

量子信号処理を活用した大規模組合せ最適化手法の開発 ーグローバル適応探索の実用化を目指してー

1. 背景

近年、組合せ最適化問題に対する量子コンピュータの応用が期待されている。一方で、量子アニーリングマシンや量子最適化アルゴリズムは近似解探索を前提としており、量子加速を得られない可能性が指摘されている。

この状況に対し、グローバル適応探索 (Grover adaptive search、GAS) [1]は、離散二値変数多項式の最適解探索において、古典的全探索に比して平方根オーダーの問合せ計算量を実現可能とするが、従来の GAS では、逆量子フーリエ変換の導入により回路深さが増加し、多数の補助量子ビットを要する課題がある。

また、量子信号処理 (quantum signal processing、QSP) を応用した GAS (QSP-GAS) [2]では、回路規模を抑えつつ従来と同様の動作を実現するオラクル構成が可能だが、QSP の多項式近似誤差に起因する探索性能が劣化し得る課題がある。

さらに GAS には複数方式や拡張があり、オラクル構成、初期状態準備、探索空間の削減方法など設計要素が多岐にわたるが、多様なシナリオを統一的に定義し複数方式を同一手順で実行して比較可能なシミュレータは一般に公開されていない。方式選択や設計パラメータ決定には探索性能だけでなく、回路深さ、CNOT ゲート数、補助量子ビット数などの評価も重要である。さらに、古典計算機上で評価するという特性上、評価時間を短縮するための高速化手法も不可欠となる。

2. 目的

以上の背景を受け、本プロジェクトでは二つの課題に取り組んだ。

課題 1 では、大規模な目的関数に対して良好な探索性能を達成するためには QSP-GAS のオラクル回路の回路深さを増大させる必要がある点に着目し、探索性能を維持しつつ回路深さおよび CNOT ゲート数の増大を抑えるオラクル回路の構成指針を確立することを目標とした。

課題 2 では、提案方式と従来方式を含む複数の GAS 方式について性能評価を統一的に実施できるシミュレータを整備し、大規模条件での負担を踏まえた高速化も行い、さらにシミュレータをオープンソースとして公開して第三者が同一条件で再現実験と方式比較を実施できる状態を作ること为目标とした。

3. ソフトウェア開発内容

本節では、課題 1 のオラクル回路構成法と、課題 2 の GAS シミュレータについて、構成と機能、検証結果を記載する。

(ア) 課題 1 大規模組合せに適した QSP-GAS の開発

QSP-GAS におけるオラクル回路の構成法を改良し、ブロック埋め込み回路の回路深さを低減し、併せて CNOT ゲート数の増大も抑える手法を開発した。従来の QSP-GAS では、二値多項式に対応するコストハミルトニアン H の時

間発展演算子回路を補助量子ビットで直接制御化する必要があり、それによって回路深さや CNOT ゲート数が増大する。そこで、制御付き時間発展の直接実装を避けるために、 H を複数の部分ハミルトニアンへ分解し、分割後の各部分に対して反可換関係を満たすパウリ列を系統的に特定し、それを用いてブロック埋め込み回路を構成する方針[3]を採用した。

開発手法では、コストハミルトニアンを $H = \sum_i H_i$ とし、各部分ハミルトニアン H_i に対して反可換関係を満たすパウリ列 K_i を対応付ける。そして、図 1 のように K_i の制御化ゲートで H_i の時間発展演算子回路を挟んだ回路を接続し、従来の制御付き時間発展演算子と同等の作用を実現する。ここで、開発アルゴリズムは、反可換パウリ列 K_i の計算を系統的に実行する。さらに、このアルゴリズムによって計算された K_i と H_i を用いる場合には、ヒューリスティックな方法により並列化実行が可能な形に適用順序を変更できる。

開発手法の有効性を検証するため、ランダムに生成した最大次数 4 の目的関数 500 個を用いて、量子ビット数を 4 から 24 まで変化させて評価した結果、図 2、3 のように開発手法により平均回路深さ、使用 CNOT ゲート数が従来手法に対して優位に少なくなることが確認された。

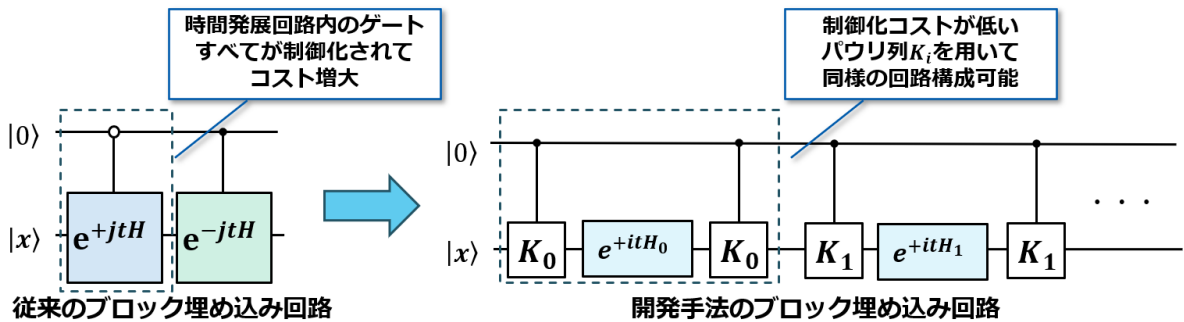
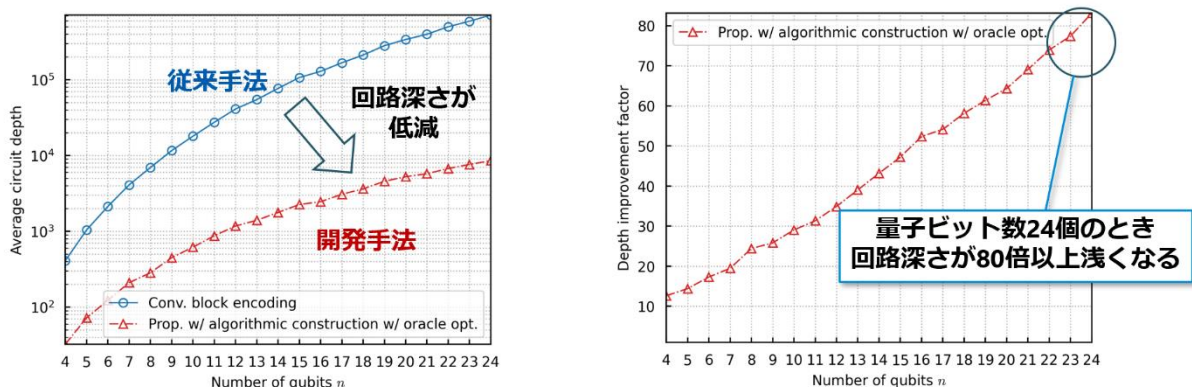


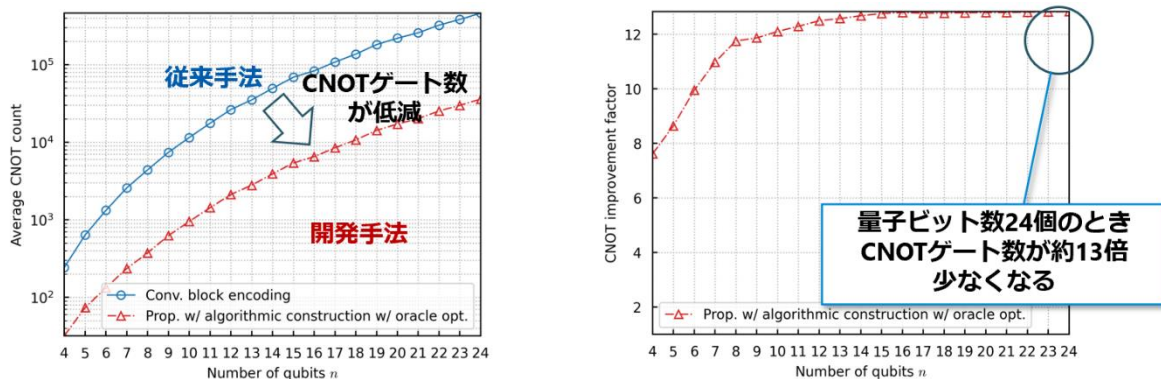
図 1 従来手法と開発手法によるブロック埋め込み回路の構成法



ブロック埋め込み回路の深さ

$$\text{深さ削減倍率} = \frac{(\text{開発手法を用いたときの回路深さ})}{(\text{従来手法を用いたときの回路深さ})}$$

図 2 ブロック埋め込み回路深さの比較



ブロック埋め込み回路構成に必要なCNOTゲート数 $\text{CNOT数削減倍率} = \frac{\text{開発手法を用いたときのCNOT数}}{\text{従来手法を用いたときのCNOT数}}$

図3 ブロック埋め込み回路構成に必要な CNOT ゲート数の比較

(イ) 課題2 GAS の高速シミュレータの開発

多様な GAS 方式とシナリオを統一的に比較評価できるシミュレータを開発した。GAS には QSP を用いる方式に加えた複数方式が存在し、さらに初期状態準備法などのバリエーションも存在する。これらの方式差と設計パラメータの影響を検証するため、探索性能と量子リソース等の評価が重要である。

本シミュレータでは、ユーザーが YAML ファイルに目的関数、使用する量子ビット数、GAS の方式選択、初期状態等の条件を記述し、main.py を実行すること実行する。実行により、しきい値の推移、収束挙動、回路規模等の評価を実行し、それらの可視化、データ保存を自動的で行う。

また QD-GAS および QSP-GAS それぞれの確率分布や位相更新といった数理的構造に基づき、量子回路を逐次生成せずに探索挙動を評価する高速化手法を実装した。これらの高速化手法を用い、Qiskit を用いた回路シミュレーションと実行時間を比較した。目的関数 $E(x) = 1.2x_0 - 1.7x_1x_2 + 2.2x_3 + 1.4x_3x_4x_5 + x_5$ を用いた。結果、両方式で同等の収束性能を達成した一方、実行時間が QD-GAS で約 247 倍、QSP-GAS で約 106 倍高速となった。

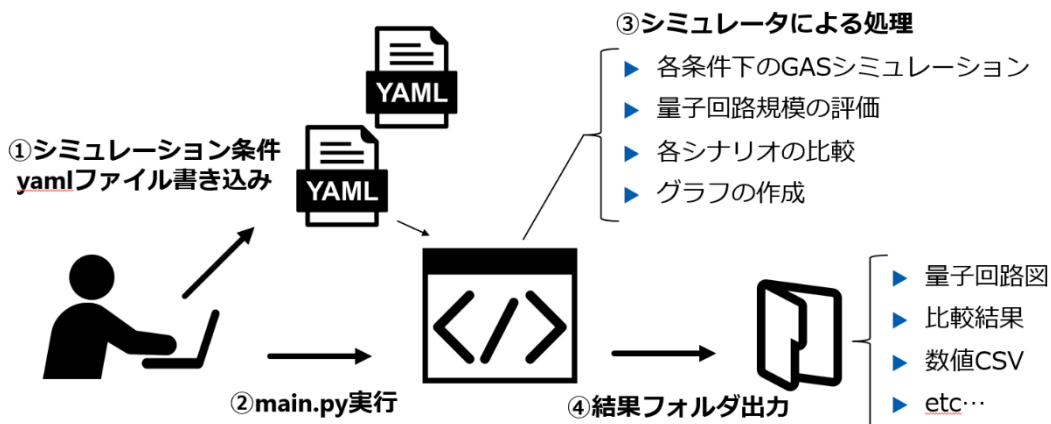


図4 シミュレータの処理フロー概要図

4. 新規性・優位性

課題 1 で開発した QSP-GAS のオラクル構成法はこれまでの先行研究では提案されていなかった新たな手法であり、従来手法を用いる場合より少ない量子リソースで回路構成できるという点で、従来手法に対して優位性があるといえる。

また、課題 2 で作成したシミュレータは、多様な方式差と設計パラメータ差を、YAML による条件定義、結果保存、図表生成まで一連の処理として簡潔にシミュレーションできるという点で、他の OSS 公開されている GAS のシミュレータに比べて優位性があるといえる。さらに QD-GAS および QSP-GAS それぞれの数理的構造に基づく高速シミュレーション手法は、本プロジェクトの新規性である。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

GAS の適用領域として、物流のスケジューリングや配送計画、金融のポートフォリオ最適化、無線通信の設計問題などが挙げられるが、これらの産業分野で厳密解探索に基づく最適化を運用したいユーザー、ならびにアルゴリズムや実装方式を検討する研究者、開発者にとって、GAS の実用可能性が高まれば、同じ品質の意思決定をより短い時間で行える、あるいは同じ時間内でより良い解へ到達できる可能性が高まり、運用上の計算コストや電力消費の削減につながる。その実現のため、ユーザーが本プロジェクトで開発したオラクル回路の構成法を利用することで、大規模問題に対して回路深さや CNOT ゲート数が過大にならないオラクル構成を選択でき、実装上の制約を意識した上で GAS の適用可能性を検討できる。また、開発したシミュレータにより、提案方式と従来方式を含む複数方式を統一条件下で実行し、探索性能と回路深さ、CNOT ゲート数を同一手順で比較できるため、方式選定や設計パラメータ検討の試行錯誤の負担を下げられる。加えて、回路なしシミュレーションによる高速評価により、反復回数が多い条件や多数のパラメータ走査を含む比較実験を現実的な計算資源で実行可能とし、方式選定や設計指針検討、回路深さ低減手法の効果検証を効率化できる。

6. 氏名（所属）

藤原 進太郎（横浜国立大学大学院理工学府）

（参考）

- 開発シミュレータの公開レポジトリ
https://github.com/yoozyboost/GAS_simulator
- 参考文献
[1] Gilliam et al. , Quantum, vol. 5, p. 428, 2021.
[2] Ollive et al., in IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering, pp. 256–261, 2024.
[3] Y. Dong et al., PRX Quantum, vol. 3, no. 4, p. 040305, 2022.