ブラックボックス最適化のための
進化的量子アルゴリズムの開発
— QuADS: 適応的な探索分布による量子連続最適化手法 —

1　背景

現在、数理最適化は工学・経済・科学といった分野で重要度を増している。特に機械学習やパターン認識に代表されるような大規模な最適化問題が社会全体の基盤技術となりつつある。しかし、現在広く使われている最適化手法は大量の計算資源と長い計算時間が必要であり、より高速な最適化を実現するために革新的な最適化手法の開発が急務である。本プロジェクトでは最適化手法の中でも連続的最適化、特に勾配などの情報を使用しないブラックボックス最適化に注目し、新たな量子最適化アルゴリズムを提案、実装する。量子ブラックボックス最適化アルゴリズムの既存手法であるグローバー適応探索は一様探索をベースにしたアルゴリズムであるため、通常連続最適化の対象となる目的関数には適していない。そこでグローバー適応探索に進化計算による古典最適化手法”CMA-ES(Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy)”のアイデアを取り込んだ、新たな量子最適化手法”QuADS(Quantum Adaptive Distribution Search)”を提案する。

2　目的

本プロジェクトではグローバー適応探索と CMA-ES を組み合わせた新たな連続量子最適化アルゴリズムの提案・実装を行い、数値実験により QuADS の優位性を検証する。この新たなアルゴリズムにより量子連続最適化への貢献を目指す。

3　ソフトウェア開発内容

グローバー適応探索はグローバー探索を用いた量子最適化手法である。グローバー適応探索のアルゴリズムは、

1. 現状の最適解での値をしきい値として、しきい値未満の領域内の点をグローバー探索する。
2. 探索により得られた点での関数値をしきい値にする。

という手続きを繰り返すことで、大域的最適解を求めることができる。この際にグローバー探索でしきい値未満の点を探索することにより、一様探索で発見するのに比べ計算量が二乗加速する。グローバー適応探索は一様探索を加速するアルゴリズムであり、非連続性が強く最小値の周辺に手がかりがないような関数を最適化する場合に最も優れた性能を発揮する。しかし、通常最適化が行われるような関数はある程度の連続性があり、一様探索よりも良い探索の仕方があることが多い。そこで、CMA-ES のアプローチを取り入れる。CMA-ES は進化計算による最適化手法の一つであり、正規分布を解の候補として用いる。CMA-ES のアルゴリズムは

1. 正規分布からサンプリングを複数回行い、関数値が小さいサンプルを取り出す。

2. 評価の良いサンプルを用いて正規分布の平均と共分散を更新する。

を繰り返すことで正規分布を最小値に近づけていく。本プロジェクトで提案する QuADS は CMA-ES とグローバー適応探索を組み合わせて、

1. 正規分布を初期状態として用意し、振幅増幅によりしきい値未満の点を複数個得る。
2. 得られた点により正規分布の平均と分散を更新する。

といったアルゴリズムとなる。CMA-ES での正規分布からのサンプリングと関数値が小さいサンプルを取り出してくるという操作を、しきい値未満の点を複数得るという操作に置き換えている。しきい値以下のサンプルを取り出すときに量子振幅増幅を利用することで、古典アルゴリズムに対し二乗加速が得られる。QuADS は適応的な確率分布で探索領域を表現することにより、グローバー適応探索を一般化した手法である。グローバー適応探索は解のある見込みがない場所も等確率でサンプルしていたのに対し、この手法は正規分布により探索空間を絞ることにより高速化されると考えられる。具体的には古典では大域的最適化が難しいような高次元多峰性関数について、グローバー適応探索より高速な最適化を行うことができる。

以上のアルゴリズムを一次元関数では Qiskit を用いて実装を行い、多次元での検証では量子振幅をシミュレートする自作シミュレータを実装した。Qiskit での実装において QuADS の量子回路図の例は図 1 のようになっている。図 2 は絶対値関数 $f(x) = |x|$ に対する振幅増幅の様子であり、しきい値未満の部分の振幅が増幅されていることがわかる。Qiskit による数値実験により提案手法がうまく動作することを確かめた。

さらに多次元関数での実験を行うため、自作シミュレータによる実装を行った。グローバー適応探索は振幅ベクトルを初期状態振幅ベクトルに対する反転させる操作と条件を満たす状態に対して反転させる操作により実装できることを利用して効率的に実装が可能である。図 3 は二次元 Rastrigin 関数での最適化の様子である。赤色の楕円が正規分布、オレンジ色の点がしきい値以下の点を表す。正規分布を更新していくごとに最小解へ近づいており、最終的に最適解へたどり着いている。

4　新規性・優位性

作成したシミュレータにより QuADS、グローバー適応探索、CMA-ES を比較する数値実験を行った。実験では各手法テスト関数での最適化をシード値を変えて 100 回ずつ行う。そして、大域的最適解へ収束するまでの期待関数評価回数の比較を行った。表 1 は各関数での結果である。Schwefel 関数や Rastrigin 関数、Styblinski-Tang 関数のような多峰性関数について QuADS が最も性能を発揮している。図 4 は Rastrigin 関数における最適化過程である。実線は横軸が関数評価回数、縦軸がその関数評価回数のときの関数評価値を表す。また、線終端の菱形の点は大域解を発見

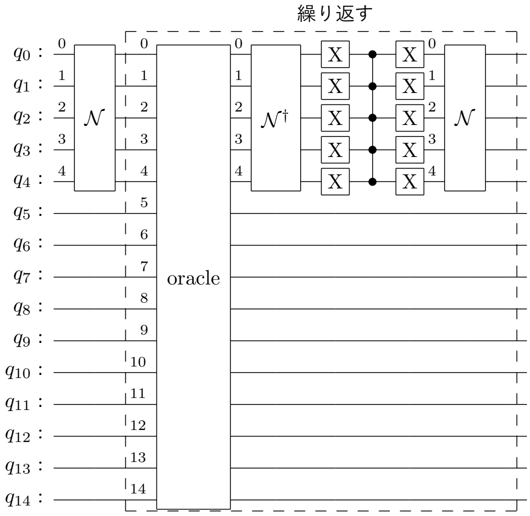
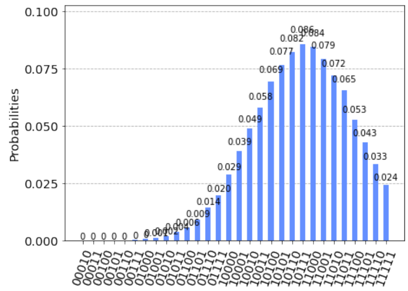
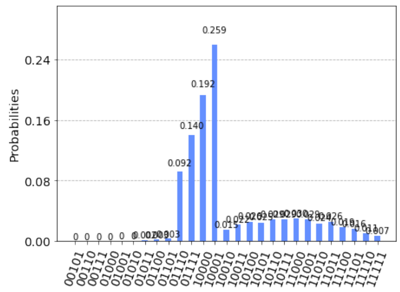


図 1: QuADS の量子回路図



(a) 正規分布状態



(b) 振幅増幅 1 回

図 2: 振幅増幅の様子

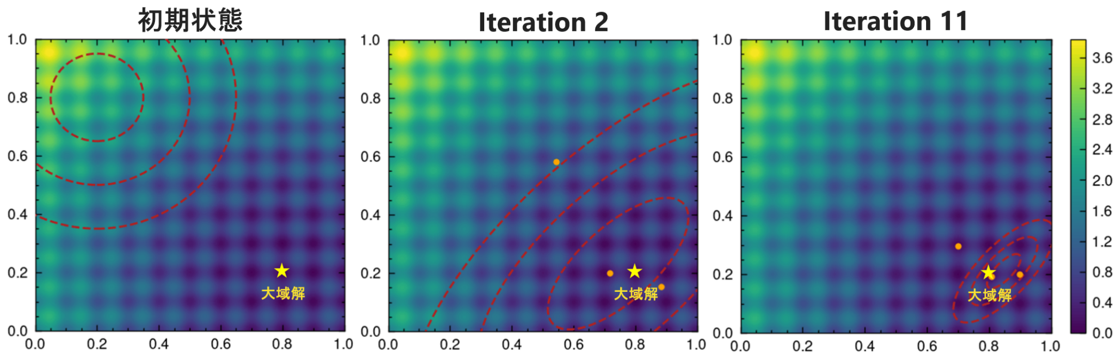


図 3: 二次元 Rastrigin 関数での最適化の様子

したことを、丸の点は局所解へ陥ったことを表す。CMA-ES は収束までの関数評価回数が少ない一方、大域的最適解への収束性が低い。また、グローバー適応探索は収束までの関数評価回数は非常に多いものの、大域的最適解へ必ずたどり着く。一方、QuADS は関数評価回数が CMA-ES と同じ程度であり、大域的最適解への収束性も高い。さらに、次元をより大きくした場合の性能評価を行うため、対応する古典アルゴリズムの結果から量子アルゴリズムで必要な関数評価回数を推定した。図 5 は Rastrigin 関数での結果である。ただし、エラーバーはブートストラップ法によって得られた 95% 信頼区間である。グローバー適応探索や CMA-ES の次元に対する評価回数の増加に比べ、QuADS の増加具合は緩やかであり高次元になればなるほど

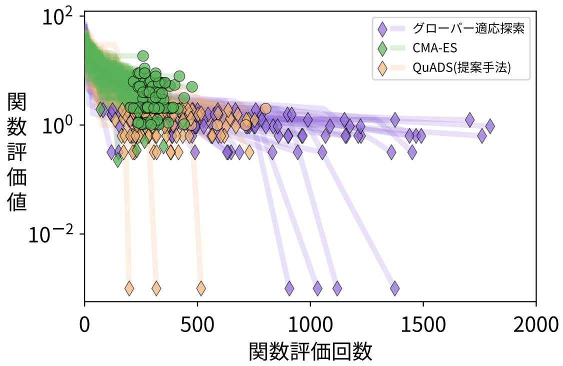


図 4: Rastrigin 関数での最適化過程

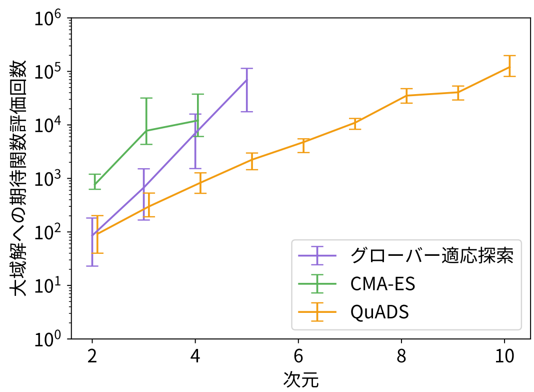


図 5: 次元を増加させた際の Rastrigin 関数での最適化の期待評価回数

表 1: 大域解を発見するまでの期待関数評価回数

関数	次元	QuADS	グローバー適応探索	CMA-ES
Schwefel	4	**1596.64**	3100.89	36232
Rastrigin	3	**388**	695	4295
Styblinski Tang	3	**338.7**	705.8	423

QuADS が有利になっている。

5 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

最適化は実社会において非常に重要であり、現在の科学技術の根幹をなす部分であるが、高次元かつ非凸な連続関数の大域的最適化は現在の古典コンピュータでは非常に困難な問題である。そのため、こうした課題に取り組むことは今後の科学技術の発展へつながる。このアルゴリズムのユーザーは連続最適化問題を解きたいと考えている研究者や技術者などを想定しており、ユーザーがこのアルゴリズムを利用することによって、従来の手法に比べて高速に最適化問題を解くことができる。2023 年 2 月現在で実用化されているのは NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスと呼ばれる小・中規模でノイズを含む量子コンピュータに限られており、本プロジェクトで提案した手法は即座に社会に役立つわけではない。しかし、QuADS は大規模な誤り訂正付きの量子コンピュータ FTQC(Fault Tolerant Quantum Computer) が実現した際に社会へのインパクトが期待できる。

6 氏名 (所属)

森本 恒平 (京都大学工学部情報学科)
高瀬 侑亮 (京都大学工学部情報学科)

(参考) 関連 URL
https://github.com/morim3/mitou-quads