

量子コンピューティングにおける最適解の全量子探索

曾我部 東馬^{*1,2,3} 斯波 廣大¹, 坂本 克好¹, 山口 浩一¹, Dinesh Bahadur Malla²¹ 電気通信大学 先進理工学科² 株式会社 グリッド³ 電気通信大学 i-パワードエネルギーシステム研究センター

Variational Quantum Eigensolver (VQE) has been devised which solves large-scale eigenvalue problems by calculating quantum computers and classical computers alternately. Nelder-Mead method is mainly used as a method of optimizing eigenvalues. However, there is a disadvantage that a global optimum solution cannot always be searched. In this paper, we used two kinds of optimization methods, Particle Swarm Optimization (PSO) and Quantum Behaved Particle Swarm Optimization (QPSO) as an alternative method. As a result, we found that the performance of PSO and QPSO is better than that of Nelder-Mead method for the eigenvalue optimization method in VQE algorithm. Furthermore, we found that the relative error when using QPSO is the smallest among the three optimization methods. Meanwhile, we are also incorporating quantum-bit particle swarm optimization (QBPSO) into the eigenvalue optimization method of the VQE algorithm, aiming to realize an eigenvalue search algorithm solely using quantum circuits.

1. はじめに

大規模な固有値問題を解く方法として、量子コンピュータと古典コンピュータを交互に使用して計算する、量子変分アルゴリズム(Variational Quantum Eigensolver : VQE)が考案されている[1]。量子ビットの量子状態を固有ベクトルとして固有値を計算する部分と、固有値を最適化して量子状態を更新する部分に分かれ、前者を量子コンピュータが、後者を古典コンピュータが担うことで、量子超越性が実証できる。

VQE アルゴリズムにおける固有値の最適化方法として、主に Nelder-Mead 法が用いられている。Nelder-Mead 法は目的関数の制約がなく、導関数を必要としないため、滑らかでない関数においても大域的最適解を探索することができる。

しかし、より高次元の固有値探索になると、局所的最適解にとらわれやすく、常に大域的最適解を探索することはできないという欠点がある。

本稿では、Nelder-Mead 法の代替法として、群知能の一種である粒子最適化(Particle Swarm Optimization : PSO)[2]と、PSOの粒子に量子的な振る舞いを持たせた Quantum Behaved Particle Swarm Optimization (QPSO)[3]の2種類の最適化法を用いる。さらに、Nelder-Mead 法を用いた場合の結果と比較し、VQE アルゴリズムの効率の向上を検証する。

また、ブロッホ球で表現される量子ビットを用いた探索手法である、quantum bit particle swarm optimization(QBPSO)[4]を VQE アルゴリズムの固有値最適化手法に組み込み、量子回路のみでの固有値探索アルゴリズムの実現を目指す。

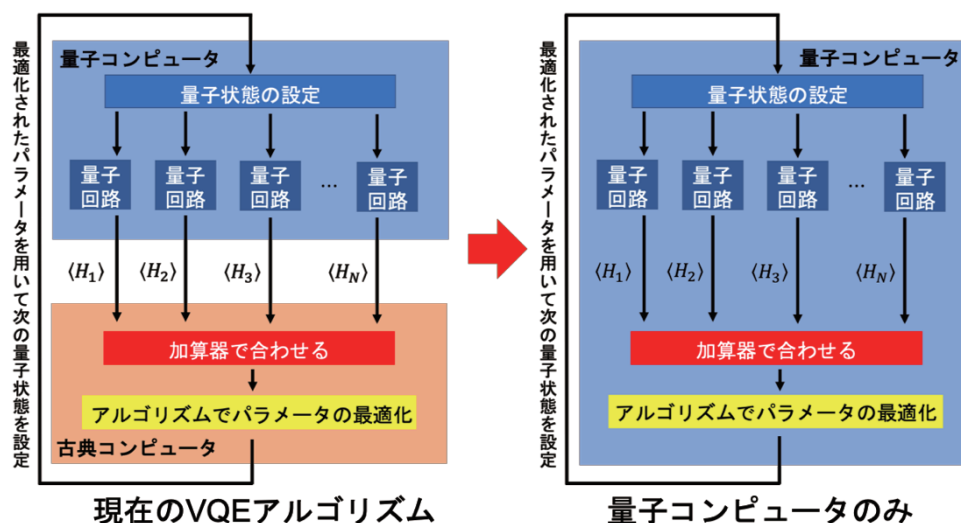


図1 固有値探索量子アルゴリズムのイメージ

2. 最適化アルゴリズム

2.1 PSO

PSO は複数の粒子で探索空間内に群を形成して探索する手法である。各粒子は位置の情報だけでなく、速度の情報を持ち、群の中で情報を共有しながら探索する。 $t+1$ ステップ目における i 番目の粒子の位置 x_i^{t+1} と速度 v_i^{t+1} をそれぞれ式(1)、(2)に示す。

$$x_i^{t+1} = x_i^t + v_i^{t+1} \quad (1)$$

$$v_i^{t+1} = wv_i^t + c_1r_1(p_i - x_i^t) + c_2r_2(p_g - x_i^t) \quad (2)$$

x_i^t と v_i^t は t ステップ目における i 番目の粒子の位置と速度であり、 p_i は i 番目の粒子が t ステップ目までに探索した最良解(Personal best)、 p_g は t ステップ目までに探索した群全体における最良解(Global best)である。 w, c_1, c_2 は重みのパラメータであり、 r_1, r_2 は $[0, 1]$ を範囲とする一様乱数である。式(1)、(2)を用いて各粒子の位置と速度を更新しながら、群全体で最適解を探索する。

粒子が群全体における最良解 p_g に収束する収束モデルを式(3)に示す。

$$P = (\varphi_1 p_i + \varphi_2 p_g) / (\varphi_1 + \varphi_2) \quad (3)$$

φ_1 と φ_2 は一様乱数であり、これらの値を適切に選択することで各粒子は点 P に収束する。そのため PSO の粒子は点 P から離れた場所では存在しにくくなり、点 P の周辺で探索を行う。

2.2 QPSO

QPSO における粒子は PSO で用いる速度の代わりに量子的振る舞いを持たせた粒子であり、粒子の位置は量子力学に基づく確率的観測によって決定される。

式(3)により表される、PSO の収束モデルを表現するために、量子井戸のデルタ関数ポテンシャル場を考え、量子状態の粒子が、中心が P であるポテンシャルによる束縛状態を持つとする。量子井戸のデルタ関数ポテンシャルに存在する粒子の量子状態を、波動関数から導出されるシュレディンガー方程式を式(4)に示す。

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E + \gamma\delta(y)]\psi = 0 \quad (4)$$

y は粒子の位置 x と点 P との差である。 m は粒子群を表し、 $\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったディラック定数、 E はポテンシャルの持つエネルギー、 γ は任意の実数である。 $|y| \rightarrow \infty$ の時 $\psi \rightarrow 0$ となる条件のもとで式(4)を変形することで、量子井戸のデルタ関数ポテンシャル場における粒子の存在確率を示す確率密度関数 $|\psi(y)|^2$ は次のように表せる。

$$|\psi(y)|^2 = \frac{1}{L} e^{-2|y|/L} \quad (5)$$

式(5)より、粒子と点 P との距離が近いほど粒子の存在確率が高まり、遠いほど粒子の存在確率が低くなる。

また、ポテンシャル場の中心 P からの探索幅 L は式(4)を変形することで、次のように表現できる。

$$L = (1/g)|y| = (1/g)|x - P| \quad (6)$$

g は QPSO における唯一のハイパーパラメータであり、 $\ln\sqrt{2}$ より大きいという条件を満たす。よって、 t ステップ目における i 番目の粒子の位置は式(7)によって更新される。

$$x_i^t = \begin{cases} P - L * (\ln(1/u)) & r < 0.5 \\ P + L * (\ln(1/u)) & r \geq 0.5 \end{cases} \quad (7)$$

u と r は $[0, 1]$ を範囲とする一様乱数である。QPSO は式(7)により粒子の位置を更新して、群全体で最適解を探索する。

3. 実験

量子シミュレータを用いて、VQE アルゴリズムで 4×4 行列の固有値 4 個と、 8×8 行列の固有値 8 個を求め、Nelder-Mead 法、PSO、QPSO の 3 種類の最適化法の性能を比較する。VQE アルゴリズムでは式(8)で示すように、量子状態 $|\psi\rangle$ に対するハミルトニアン H の期待値 E が基底状態のエネルギー E_0 よりも常に大きい等しいという変分原理に基づき、最小固有値を探索する。

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0 \quad (8)$$

また、ハミルトニアン H の行列が対称行列であり、全ての固有値の符号が等しい場合、 H の固有ベクトル $|v_0\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots$ を用いて式(9)が成立する。

$$H = H|v_0\rangle\langle v_0| + H|v_1\rangle\langle v_1| + H|v_2\rangle\langle v_2| + \dots$$

$$H - H|v_0\rangle\langle v_0| = H|v_1\rangle\langle v_1| + H|v_2\rangle\langle v_2| + \dots \quad (9)$$

VQE アルゴリズムは式(8)より、1 つの固有値のみ探索するため、式(9)に基づき行列を変化させ、元のハミルトニアン H の全ての固有値を一つずつ求める。

3.1 4×4 行列

まず、VQE アルゴリズムで 4×4 行列の固有値 4 個を求め、3 種類の最適化法の性能を比較する。各アルゴリズムのパラメータの値は経験的に決定する。ハミルトニアン H の行列を式(10)に示す。

$$H = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

また、各固有値の理論値を式(11)に示す。

$$\lambda_0 = 5, \quad \lambda_1 = 4.562, \quad \lambda_2 = 4, \quad \lambda_3 = 0.4384 \quad (11)$$

最適化法を PSO とした場合の固有値 λ_1 の探索推移を図 2 に示す。

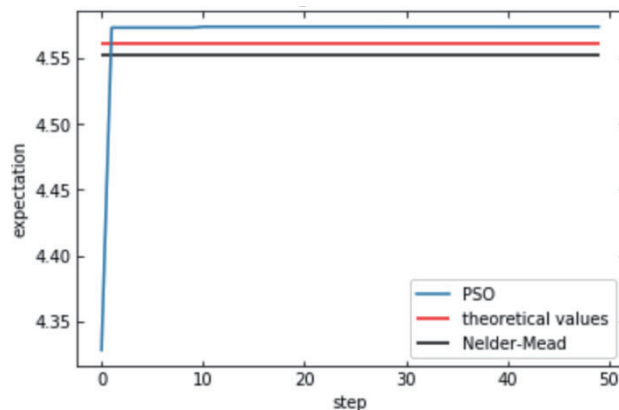


図 2 VQE における固有値探索推移 (PSO)

また各固有値において、3 種類の最適化法それぞれで求めた解と理論値との相対誤差を求めた結果を図 3 に示す。

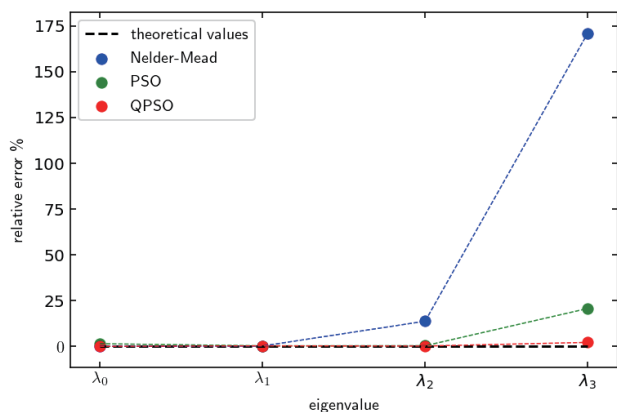


図3 各最適化法による固有値の理論値との相対誤差比較

図3より、 λ_0 と λ_1 はどの最適化法でも理論値に近い値を探索できていることがわかる。しかし λ_2 と λ_3 における相対誤差を比較すると、QPSOで探索した解の誤差が一番小さく、Nelder-Mead法で探索した解の誤差が一番大きいことがわかる。

3.2 8×8 行列

続いて、VQEアルゴリズムで 8×8 行列の固有値8個を求め、3種類の最適化法の性能を比較する。各アルゴリズムのパラメータの値は経験的に決定する。ハミルトニアン H の行列を式(12)に示す。

$$H = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 9 \end{bmatrix} \quad (12)$$

また、各固有値の理論値を式(13)に示す。

$$\lambda_0 = 12.55, \quad \lambda_1 = 9.772, \quad \lambda_2 = 5, \quad \lambda_3 = 3.952 \\ \lambda_4 = 3, \quad \lambda_5 = 1.572, \quad \lambda_6 = 1.228, \quad \lambda_7 = -2.078 \quad (13)$$

λ_7 のみ負の値であるが、今回も式(9)を用いて探索したため、 λ_7 のみ正しく探索できない。

8×8 行列の固有値を求めるVQEアルゴリズムの量子回路図を図4に示す。また、最適化法をQPSOとした場合の固有値 λ_2 の探索推移を図5に示す。

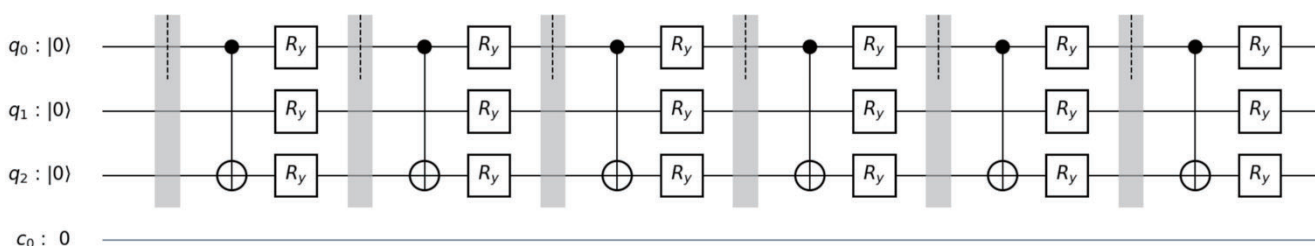


図4 VQE アルゴリズムの量子回路図

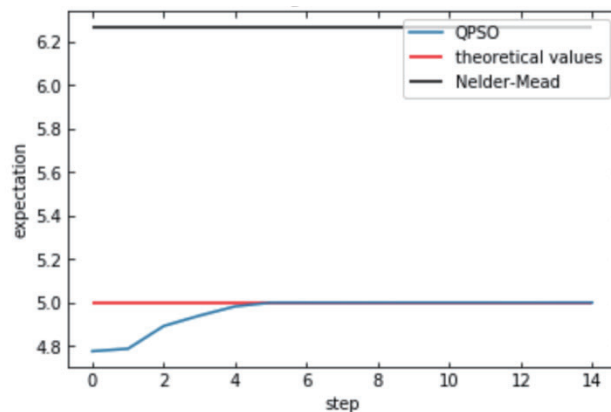


図5 VQEにおける固有値探索推移 (PSO)

また各固有値において、3種類の最適化法それぞれで求めた解と理論値との相対誤差を求めた結果を図6に示す。

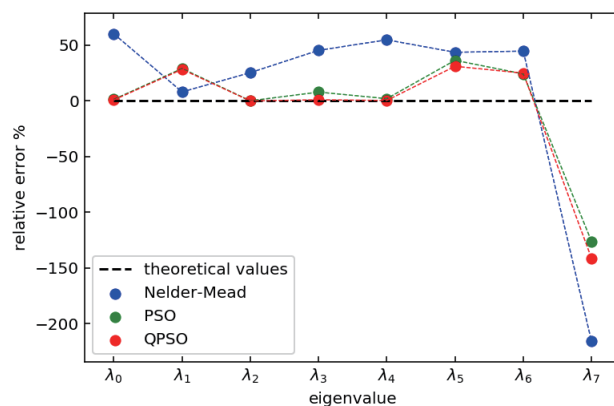


図6 各最適化法による固有値の理論値との相対誤差比較

図6より、 λ_7 がどの最適化法でも相対誤差が大きいことがわかる。前述した通り、 λ_7 の理論値が負の値であるためである。また、各固有値を比較すると、 λ_1 のみ Nelder-Mead 法で探索した解の誤差が一番小さいが、その他の固有値を考慮すると、QPSOで探索した解の誤差が一番小さいと考えられる。

4. おわりに

本稿では、VQE アルゴリズムの最適化法に PSO と、QPSO の2種類の最適化法を用いて、Nelder-Mead 法を用いた場合と比較し、VQE アルゴリズムの効率の向上を検証した。実験では VQE アルゴリズムにおける固有値の最適化方法は Nelder-Mead 法よりも PSO や QPSO を用いたほうが性能が良く、中でも QPSO を用いた場合の誤差が一番小さいことがわかった。

今後は、粒子群最適化の効率を改善するために、ブロッホ球で表現される量子ビットを用いた探索方法である Bloch quantum-inspired particle swarm optimization(BQPSO)[4] を VQE アルゴリズムの固有値最適化手法に組み込み、量子回路のみでの固有値探索アルゴリズムの実現や、VQE アルゴリズムのさらなる効率の向上を図る予定である。

参考文献

- [1] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, J. L. O'Brien, "A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor," *Nature Communications*, Vol.5, id.4213, 2014.
- [2] J. Kennedy and R. C. Everhart, "Particle Swarm Optimization" *Proc. Int'l Conf. Neural Networks*, Vol.4, pp.1942-1948 1995.
- [3] J. Sun, B. Feng and W. Xu, "Particle Swarm Optimization with Particles Having Quantum Behavior," *Proc. Congress on Evolutionary Computation*, 2004.
- [4] Xiande Liu and Xiaoming Liu, "Quantum Particle Swarm Optimization Based on Bloch Coordinates of Qubits," 2013 Ninth International Conference on Natural Computation (ICNC), 2014.