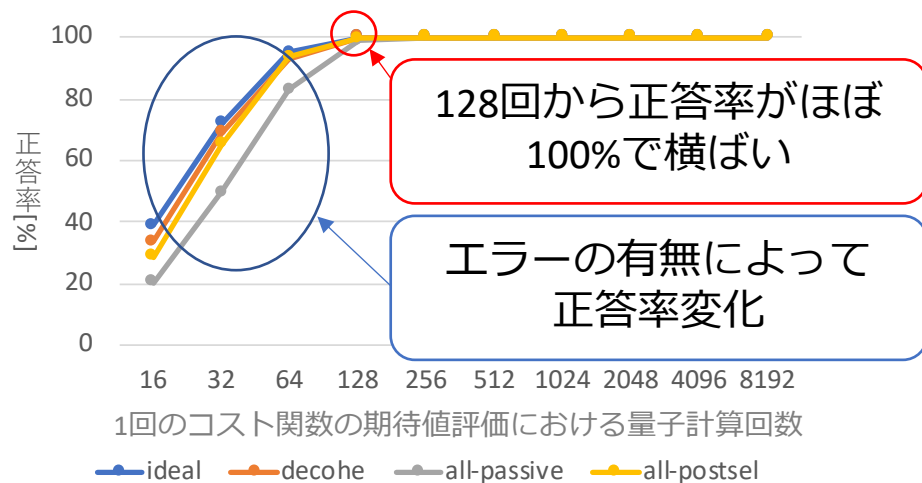




# 実験内容と結果

## 実験内容：

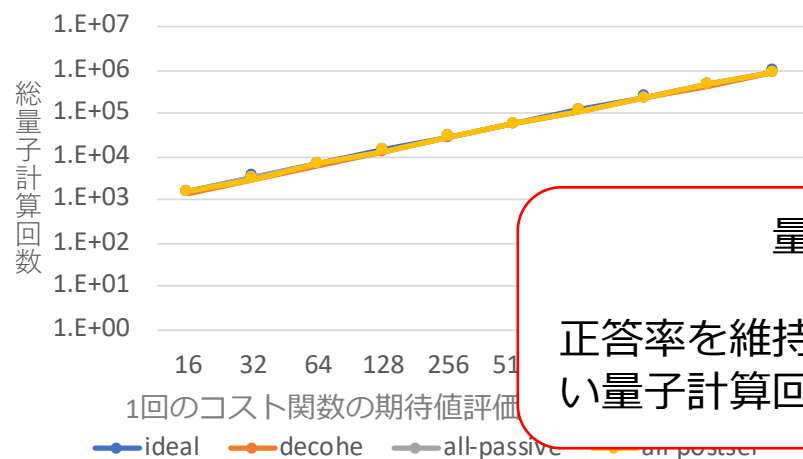
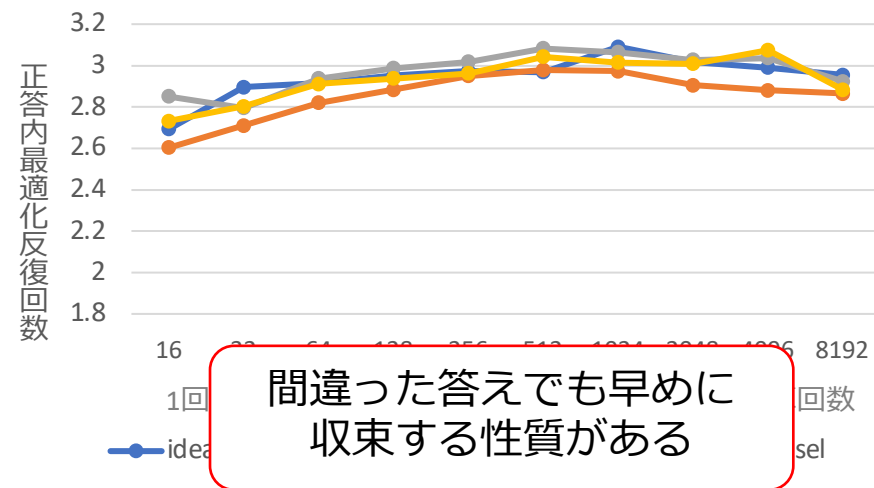
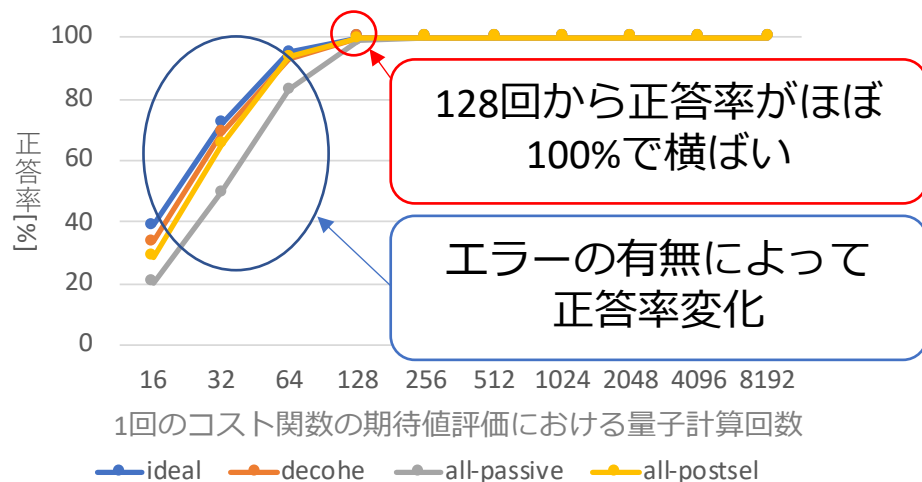
量子計算回数とエラーの有無を変化させながら、QAOAの正答率や最適化反復回数（ $\gamma, \beta$ 更新の回数）、総量子計算回数を調査し関係性を分析



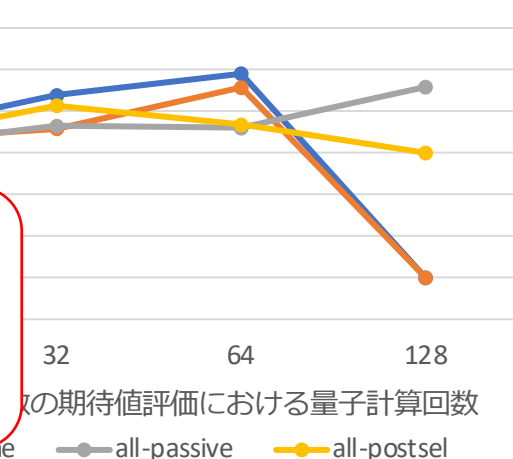
# 実験内容と結果

実験内容：

量子計算回数とエラーの有無を変化させながら、QAOAの正答率や最適化反復回数（ $\gamma, \beta$ 更新の回数）、総量子計算回数を調査し関係性を分析



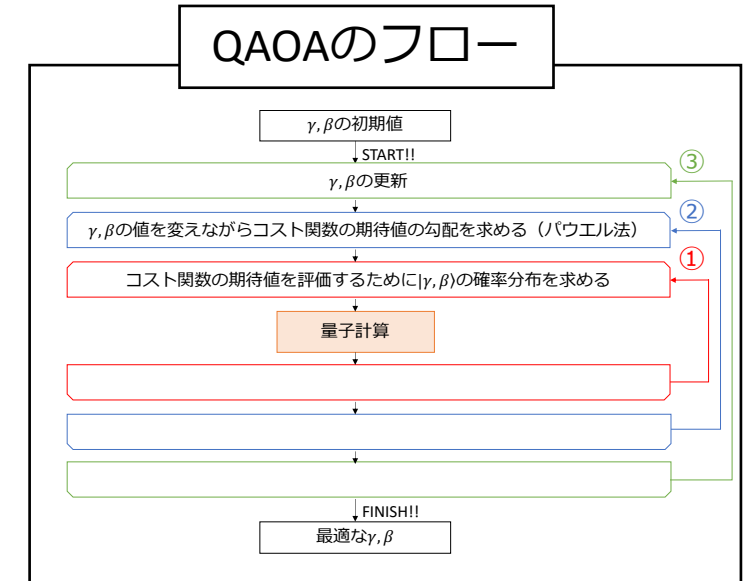
正答率を維持できる範囲でできるだけ少ない量子計算回数を採用することが望ましい



# 考察

## • 考察

- 量子計算回数を少なくすると正答率が悪化し、多くしすぎると無駄な量子計算が増加する
- エラーの有無は正答率にのみ影響する
- 実機を用いた実行においても最適な量子計算回数が存在する可能性がある
- ③は量子計算回数によって変化せず、最適化手法に依存している可能性がある  
→②、③の回数を今後調査する際は最適化手法もパラメータとして考慮すべき



# 終わりに

本研究では実アプリケーションであるQuantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) を対象に、量子計算回数とエラー特性の影響を調査



- エラーの有無は正答率にのみ影響する
- 今回の実装では、量子計算回数はその他の繰り返し回数に影響を及ぼさない
- 最適な量子計算回数が存在する

## 今後の課題

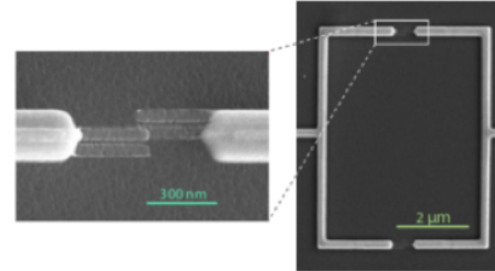
- 分割数 $P$ や $\gamma, \beta$ の初期値などをパラメータに加えて正答率や最適化反復回数、総量子計算回数の調査
- 最適化手法をパラメータに加えて正答率や最適化反復回数、総量子計算回数の調査
- 問題サイズを大きくして同様の実験
- MAXCUT問題以外の問題を対象とした実験



# 背景

- 量子ゲート方式コンピュータ
  - 基本デバイス：量子ビット

超伝導量子ビット[1]



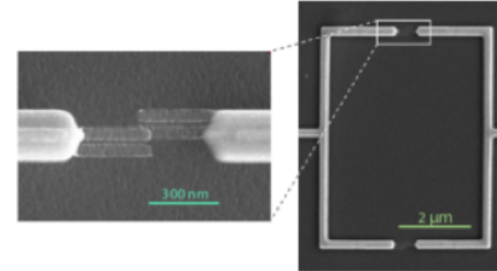
[1]X. Fu, et al,“An Experimental Microarchitecture for a Superconducting quantum Processor,” MICRO’50

# 背景

- 量子ゲート方式コンピュータ
  - 基本デバイス：量子ビット

近い将来  
実用化

超伝導量子ビット[1]



注目を集める

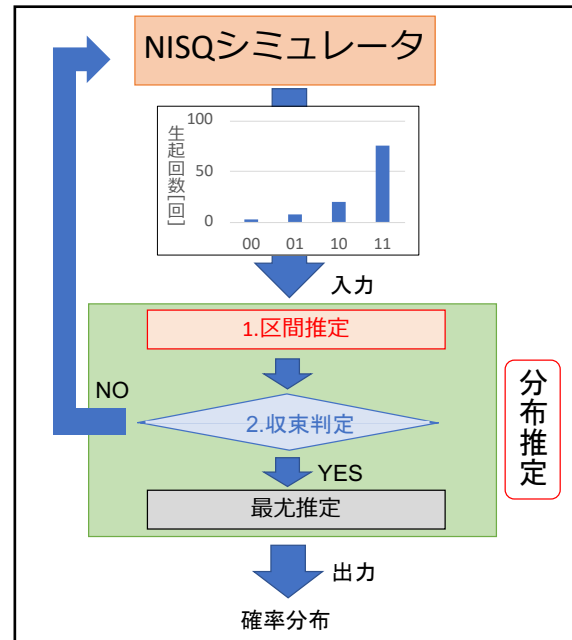
- NISQ**(Noisy Intermediate-Scale Quantum)コンピュータ
  - ノイズの影響に起因するエラーの修正を行わない
  - 量子ビット数が小・中規模（数十～数百）

[1]X. Fu, et al, "An Experimental Microarchitecture for a Superconducting Quantum Processor," MICRO'50

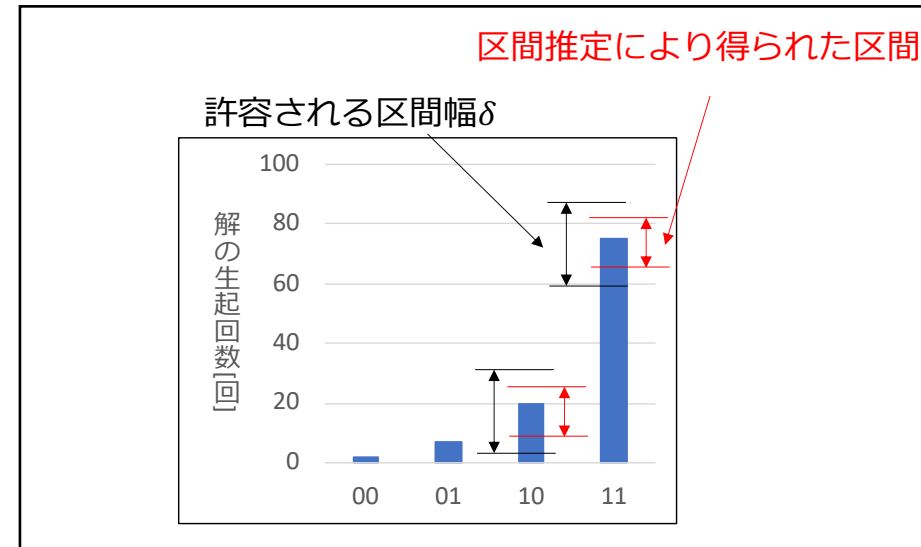
# これまでの取り組み

- NISQの繰り返し実行回数を決める手法である「量子計算回数決定法」をこれまでに提案
  1. **区間推定**：  
ベイズ推定を用いて各確率の確信区間を求める
  2. **収束判定**：  
導出した確信区間が許容幅より小さくなれば収束と判定

「量子計算回数決定法」の概略図



収束判定のイメージ図





# 本研究の目的

## 研究の目的

実アプリケーションである  
Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) を対象に、  
量子計算回数決定法を適用するための初期検討を行う

## 本研究のポイント

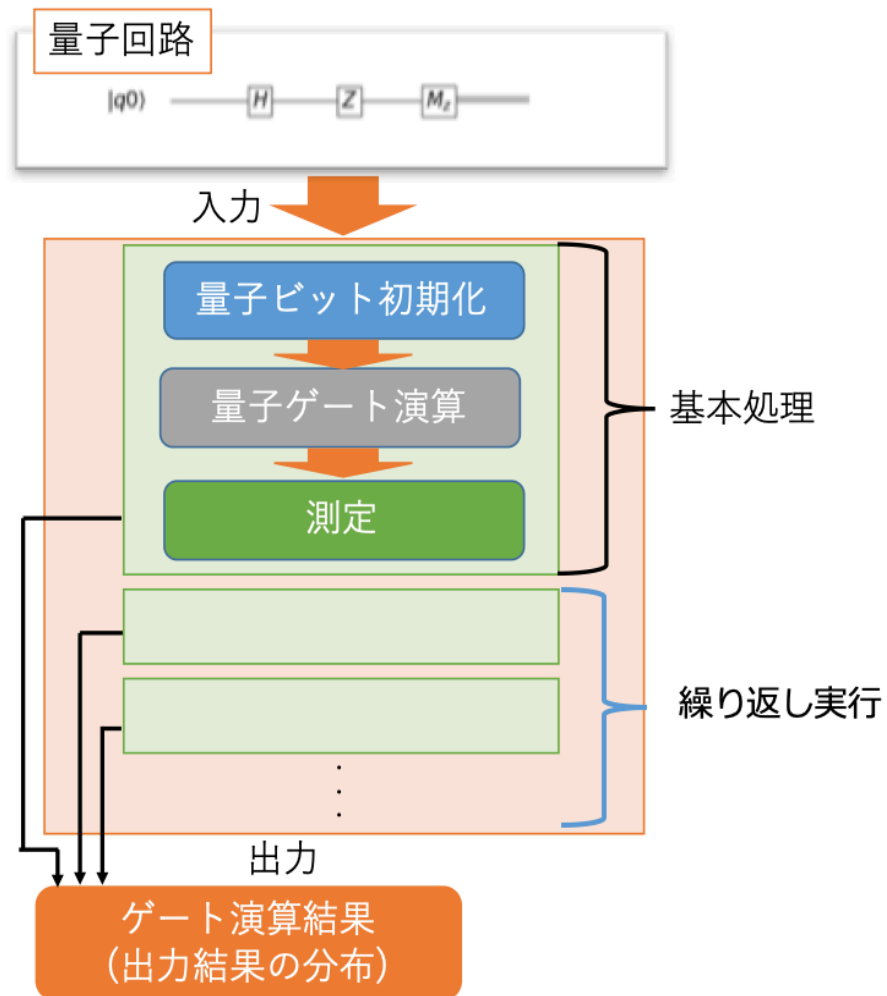
- 量子計算回数や量子ビットのノイズがQAOAの実行挙動に大きな影響を与える可能性の有無を調べたい
- NISQのエラー特性と最適化アルゴリズムに内在するロバスト性の関係性を分析したい

## アプローチ

- 量子計算回数およびエラー特性がQAOAに与える影響を分析
- 最適な量子計算回数やエラーの影響の有無、QAOAに大きな影響を与えるパラメータの調査を行う

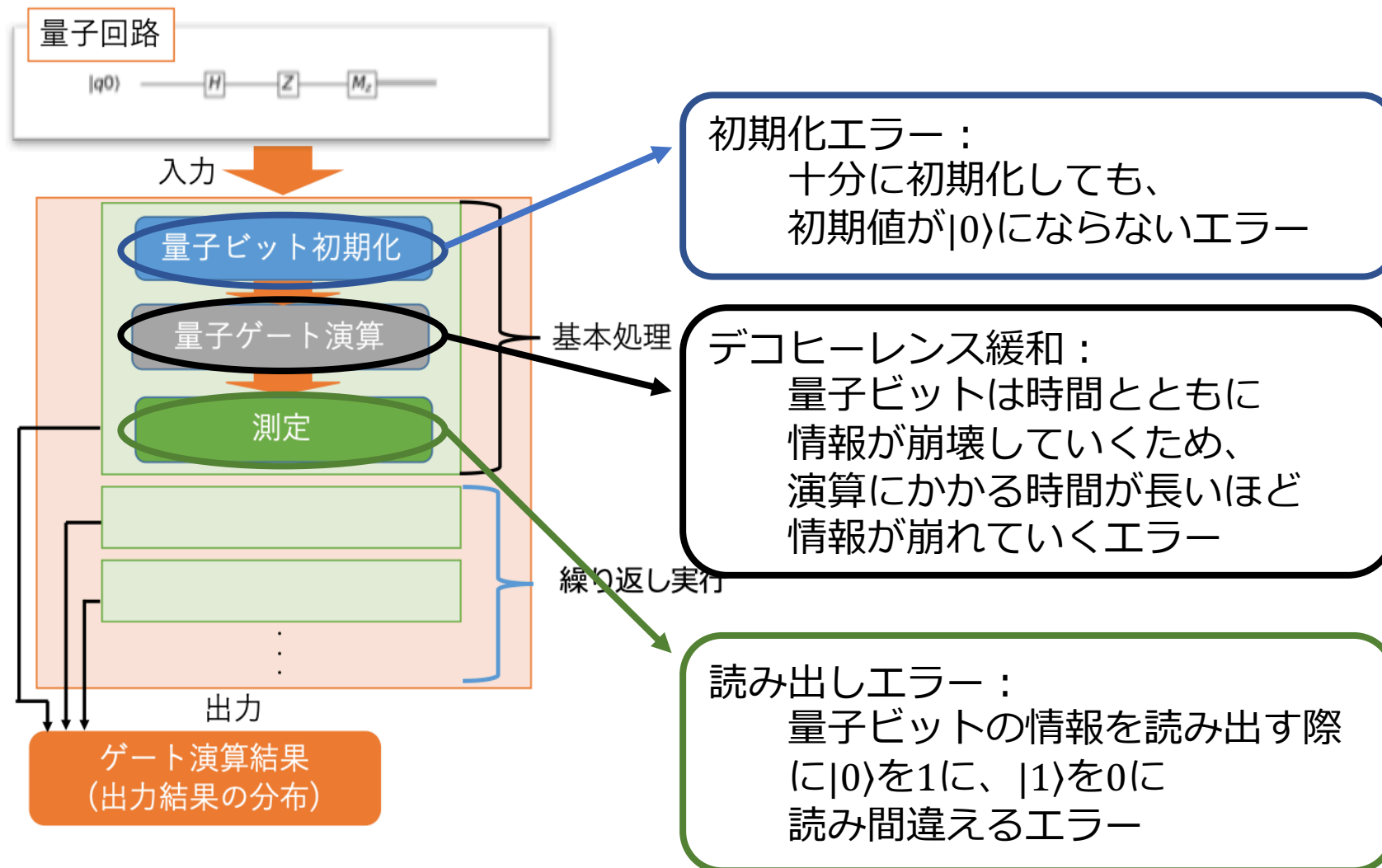
# NISQにおけるエラー

## NISQの実行モデル



# NISQにおけるエラー

## NISQの実行モデル



※  $| \rangle$  をケット記号と呼び、量子状態を表す

# エラーモデルの概要 (初期化エラー)

- 量子ビット初期化方法
  - 量子ビットの状態が時間とともに $|0\rangle$ に近づいていく特性を利用して、時間経過により $|0\rangle$ に初期化する



しかし...

この方法では完全な $|0\rangle$ 状態にはならず、混合状態と呼ばれる  
いろんな状態が混ざり合った状態に収束する

- 考慮した初期化手法は2種類
  - Passive reset : 忠実度<sup>1</sup> 93.3%
  - Post-selection : 忠実度<sup>1</sup> 99.8%

# エラーモデルの概要 (初期化エラー)

- 初期化エラーモデル
  - 初期化後にとり得る状態それぞれが従う出現確率をもとに初期化後の状態を選択して演算を行う

例) 2量子ビットの場合

初期化後にとり得る状態は $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ の4状態



それぞれの状態になる確率は $\{87.0\%, 6.3\%, 6.3\%, 0.4\%\}$

$$0.933 \times 0.933$$

$$0.933 \times 0.067$$

上記確率に従って初期化後の状態を決定し、演算を行う

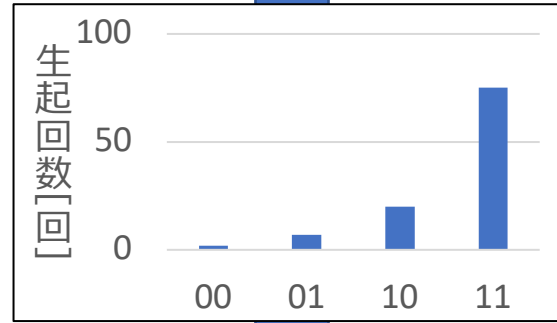
# エラーモデルの概要 (読み出しエラー)

- 読み出しエラー
  - 量子ビットを測定する際に $|0\rangle$ を $|1\rangle$ に、 $|1\rangle$ を $|0\rangle$ に読み間違えるエラー

表：読み出しエラーの忠実度

		測定される値	
		$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
量子ビットの 状態	$ 0\rangle$	99.8%	0.2%
	$ 1\rangle$	2.2%	97.8%

# NISQシミュレータ



入力

1.ベイズ推定を用いた区間推定

NO

2.収束判定

YES

最尤推定

分布推定

出力

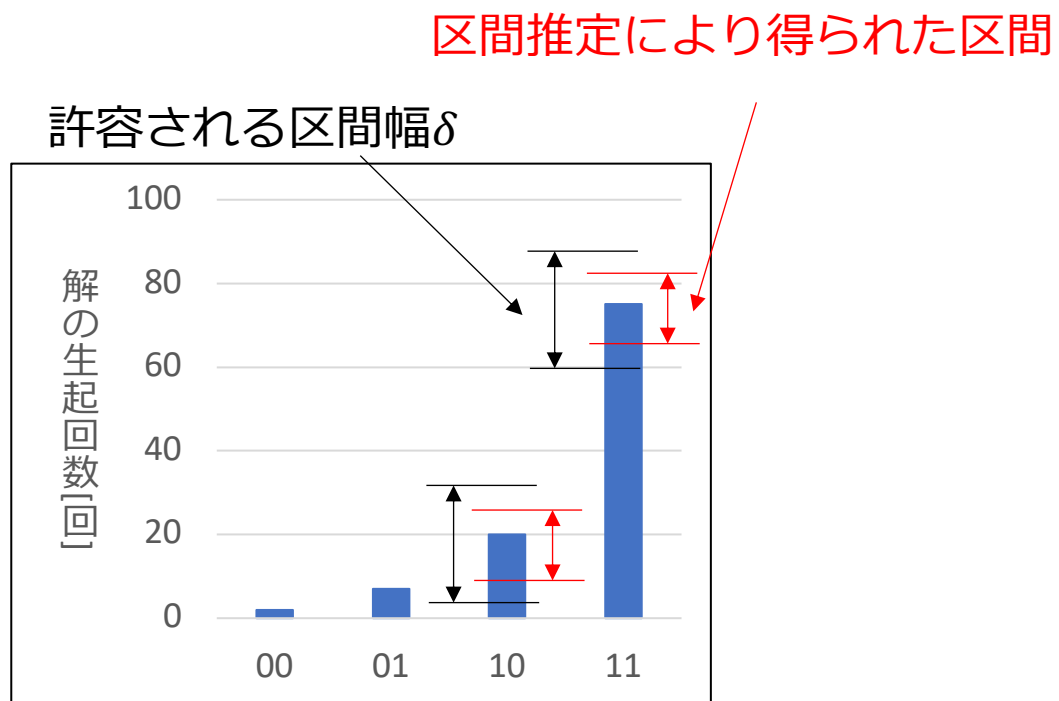
確率分布

# 分布の収束判定

## 分布の収束判定

- 許容される区間幅を $\delta$ とし、この $\delta$ を設計する
- 許容区間幅よりも推定された区間が小さいか判定
- 全ての推定された区間が小さければ分布が収束したとみなす

例)





# QAOA について

考えるハミルトニアン（量子断熱計算と同様）

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{t_f}\right) H_r + \frac{t}{t_f} H_c$$

リファレンスハミルトニアン  
(自明な基底状態を持つ)

コストハミルトニアン  
(求めたい解を基底状態に持つ)

解くべき問題

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H(t) |\psi\rangle$$

その解

$$|\psi\rangle = e^{-i \frac{\int_0^t H(t) dt}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

# QAOA について

$p$ ステップに離散化して積分

$$|\psi(t_p)\rangle \approx e^{-i\frac{H(t_p)}{\hbar}t_p} e^{-i\frac{H(t_{p-1})}{\hbar}t_{p-1}} \dots e^{-i\frac{H(t_1)}{\hbar}t_1} |\psi(0)\rangle \rightarrow U(t_p)|\psi(0)\rangle$$

トロッター分解により

$$e^{-i\frac{H(t_i)}{\hbar}t_i} \approx e^{-i\frac{1}{p}\left(1-\frac{t_i}{t_f}\right)H_r t_i} e^{-i\frac{1}{p}\frac{t_i}{t_f}H_c t_i} = e^{-i\beta_i H_r} e^{-i\gamma_i H_c}$$

ただし、 $\hbar = 1$

ユニタリ行列

ただし、 $\beta_p = \frac{1}{p}\left(1-\frac{t_p}{t_f}\right)t_p, \gamma_p = \frac{1}{p}\frac{t_p}{t_f}t_p$

$$U(t_p) = e^{-i\beta_p H_r} e^{-i\gamma_p H_c} e^{-i\beta_{p-1} H_r} e^{-i\gamma_{p-1} H_c} \dots e^{-i\beta_1 H_r} e^{-i\gamma_1 H_c}$$

$$|\beta, \gamma\rangle = |\psi(t_p)\rangle = U_X(\beta_p)U_C(\gamma_p)U_X(\beta_{p-1})U_C(\gamma_{p-1}) \dots U_X(\beta_1)U_C(\gamma_1)|s\rangle$$

$$\text{ただし、 } U_X(\beta_i) = e^{-i\beta_i H_r}, U_C(\gamma_i) = e^{-i\gamma_i H_c}$$

$$|s\rangle = |+\rangle^{\otimes n} \quad (|0\rangle\text{の全ビットに}H\text{ゲートをかけたもの})$$

# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
  - 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
  - NISQコンピュータで計算することを前提に開発
- QAOAのフロー（最適化問題のコスト関数を $C(z)$ と定義）
  1. 量子コンピュータ上で重ね合わせ状態を作る
  2. パラメータ $\beta, \gamma^{[1]}$ に応じて、問題を表す量子回路 $U_c(\gamma), U_x(\beta)^{[2]}$ を作用させる（その後の状態を $|\gamma, \beta\rangle$ とする）
  3.  $|\gamma, \beta\rangle$ の観測値からコスト関数 $C(z)$ の期待値を算出
  4.  $\gamma, \beta$ の値を振りながら1~3を繰り返し、 $C(z)$ の期待値の勾配情報を求める（パウエル法）
  5. 4の勾配情報をもとに $\gamma, \beta$ を更新しながら、1~4を繰り返す
  6. コスト関数の期待値を最小化するパラメータ $\gamma^*, \beta^*$ が求まる

# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
  - 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
  - NISQコンピュータで計算することを前提に開発
- QAOAのフロー（最適化問題のコスト関数を $C(z)$ と定義）
  1. 量子コンピュータ上で重ね合わせ状態を作る
  2. パラメータ $\beta, \gamma^{[1]}$ に応じて、問題を表す量子回路 $U_c(\gamma), U_x(\beta)^{[2]}$ を作用させる（その後の状態を $|\gamma, \beta\rangle$ とする）
  3.  $|\gamma, \beta\rangle$ の観測値からコスト関数 $C(z)$ の期待値を算出
  4.  $\gamma, \beta$ の値を振りながら1~3を繰り返し、 $C(z)$ の期待値の勾配情報を求める（パウエル法）
  5. 4の勾配情報をもとに $\gamma, \beta$ を更新しながら、1~4を繰り返す
  6. コスト関数の期待値を最小化するパラメータ $\gamma^*, \beta^*$ が求まる




$|\gamma^*, \beta^*\rangle$ を測定することで最適な組み合わせが求まる

# QAOA概要

- Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

- 組み合わせ最適化問題を解く近似アルゴリズム
- 問題を近似して量子回路に落とし込む

- QAOAのフロー（最適化問題のコスト関数を $C(z)$ と定義）

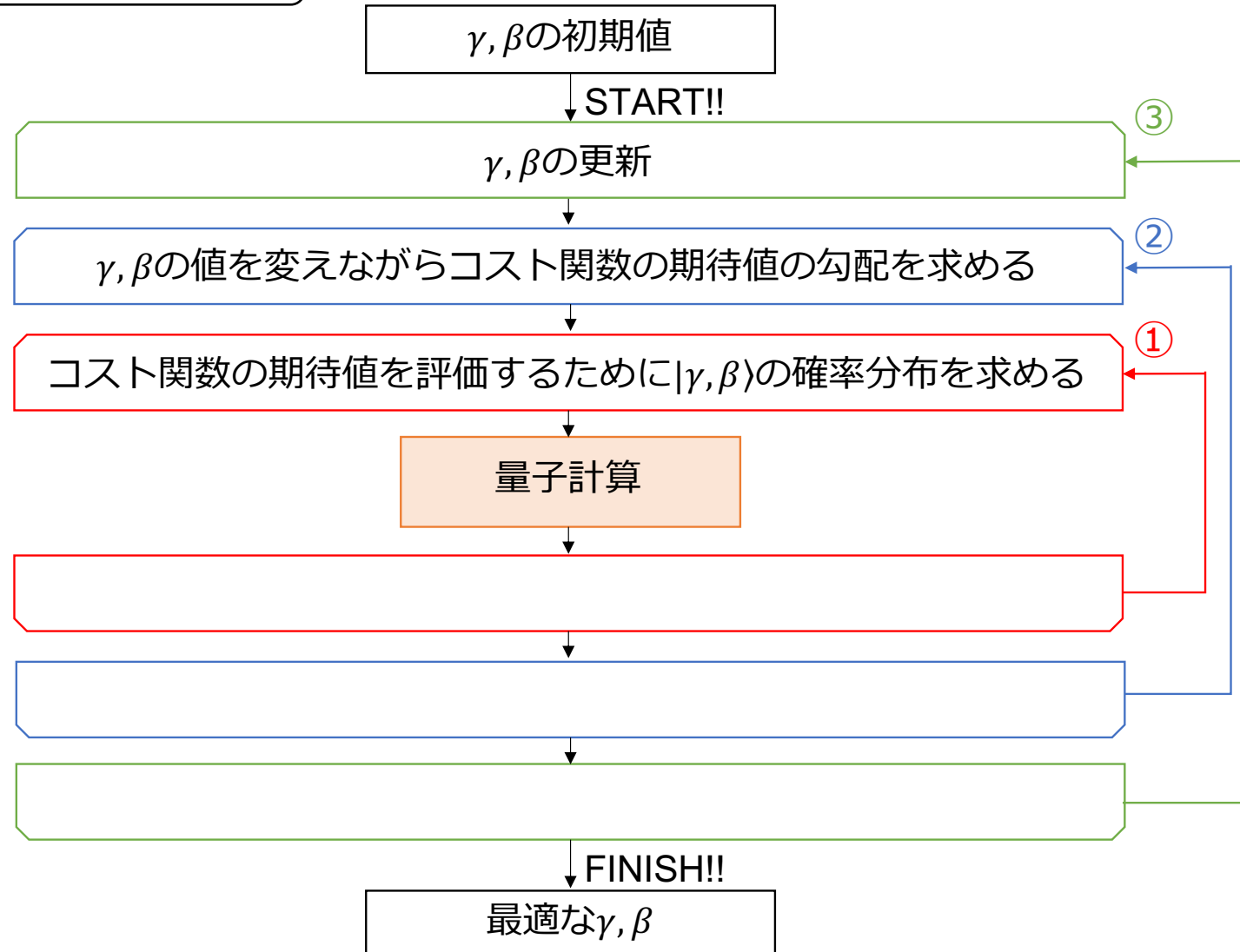
- 
1. 量子コンピュータ上で重ね合わせ状態を作る
  2. パラメータ $\gamma, \beta^{[1]}$ と分割数 $p$ に応じて、問題を表す量子回路 $U_c(\gamma), U_x(\beta)^{[2]}$ を作用させる（その後の状態を $|\gamma, \beta\rangle$ とする）
  3.  $|\gamma, \beta\rangle$ の観測値からコスト関数 $C(z)$ の期待値を算出
  4.  $\gamma, \beta$ の値を振りながら1~3を繰り返し、 $C(z)$ の期待値の勾配情報を求める
  5. 4の勾配情報をもとに $\gamma, \beta$ を更新しながら、1~4を繰り返す
  6. コスト関数の期待値を最小化するパラメータ $\gamma^*, \beta^*$ が求まる

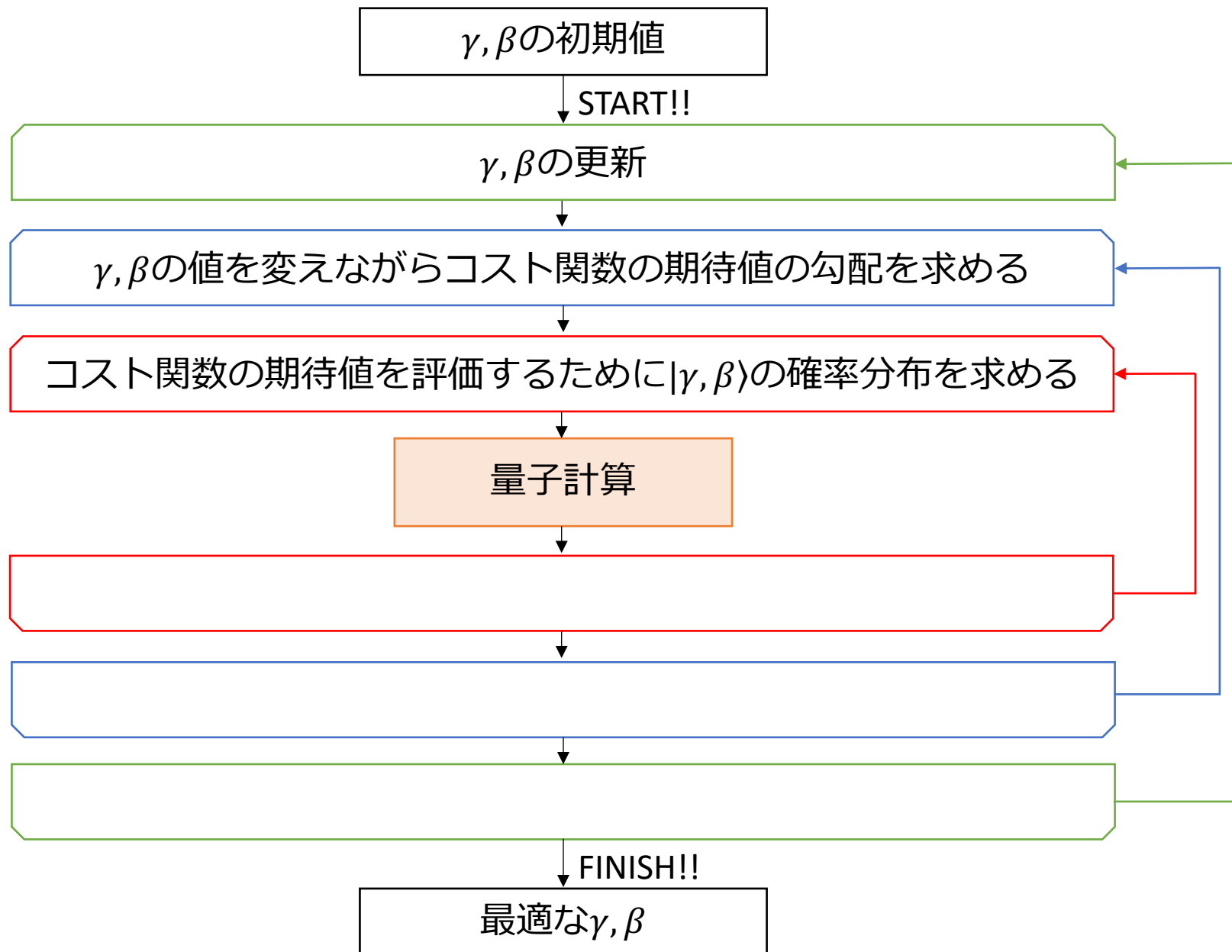
[1].  $\beta, \gamma$ は組み合わせ最適化問題を近似して量子回路に置き換える際に出てくるパラメータ

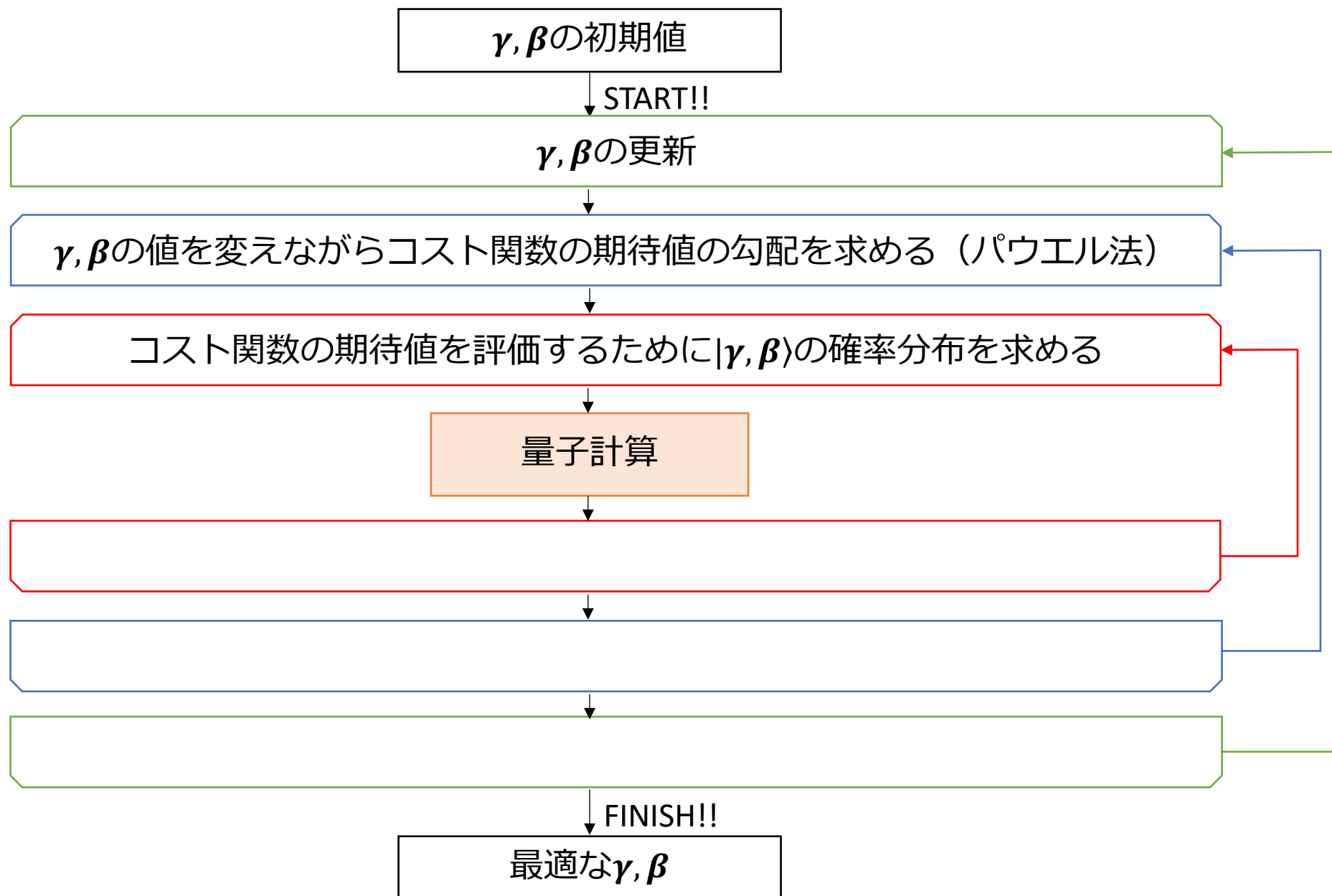
[2].  $U_x(\beta) = e^{-i\beta H_r}, U_c(\gamma) = e^{-i\gamma H_c}$

# QAOA概要

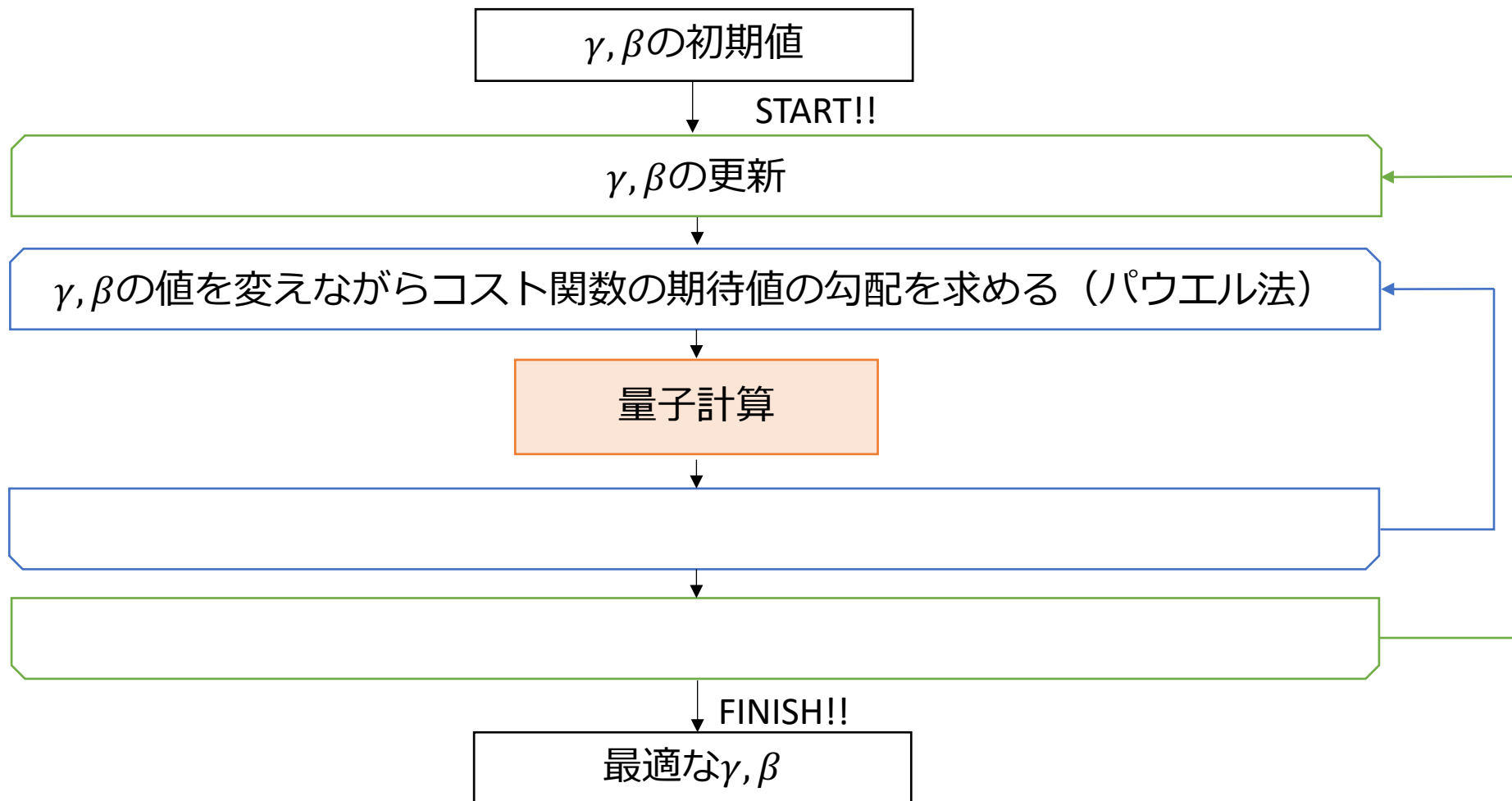
## QAOAのフロー概略図





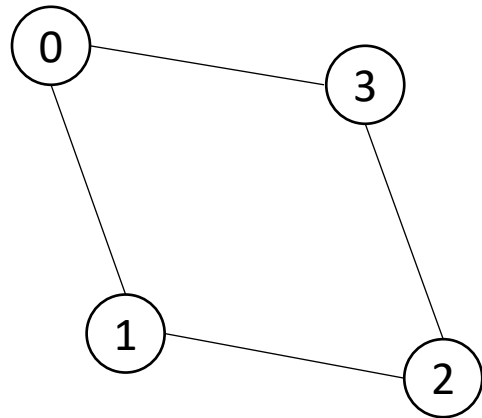






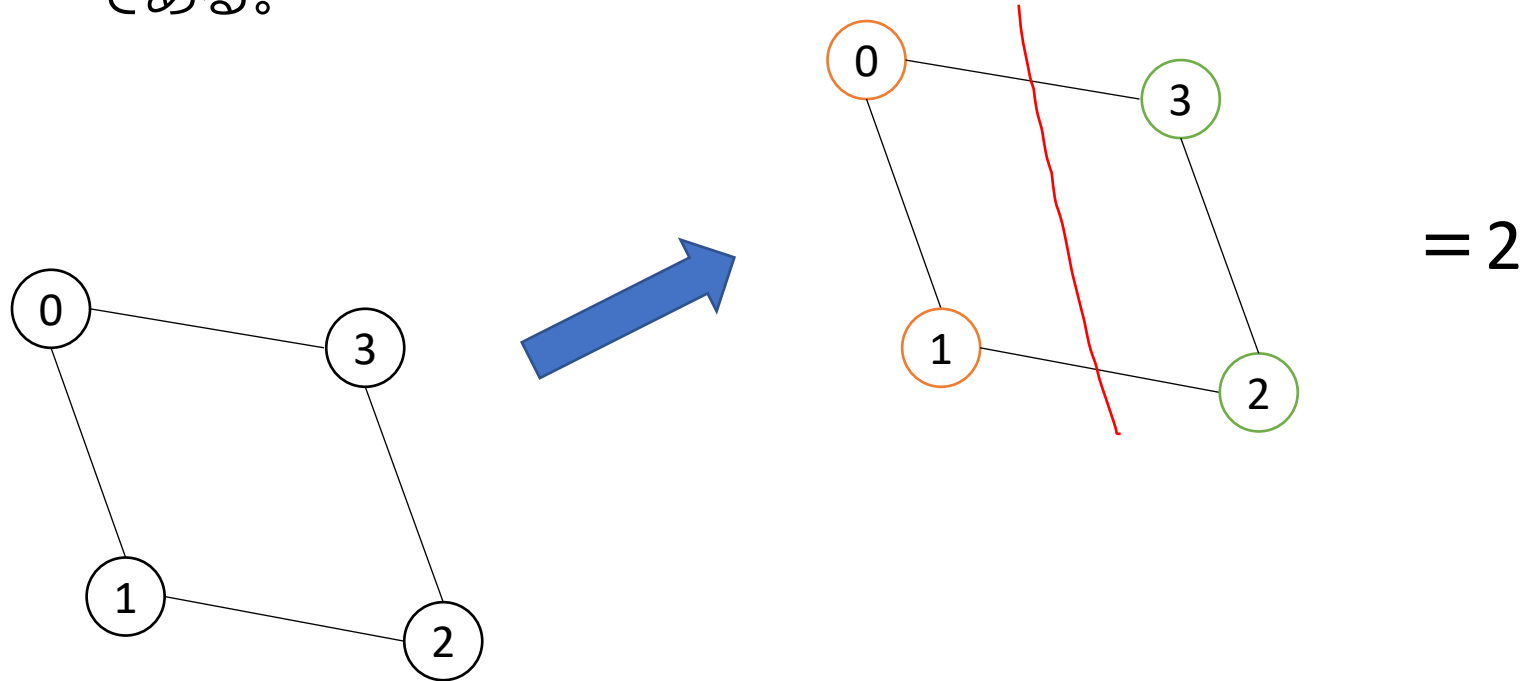
# 実験内容

- 対象とした最適化問題：MAXCUT問題
  - 下図のような頂点と辺の集合であるグラフがあり、1本の線で頂点を2つのグループに分けることを考える（今回の辺の重みはすべて1とする）。このとき2グループ間を通る辺の重みの合計が最大になるような分け方を見つけるのがMAXCUT問題である。



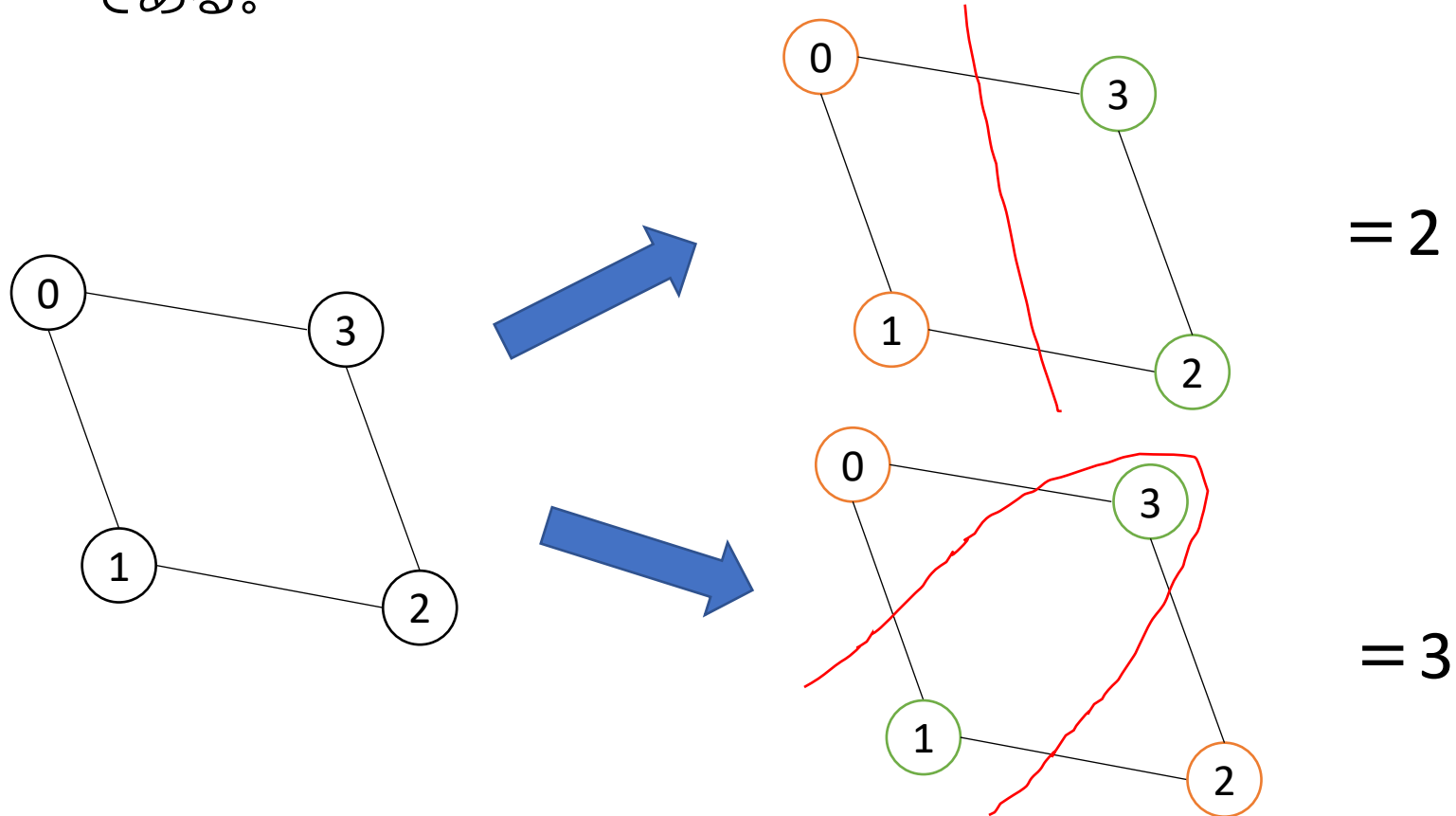
# 実験内容

- 対象とした最適化問題：MAXCUT問題
  - 下図のような頂点と辺の集合であるグラフがあり、1本の線で頂点を2つのグループに分けることを考える（今回の辺の重みはすべて1とする）。このとき2グループ間を通る辺の重みの合計が最大になるような分け方を見つけるのがMAXCUT問題である。



# 実験内容

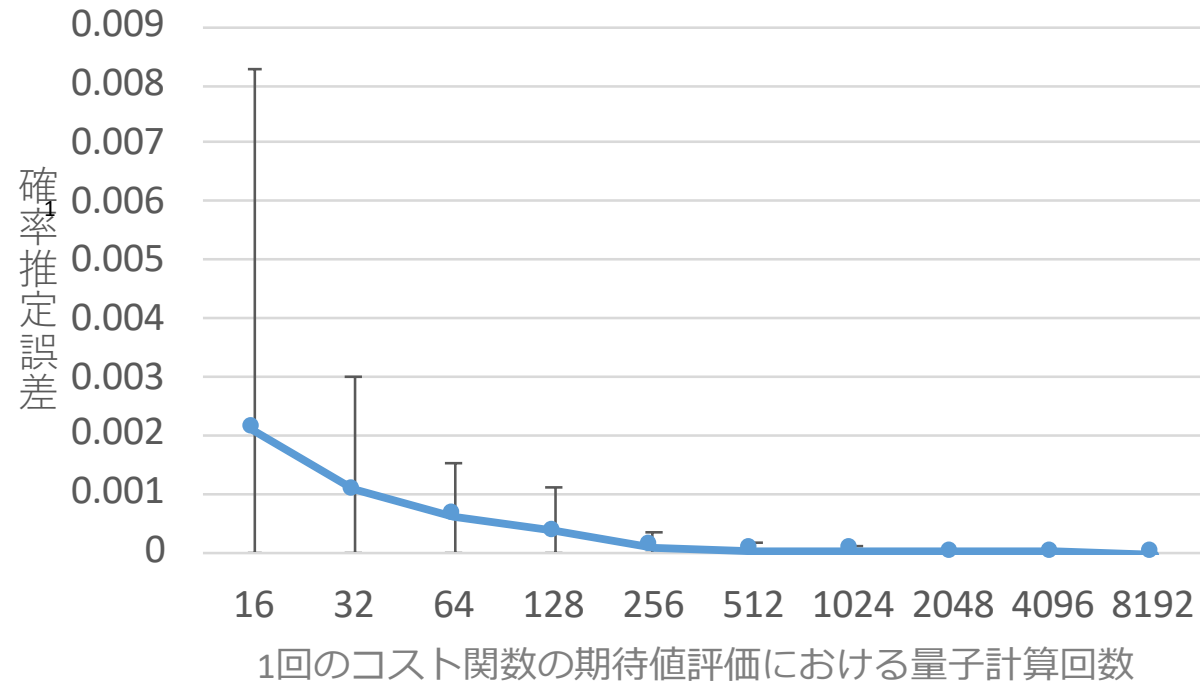
- 対象とした最適化問題：MAXCUT問題
  - 下図のような頂点と辺の集合であるグラフがあり、1本の線で頂点を2つのグループに分けることを考える（今回の辺の重みはすべて1とする）。このとき2グループ間を通る辺の重みの合計が最大になるような分け方を見つけるのがMAXCUT問題である。



# 実験結果

- 1回のコスト関数の期待値評価における量子計算回数と出力される確率分布の誤差<sup>1</sup>の関係調査（理想状態のみ）

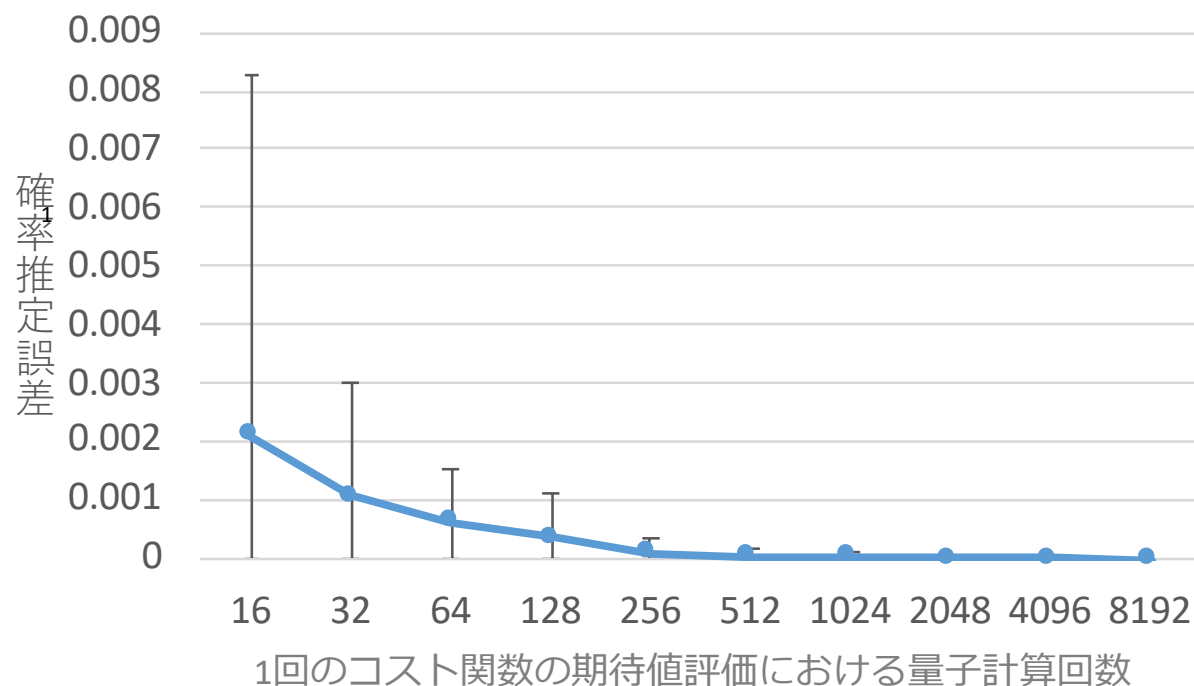
※グラフの各値は1024回実行した平均値、エラーバーはその標準偏差



# 実験結果

- 1回のコスト関数の期待値評価における量子計算回数と出力される確率分布の誤差<sup>1</sup>の関係調査（理想状態のみ）

※グラフの各値は1024回実行した平均値、エラーバーはその標準偏差



量子計算回数が増加すると確率分布の誤差、標準偏差ともに小さくなる



量子計算回数が増加すると確率分布の誤差、標準偏差ともに小さくなる