量子断熱計算による巡回行列の最小固有値の導出及びその計算量について

情報科学科　山田 俊宏　　　指導教員：臼田 毅

1　はじめに

量子アニーリング [1] は，組み合わせ最適化問題を解く方法であり，その量子アニーリングを基にして量子断熱計算 [2] という手法が提案された．量子断熱計算 [2] は，既存の計算方法 (古典計算) と比較すると，問題を解く方法は大きく異なっている．そのため，どのような問題に量子断熱計算が有効であるか，そのアプリケーションの開発が求められている．量子断熱計算により，従来手法よりも高速に解けるような問題は，接合木問題 [3] などが挙げられるが，まだまだ少ないのが現状である．

そこで本研究では，そのような問題例として，「巡回行列の最小の固有値を与える添え字を求めよ」という問題を量子断熱計算で解くことを考える．ここで巡回行列とは，各行ベクトルが 1 つ前の行ベクトルの要素を 1 つ巡回シフトして配置した形になっている行列のことであり，$n \times n$ の巡回行列の固有値及び固有ベクトルは，整数 $j (j \in 0, 1, \dots, n-1)$ を用いることで，一意に定まるという性質をもつ．固有値を与える添え字とは，この整数 j のことである．つまり，この問題は「巡回行列の n 個の固有値の中で，最小のものに対応する整数 $j (j = 0, 1, \dots, n-1)$ を求めよ」と言い換えることができる．本稿では，この問題を解くためのハミルトニアンを構成し，量子断熱計算の計算量を解析するために必要なハミルトニアンの固有値を計算する．

2　量子断熱計算

量子断熱計算では，以下のハミルトニアンについて考える．

$$H(t) = (1 - f(t))H_0 + f(t)H_1 \quad (0 \le t \le T) \tag{1}$$

H_0 を基底状態が自明なハミルトニアン，H_1 を時間発展終了時のハミルトニアンとし，H_1 の最小固有値に対応する固有ベクトル (基底状態) は問題の最適解を表すものとする．量子断熱計算では，H_0 の基底状態から H_1 の基底状態まで断熱定理を満たすように適切な速度で時間発展させ，各瞬間において基底状態をたどり続けることによって，アルゴリズム終了時には H_1 の基底状態へとたどり着くことができ，最適解を得ることができる．また，$f(t)$ は $f(0) = 0, f(T) = 1$ を満たす単調増加関数とする．

一般的に，量子断熱計算にかかる時間は断熱定理を用いることで見積もることができる．その定理によると，量子断熱計算にかかる時間 T は，$H(t)$ の最小固有値とその次に小さい固有値との差 $\Delta(t)$ を用いて以下のように見積もることができる．

$$T \propto \frac{1}{\min \Delta(t)^2} \tag{2}$$

なお，min は $0 \le t \le T$ の範囲で取った．以降，$\Delta_{\min} := \min \Delta(t)$ とする．

3　数値計算

本研究では，H_0 を $H_0 := I - |\psi_0\rangle \langle\psi_0|$ とし，$H_1 = C$ であると仮定する．ここで，C は $n \times n$ の半正定値の巡回行列，I は，$n \times n$ の単位行列であり，$|\psi_0\rangle$ は C の固有ベクトル $|u_j\rangle$ のすべての重ね合わせ状態を表している．$H_1 = C$ の基底状態は，$|u_j\rangle$ のうち，固有値 λ_j が最小のものとなる．この $|u_j\rangle$ に対して逆離散フーリエ変換 (IDFT) $F_n^\dagger$ を施すと，$F_n^\dagger |u_j\rangle = |j\rangle$ となることから，これを計算基底で測定することで最小の固有値に対応する添え字を求めることができる．今回は，巡回行列の固有値の固有値分布を $\lambda \in [0, 5]$ とし，行列サイズ n を $n = 2, \dots, 10$ として，各 n に対してランダムに巡回行列を 100 個生成し，$\Delta_{\min}$ を求めた．図 1 はその平均値をグラフにまとめたものである．横軸が行列サイズ n であり，縦軸が $1/\Delta_{\min}^2$ の平均値である．また $f(t) = t/T$ とした．このグラフより，$\Delta_{\min}$ の値は巡回行列のサイズに依存することがわかる．

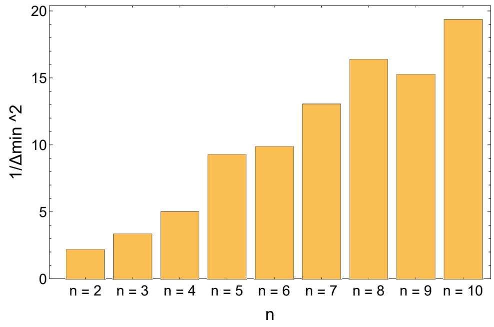

図 1　n を変化させたときの $1/\Delta_{\min}^2$ の推移

4　まとめ

本稿では，量子断熱計算によって従来手法よりも高速に解けるような問題を考えた．そして，この問題を量子断熱計算で解くためのハミルトニアン $H(t)$ を構成し，数値計算を行った．その結果，量子断熱計算の計算量は巡回行列のサイズに依存していることを確認した．従来手法を用いてこの問題を解く場合，逆べき乗法や DFT を用いた解法が考えられ，いずれの方法も少なくとも $O(n)$ の計算量が必要となる．一方，量子断熱計算を用いた場合，必要な計算量は $O(1/\Delta_{\min}^2 + \log n)$ となるので，$1/\Delta_{\min}^2 = O(1)$ もしくは $1/\Delta_{\min}^2 = O(\log n)$ となれば，従来手法より高速に問題を解くことができる．

今後の課題として，従来手法より高速に解ける条件を満たす場合に，巡回行列を構成する各要素 $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}$ がどのような値をとるのかを考察することや，例えば $n = 100$ や $n = 1000$ のように巡回行列のサイズをさらに大きくしたときに同じような傾向がみられるのか調査することなどが挙げられる．

参考文献

[1] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. **E58**, 5355 (1998).

[2] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, arXiv:quant-ph/0001106, (2000).

[3] R.D. Somma, D. Nagaj, and M. Kieferová, Phys. Rev. Lett., **109**, 050501, (2012).

公表論文

1. **山田 俊宏**, 高比良 宗一, 臼田 毅, 平成 30 年度電気・電子・情報関係学会東海支部連合大会, M1-3, (2018).