Level 1 QAOA 에서의 파라미터 최적화 전략 비교: 해석적 접근과 수치 최적화

김민주, 서영진, 허 준*

고려대학교

(mindy0522, cherishiz, *junheo)@korea.ac.kr

Parameter Optimization in Level 1 QAOA: A Comparison of Analytical and Numerical Strategies

Minjoo Kim, Youngjin Seo, Jun Heo*

Korea Univ.

요 약

본 논문에서는 MaxCut 문제에 대한 QAOA 의 파라미터 설정 전략으로, Wang et al. (2018)이 제안한 페르미온 기반 해석적 접근과 Qiskit Estimator 를 활용한 수치 최적화 기법을 비교 분석하였다. 실험 결과 level 1 QAOA 에서 해석적 접근은 수치 최적화보다 근사비가 소폭 높았고, 실행 시간 면에서 월등히 효육적이었다. 이는 얕은 회로 깊이에서는 해석적 전략이 실용적일 수 있음을 시사하며, 반면 $p \geq 2$ 이상에서는 수치 최적화 기법의 적용 가능성과 우위가 더욱 중요해질 것으로 전망된다.

Ⅰ. 서 론

양자 알고리즘은 고전 알고리즘으로는 해결이 어려운 문제를 보다 효율적으로 풀 수 있는 가능성을 제시하며 활발히 연구되고 있다. 그 중 양자 근사 최적화 알고리즘(QAOA)은 이산 조합 최적화 문제를 근사적으로 해결하기 위한 대표적인 방법으로 주목받아 왔다 [1].

Wang et al. (2018)은 MaxCut 문제를 위한 $p = 1$ QAOA 에 대해 해석적 파라미터 설정 방법을 제안하였다[2]. 이 방법은 페르미온 표현과 문제의 대칭성을 활용하여 최적 파라미터를 예측하며, 복잡한 수치 최적화 없이도 우수한 성능을 보이는 것으로 알려져 있다.

본 논문에서는 MaxCut 문제를 위한 $p = 1$ QAOA 를대상으로, 해석적 접근과 Estimator 기반 수치 최적화 접근을 비교 분석하였다. 특히, 효율성이 입증된 COBYLA optimizer 를 사용하고[3], estimator 의 회로 최대 실행 횟수를 1000회로 제한한 실용적인 조건하에서 파라미터 설정 방식에 따른 성능을 평가하고자 한다.

Ⅱ. 본 론

A. MaxCut 문제와 QAOA

MaxCut 문제는 정점 집합 V과 간선 집합 E로 이루어진 그래프 $G = (V, E)$에서, 정점들을 두 부분집합으로 분할하여 이들 사이를 가로지르는 간선의 개수를 최대화하는 분할을 찾는 문제이다. 이 문제는 대표적인 NP-hard 문제로, 다양한 조합 최적화 문제의 근간이 된다.

QAOA 를 MaxCut 문제에 적용할 때, 정점의 수는 사용할 큐비트의 수와 일대일로 대응되며, 간선은 목적 함수에 포함되는 항으로 변환되어 제약 조건의 형태로 작용한다.

회로는 문제의 목적 함수를 변환한 비용 해밀토니안 H_C와 믹서 해밀토니안 H_B를 교대로 적용하는 방식으로 구성된다. 이 과정을 level p만큼 반복하며, 각 단계에서 파라미터 (γ, β)를 조정하여 최적 상태에 가까운 양자 상태를 생성하는 것이 목표이다.

QAOA 의 양자 회로는 그림 1 과 같이 초기 상태 $|s\rangle = |+\rangle^{\otimes n}$에서 시작하여, 두 해밀토니안에 해당하는 유니터리 연산 $U(H_C, \gamma) = e^{-i\gamma H_C}, U(H_B, \beta) = e^{-i\beta H_B}$를 교대로 적용함으로써 구성된다. 이 연산들은 각각 최적 해에 가까운 방향으로 상태를 유도하고, 상태 공간을 탐색할 수 있도록 한다.

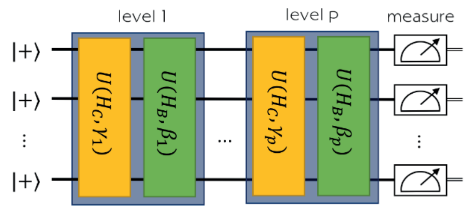

그림 1 QAOA 회로 구성

B. Qiskit Estimator 기반 수치 최적화 기법

본 논문에서는 QAOA 회로의 파라미터 (γ, β)를 최적화하기 위해 Qiskit 에서 제공하는 Estimator 를 활용하였다. Estimator 는 주어진 양자 회로로부터 특정 observable 의 기댓값을 추정하는 데 사용된다. 회로가 파라미터화되어 있을 경우 해당 파라미터는 입력으로 함께 제공된다.

QAOA 회로는 다음과 같은 양자 상태 $|\gamma,\beta\rangle$를 생성한다:

$$|\gamma,\beta\rangle = U(H_B,\beta_p)U(H_C,\gamma_p)\dots U(H_B,\beta_1)U(H_C,\gamma_1)|s\rangle$$

Estimator 를 이용하면, 상태 $|\gamma,\beta\rangle$에 대한 비용 해밀토니안의 기댓값:

$$\langle\gamma,\beta|H_C|\gamma,\beta\rangle$$

을 계산할 수 있다. 고전적 최적화 기법을 이용해 파라미터를 조정함으로써 기댓값을 최소화하는 최적의 파라미터를 찾는다.

C. 해석적 접근

Wang et al. (2018)은 MaxCut 문제에 QAOA 를 적용할 때, 파라미터 (γ,β)를 해석적으로 추정할 수 있는 접근법을 제안하였다[2]. 이 방법은 QAOA 회로를 실제로 구성하지 않고도, 각 간선에 대해 비용 함수의 기댓값을 계산함으로써 전체 기댓값을 평가하고 최적 파라미터를 탐색할 수 있게 한다.

level 1 QAOA 에서 전체 기댓값 $F(\gamma,\beta)$는 각 간선에 대한 부분 기댓값 $\langle C_{uv}\rangle$의 합으로 표현된다:

$$F(\gamma,\beta) = \sum_{\langle uv\rangle\in E}\langle C_{uv}\rangle$$

여기서 정점 u와 v의 차수(degree)를 각각 d_u+1, d_v+1, 간선 $\langle uv\rangle$을 포함한 삼각형의 수를 λ_{uv}라 할 때, $\langle C_{uv}\rangle$는 다음과 같다:

$$\begin{aligned}&\langle C_{uv}\rangle\\&=\frac{1}{2}+\frac{1}{4}(\sin 4\beta\sin\gamma)(\cos^{d_u}\gamma+\cos^{d_v}\gamma)\\&-\frac{1}{4}\left(\sin^2 2\beta\cos^{d_u+d_v-2\lambda_{uv}}\gamma\right)\left(1-\cos^{\lambda_{uv}}2\gamma\right)\end{aligned}$$

이와 같이 각 간선의 기댓값은 해당 subgraph 의 구조적 특성 d_u,d_v,λ_{uv}에 따라 결정된다. 본 연구에서는 임의의 초기값에서 시작하여 고전적 Optimizer 를 사용해 파라미터 (γ,β)를 반복적으로 조정하면서, 위 식을 기반으로 비용 해밀토니안의 기댓값을 계산하였다. 그 결과 회로 실행 없이도 효과적인 파라미터 최적화를 수행할 수 있음을 확인하였다.

D. 비교 분석

수치 최적화 기법과 해석적 접근의 성능 비교를 위해, 동일한 그래프를 대상으로 두 전략을 적용하였다. 수치 최적화는 QAOA 에 대해 효율성이 입증[3]된 COBYLA optimizer 를 기반으로 진행되었다.

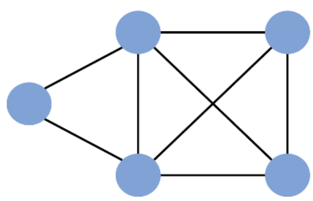

그림 2 MaxCut 인스턴스 그래프

표 1 성능 분석 결과

	Optimizer 반복횟수	근사비	실행시간 [s]
수치 최적화 기법	32.05	0.7249	9.6472
해석적 접근	38.85	0.7448	0.0909

표 1 은 동일한 그래프(그림 2)에 level 1 QAOA 를 20 회씩 반복 수행한 결과로, 각 전략별로 Optimizer 반복횟수, 근사비(계산된 MaxCut/최적 MaxCut), 실행 시간을 비교한 것이다. 해석적 접근은 수치 최적화에 비해 근사비가 더 높았으며, 특히 실행 시간 면에서 월등한 성능을 보였다.

해석적 접근에서는 각 간선의 subgraph 특성인 d_u,d_v,λ_{uv} 값만으로 기댓값을 계산할 수 있으므로, 회로 실행 없이도 빠르게 MaxCut 결과를 도출할 수 있다. 반면, 수치 최적화 방식은 최적 파라미터를 찾은 후에도 해당 파라미터로 고정된 양자 회로를 반복 실행하여 기댓값을 측정하는 과정이 필요하므로, 전체 실행 시간이 증가한다. Optimizer 반복 횟수는 해석적 접근에서 더 높게 나타났지만, 수식 기반 계산으로 인해 전체적인 시간 효율성에서는 우위를 보였다. 이러한 결과는 얕은 회로 깊이(level 1)의 QAOA 에서는 해석적 전략이 수치 최적화보다 실용적일 수 있음을 시사한다.

Ⅲ. 결 론

본 연구에서는 MaxCut 문제에 대해 QAOA 의 파라미터 설정 전략을 비교 분석하였다. 실험은 동일한 그래프 인스턴스를 대상으로, 두 전략을 각각 적용하여 반복 수행한 결과를 바탕으로 분석되었다.

분석 결과, 해석적 접근은 수치 최적화 기법에 비해 높은 근사비를 보이며, 특히 실행 시간 면에서 매우 뛰어난 효율을 보였다. 파라미터 계산에 있어 회로 실행 없이도 결과를 도출할 수 있다는 점에서, 구조 기반 해석적 전략은 실용적인 이점을 제공한다. 반면, 수치 최적화는 다양한 초기 조건과 설정에 유연하게 대응할 수 있는 장점을 가지지만, 반복 수행 및 측정 과정에서 시간과 리소스가 상대적으로 많이 소모된다.

따라서 얕은 회로 깊이의 QAOA 에서는 해석적 접근을 우선적으로 고려하는 것이 효과적일 수 있으며, 이는 실용적인 양자 알고리즘 설계에 있어 중요한 전략적 선택 기준이 될 수 있다.

ACKNOWLEDGMENT

이 논문은 2025 년도 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 정보통신기획평가원의 지원을 받아 수행된 연구임 (No. RS-2023-00225385, NISQ 환경에서 저부하, 고효율 양자 오류 경감 기술 개발 및 응용)

참 고 문 헌

[1 Farhi, Edward, Jeffrey Goldstone, and Sam Gutmann. "A quantum approximate optimization algorithm." *arXiv preprint arXiv:1411.4028* (2014).

[2] Zhihui Wang, et al. " Quantum Approximate Optimization Algorithm for MaxCut: A Fermionic View", *PHYSICAL REVIEW* A 97, 022304 (2018).

[3] Hao, Tianyi, et al. "End-to-end protocol for high-quality QAOA parameters with few shots." *arXiv preprint arXiv:2408.00557* (2024).