

# 研究終了報告書

## 「量子ハイブリッド組合せ最適化アルゴリズム開発」

研究期間：2019年10月～2023年3月

研究者：平石 秀史

### 1. 研究のねらい

本研究では、組合せ最適化問題に対する量子・古典ハイブリッドアルゴリズムの構築を目指す。特にグラフのような離散構造上での組合せ最適化問題を対象とする。そのための方法論として、古典アルゴリズム設計において計算困難問題に対するアルゴリズム設計に用いられるグラフ分解理論に注目する。グラフ分解理論は、所与のグラフ構造を、単純で小規模なグラフの集合に分解を行う。所与のグラフが、解くべき計算問題の構造に即した分解が可能であれば、この分解後のグラフに対して繰り返し計算を行うことで計算困難問題に対しても高速なアルゴリズムの設計が可能となる。

本研究課題では、現在および近い将来の中・小規模量子ゲート計算機において、どのようなグラフ構造であれば、量子アルゴリズムを設計する上で効果的な分解が可能であるかについての解明を行うことを目指す。さらに、NISQ デバイス上において、実装・評価実験をすることを通して、実際に高速動作するアルゴリズムの開発を目指す。

このために我々は、次の二点に着目して研究を行う。一点目はグラフにおける探索問題に対して用いることができる量子アルゴリズムである量子ウォークを扱う。量子ウォークに対して、どのようなグラフであれば省コストの実装が可能であるかについて検討を行う。二点目はイジング分配関数計算に関する近似アルゴリズム開発を行う。特に、既存のアルゴリズムで理論的に高精度な近似計算が可能となるグラフクラスを拡大し、より広範なグラフクラスに対して高精度な近似計算を可能とすることを目指す。さらに量子ウォーク・イジング分配関数の計算の双方に対して、NISQ デバイス上で実装を行い、性能の評価を行う。

### 2. 研究成果

#### (1) 概要

本研究では、組合せ最適化問題を解く上で基礎的なサブルーチンとして使われることが期待される二つの手法、量子ウォークと VDB 対応によるイジング分配関数計算に着目して研究を行った。

量子ウォークに関しては、ウォークの繰り返し実行を行う際に省コストで実装可能な回路構成の開発を行った。量子ウォークには離散時間と連続時間の二種類が存在する。本研究では離散時間量子ウォークに関して、古典ランダムウォークの自然な拡張である DTQW と、様々なグラフに対して量子ウォークの設計がしやすい SQW という二つのモデルに関して省コストの回路実装を行った。DTQW に対しては、 $k$  回の繰り返しに対して、ウォークの実行時に行う算術加算を全て位相上で行うことで、 $k$  回の繰り返し実行をサイズ  $n^2+nk$  ・深さ  $nk$  で行う手法を構築した。さらに DTQW での我々のアルゴリズムを元にして、SQW に関しても同様に繰り返し実行に強いアルゴリズムを拡張した。我々の回路構成のサイズは DTQW と同様に  $n^2+nk$  ・深さ  $nk$  であり、これは既存の SQW の実装の  $n^2k$  ・深さ  $n^2k$  と比べ省コストでの実装となっている。

イジング分配関数を近似計算アルゴリズムに関しては、イジング分配関数を量子グラフ状態による内積で表現した VDB 対応に着目し、VDB 対応を用いた近似計算の近似率改善が可能なグラフクラスに関する究明を行った。これまで近似率改善が可能であることが知られていたグラフクラスは格子グラフなどの疎なグラフであることに着目し、密なグラフで近似率が改善可能なグラフとして、次数と枝パラメータに制限がある二部グラフで近似率改善が可能であることを示した。さらに、オイラー部分グラフ、頂点被覆、枝被覆、マッチングなどの重み付き数え上げ問題に関して、内積表現による近似計算の定式化を行った。これらの近似計算を行うためには、問題に応じた量子状態を事前に用意する必要がある。IBM Quantum 上で 57 頂点のパスグラフの量子グラフ状態と 11 頂点のスターグラフの量子グラフ状態の実装を行い、Bell 不等式の破れを用いて精度の検証を行い、さらに頂点被覆・枝被覆に対して近似計算に必要な量子状態を Rigetti の量子コンピュータのトポロジーに関して省サイズで実装する手法の検討を行った。

## (2) 詳細

### 研究テーマ A「量子ウォークの省コスト回路実装手法の開発」

本研究テーマでは、量子ウォークに関して省コスト回路の実装手法の開発を行った。データベース探索の量子アルゴリズムであるグローバ探索の拡張として、量子ウォークはグラフ上の探索アルゴリズムとして用いることができる。さらに量子ウォークでは、古典計算と比べ指数時間の高速化を達成できる問題も知られるなど、離散構造の探索手法として注目が集まっている。

量子ウォークには離散時間と連続時間の二種類が存在するが、本研究では離散時間量子ウォークに着目し、繰り返しウォークを行う際に回路サイズが小規模になるような実装手法の開発を行った。離散時間量子ウォークにはさらに、古典ランダムウォークと同様に明示的にコインを使うモデルである DTQW (discrete-time quantum walk with coin) とコインを使わないモデルである SQW (staggered quantum walk) とがある。

DTQW の既存の実装には、Douglas, Wang による generalized CNOT ゲートを用いたものと、Shakeel による QFT と CNOT ゲートを組み合わせて利用したものがある。Shakeel による実装は、Douglas, Wang によるものと比べて、より浅層の量子回路での DTQW の実現が可能だが、ウォークの繰り返し実行時の最適化は行われていなかった。

我々は Shakeel による QFT を用いた実装を拡張し、繰り返し実行に強いアルゴリズムを構築した。Shakeel によるアルゴリズムでは 頂点数が  $2^n$  のサイクルに対して 1 回の実行を行う回路がサイズ  $n^2 \cdot$  深さ  $n$  の回路となっており、 $k$  回の繰り返し実行を行うと サイズ  $n^2k \cdot$  深さ  $nk$  の回路となる。我々のアルゴリズムでは、ウォークの実行時に行う算術加算を全て位相上で行うことで、 $k$  回の繰り返し実行をサイズ  $n^2+nk \cdot$  深さ  $nk$  で行う手法を構築した。さらにサイクルグラフでの実装を、トラスグラフへと拡張し、同様に繰り返し実行に関して省サイズのアルゴリズムを構築した。

さらに DTQW での我々のアルゴリズムを元にして、SQW に関しても同様に繰り返し実行に強いアルゴリズムを拡張した。我々の回路構成のサイズは DTQW と同様に  $n^2+nk \cdot$  深さ  $nk$  であり、これは既存の SQW の実装の  $n^2k \cdot$  深さ  $n^2k$  と比べ省コストでの実装となっている。

SQW は DTQW と比べて、様々なグラフに対して量子ウォークを設計しやすい枠組みとなっており、将来的に我々の手法をより一般的なグラフへと拡張する可能性が期待できる。

また構築したアルゴリズムに関して IBM Quantum や IonQ 上で実装を行い DTQW においては 4 点のサイクル、SQW においては 8 点・16 点のサイクルにおいて既存の手法よりも精度の高い実験結果が得られたことを確認した。

### 研究テーマ B「VDB 対応によるイジング分配関数計算の近似率改善と拡張」

本研究テーマでは、イジング分配関数を近似計算するアルゴリズムに関して研究を行った。特に、イジング分配関数を量子グラフ状態による内積で表現した VDB 対応に着目し近似率改善を行うと同時に、VDB 対応を他のグラフ上の数え上げ問題を解くアルゴリズムへ拡張した。

イジング模型上の計算は古典・量子ともに多くのアルゴリズムが提案されている。量子アニーリングでは、様々な組合せ最適化問題をイジング模型上の基底状態計算に帰着させて解くなど、組合せ最適化問題を解く際の基本的なサブルーチンとなっている。

一方で、イジング模型上の計算は基底状態計算・分配関数計算共に NP 完全・#P 完全という計算困難な問題クラスに分類されており、グラフトポロジーが単純化された場合でも計算困難なクラスに属する場合が多い。

イジング分配関数に対する量子アルゴリズムとして、van den Nest らによる VDB 対応を用いた手法が提案されている。これは、量子グラフ状態を用いた内積表現で表すことにより、分配関数の計算を行う。これにより、近似的にはあるが、多項式長の回路サイズでイジング分配関数を計算できる。この VDB 対応を用いたアルゴリズムは、その後に G. De las Cuevas らや、M. Matsuoka らによってグラフが格子グラフの場合には、より良い近似率で計算できることが示された。

一方で、格子グラフは枝数が頂点数の線形程度であるため、疎なグラフである。我々は、密なグラフに対して、VDB 対応によるアルゴリズムの近似率を改善できるグラフクラスを特定するという視点から研究を行った。そして、二部グラフでは「片側の頂点集合の次数が奇数」かつ「外部磁場なし」かつ「相互作用がある特定の値」の場合は、頂点間に張られる枝の数に依存せずに近似率を改善できることを示した。

さらに VDB 対応を用いたアルゴリズムを、イジング分配関数計算以外へのグラフ上の数え上げ問題計算へと拡張を行った。特に、van den Waerde により示されているグラフ母関数の双対関係に着目することで、オイラー部分グラフ、頂点被覆、枝被覆、マッチングといった問題に関する数え上げ問題を、量子状態の内積表現を通じて近似計算する回路を構成した。

このような、量子状態の内積表現を用いたイジング分配関数やグラフ上の数え上げ問題の近似計算を、量子デバイス上で実装するためには、量子状態を省サイズの回路を用いて実装する必要がある。特に、実装を行う量子デバイスのハードウェアのトポロジーを考慮した回路の実装が必要になる。

本研究では、IBM Quantum 上で 57 頂点のパスグラフの量子グラフ状態と 11 頂点のスターグラフの量子グラフ状態の実装を行い、Bell 不等式の破れを用いて精度の検証を行った。また、頂点数  $n$  のスターグラフのグラフ状態に関しては、辺分割ハニカム格子上で深さ  $\sqrt{n}$  の回路の構成方法を示した。さらに頂点被覆・枝被覆に対して近似計算に必要な量子状態を

Rigetti の量子コンピュータのトポロジーに関して省サイズで実装する手法の検討を行った。

### 3. 今後の展開

本研究では量子ウォークとイジング分配関数計算という二つに着目して研究を行った。

量子ウォークに関しては、離散時間量子ウォークにおける DTQW と SQW というモデルに着目し、サイクルグラフやトラスグラフに対して、繰り返し実行をする場合に小規模回路で実装できる回路設計を構築した。回路設計では、グラフの対称構造に着目して、一回のウォーク中に現れる量子算術演算を、QFT を用いて行い全て位相上で行うことで、小規模化を実現した。グラフに周期性がある場合は、同様の手法により量子回路の小規模化を実現できる可能性がある。将来的にはより広範なグラフクラスの探索に対して本手法の適用を検討することが一つの今後の展開として挙げられる。

イジング分配関数計算に関しては、VDB 対応による内積計算アルゴリズムを用いた場合、格子グラフ上で近似率を高精度化できるという既存研究の結果に着目し、より広範なグラフクラスに対して近似率の高精度化を目指した。結果として、二部グラフにおいて次数とパラメータの制約を課すことで枝数が  $O(n^2)$  のオーダーである密なグラフに対しても近似率の高精度化が可能であることを示した。量子アニーリングでは、イジング模型上基底状態計算を行うことを通じて、様々な組合せ最適化問題の解を求めることが期待されているように、イジング分配関数の計算を通じて、グラフ構造上で様々な数え上げ問題を解くことが可能になることが期待できる。VDB 対応を用いた手法によってイジング分配関数計算を実行するためには、量子グラフ状態を高精度に準備する必要があるが、将来の展望として、各々の NISQ デバイスのグラフトポロジーにおいて、量子グラフ状態を高精度に準備するための方法論を構築することを通じて、本研究でのアルゴリズムの実装可能性を検討することが考えられる。

### 4. 自己評価

本研究では、グラフにおける組合せ最適化問題に対し、近い将来の NISQ デバイス上でも量子アルゴリズムが実行可能になるようなグラフ構造の解明をすることを目的とした。広くグラフ探索に用いることができる量子ウォークに対して小規模サイズでの回路実装の手法構築や、イジング分配関数計算の密グラフに対する近似率の改善などを行うことで、将来的に広範な問題に適用可能な方法論の構築を目指した。一方で、提案手法を NISQ デバイス上に実装する際には、デバイスのトポロジーの制約から、極めて限定されたグラフに対してのみしか性能の測定を行うことができなかった。

また、研究代表者が異動したことに伴う研究環境の変化により、量子アルゴリズムの実機での実装・実験のための技術補佐員の確保といった研究実施体制の構築や、人件費などの研究費の執行に困難があった。

### 5. 主な研究成果リスト

#### (1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数:2件

1. Bo Yang, Rudy Raymond, Hiroshi Imai, Hyungseok Chang, Hidefumi Hiraishi: Testing Scalable Bell Inequalities for Quantum Graph States on IBM Quantum Devices, IEEE Journal on Emerging and Selected Topics in Circuits and Systems, 2022, 12(3), 326-331.

本論文では IBM Quantum 上に置いて量子グラフ状態に対するベルの不等式の破れの検証をおこなった。IBM Quantum のトポロジーに着目して、パスグラフでは 57 頂点、スターグラフでは 11 頂点までの量子グラフ状態を準備し、ベルの不等式の破れを確認した。辺分割ハニカム格子上に  $n$  頂点のスターグラフの量子グラフ状態が  $\sqrt{n}$  の深さの量子回路で準備できることを確認した。

2. Hiroshi Imai, Keiko Imai, Hidefumi Hiraishi: Extended formulations of lower-truncated transversal polymatroids, Optimization Methods and Software, 2020, 36(2-3), 326-331.

本論文では、二部グラフを台構造としてもつ足切り横断ポリマトロイドという離散構造に関して、多面体表現のサイズに関する解析を行った。離散構造に付随する多面体表現の小規模化は、その離散構造上での最適化計算の高速化につながる。足切り横断ポリマトロイドが、次元を拡張することで多項式サイズの多面体表現をもつことを示すことで、古典アルゴリズムにおいて貪欲法を用いて解を効率的に探索できる構造の明確化を行った。

(2) 特許出願

なし

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

Kosei Teramoto, Yang Bo, Rudy Raymond, Atsuya Hasegawa, Hiroshi Imai, Hidefumi Hiraishi: Experimental Realization of Quantum Non-locality on IBM Quantum Devices, 量子情報技術研究会, 2021.

楊 博, Rudy Raymond, 今井 浩, 張 亨碩, 平石 秀史: Testing Scalable Bell Inequalities for Quantum Graph States on IBM Quantum Devices, 量子ソフトウェア研究発表会, 2021.

張 亨碩, 平石 秀史, 今井 浩: The Implementation of Deutsch-Jozsa's algorithm on IBM Quantum by Bidirectional Computation, 量子ソフトウェア研究発表会, 2021.