

量子アニーリングを用いたキメラグラフ上における グラフ彩色

大久保誠也

静岡県立大学 経営情報学部 経営情報学科

西野哲朗

電気通信大学大学院 情報理工学研究科 情報学専攻

Seiya OKUBO

School of Management & Information

University of Shizuoka

Tetsuro NISHINO

Graduate School of Informatics and Engineering

The University of Electro-Communications

1 はじめに

最近、米国を中心に、因数分解を高速に行える量子デジタルコンピュータの開発が本格化する一方で、カナダの D-Wave 社が市場投入している量子アナログコンピュータ（量子アニーリング機械）も注目を集めている。D-Wave の量子アニーリング機械 [9] は、スピングラス問題という NP-困難問題のみを解くことができるアナログコンピュータと見ることができる。

D-wave の量子アニーリング機械では、各量子ビットは全結線されておらず、キメラグラフと呼ばれる独特な構造を持っている。そのため、ユーザは解きたい問題をスピングラス問題に変換する必要があるが、その際には、キメラグラフ構造に埋め込めるような問題に変換する必要がある。そのような変換手法としては、キメラグラフ構造に埋め込み可能なグラフの問題に変換してから、D-Wave マシンの対応するハミルトニアンを求める方法と、逆に、D-Wave マシンのハミルトニアンを求めた後に、適当なキメラグラフに変換する方法がある [3, 13]。現状では、後者の研究が多いが、この手法の場合、理論計算機科学的な枠組みでの種々の評価が行いにくい。

そこで、本研究では、前者の研究の基礎として、キメラグラフ上でグラフの 3 彩色問題を少ない量子ビット数で解く方法を提案する。この方法が確立されれば、ユーザは解きたい問題を、まず、グラフの 3 彩色問題に変換してから、D-Wave マシン上で比較的少ない量子ビット数で所望の問題を解けるようになることが期待される。

2 諸定義

2.1 量子アニーリング

量子計算には、大きく分けて量子デジタル計算と量子アナログ計算という、2つの考え方が存在している。

量子デジタル計算機は現在の計算機の量子版であり、通常の Turing 機械に量子力学の原理を取り入れたものとしてモデル化される。1985年に、D.Deutsch は量子計算機のモデルである量子 Turing 機械を提案した [6]。さらに、1989年には D.Deutsch は量子回路の定式化を行い [5]、1993年には、A.Yao により量子 Turing 機械と量子回路の透過性が証明された [4]。そして、1994年に P.W.Shor は、整数の因数分解を多項式時間内に高い成功確率で行う量子アルゴリズムを示した [14]。また、1996年には L.K.Grover が、データベース検索に関する効率的量子アルゴリズムを提案した [8]。このように、量子 Turing 機械は通常の Turing 機械と比べて高速に計算を行うことができる可能性がある。物理的実装についても多くの研究が行われているが、大規模なものはまだ実現していない。

一方、量子力学の原理を用いて最適化問題等をアナログに解くものが、量子アナログ計算機である。そして、そのうちの一つが量子アニーリングである。量子アニーリングは量子ゆらぎを用いて最適化問題を解く手法であり、現在使用されている枠組みは、1998年に西森らによって提案された [10]。量子アニーリングを実行するハードウェアとして、D-Wave 社が世界初の商用量子コンピュータを開発して以来、盛んに研究が行われている。

量子アニーリングマシンは、イジング模型

$$H = \sum_{i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h_i \sigma_i$$

が物理的に実装されたものと考えることができる。そして、初期状態から解をしめす状態まで、物理系を変化させることにより問題を解く。初期状態のハミルトニアンを H_A 、最小化する目的関数を H_B としたとき、変化させる物理系のハミルトニアンは

$$H(t) = A(t)H_A + B(t)H_B$$

のように表現される。ここで、 $A(t)$ と $B(t)$ は時間によって変化するパラメーターであり、 $t = 0$ の時には $A(t) = 1$ と $B(t) = 0$ である。このハミルトニアンを時間変化させることにより、 $A(t)$ の値を 0 に、 $B(t) = 0$ を 1 に近づける。結果、最終状態では H_B となり、解が得られる。

D-Wave が開発した計算機は、すべての量子ビットが互いに全結線はされておらず、キメラグラフと呼ばれる構造をしている。具体的には、8ビットを1ユニットとし、それが格子状にならんで結線されることにより、計算機全体を構成する。図1に1ユニット、図2にユニットが結線された様子を示す。

全結線されていないため、物理的に離れて配置されている量子ビット間の間では直接相互作用を持つことができない。また、各量子ビットにおいて結線されている頂点にも制約がある。そのため、補助量子ビット（アンシラ）を複数用いて、隣接した複数の量子ビットで持つ値を同じにする制約を課すことにより、離れた量子ビットとの結合や、数多くの量子ビットとの結合を実現する必要がある。

各問題を解くためには、キメラグラフで解ける形に、問題をマッピングする必要がある。そのための手法も研究が行われている。キメラグラフに載せやすいグラフの問題に変換させる方法や、ハ

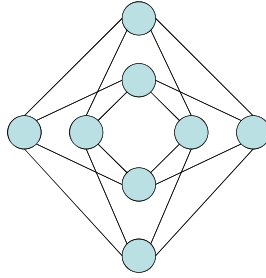


図 1: キメラグラフの 1 ユニット

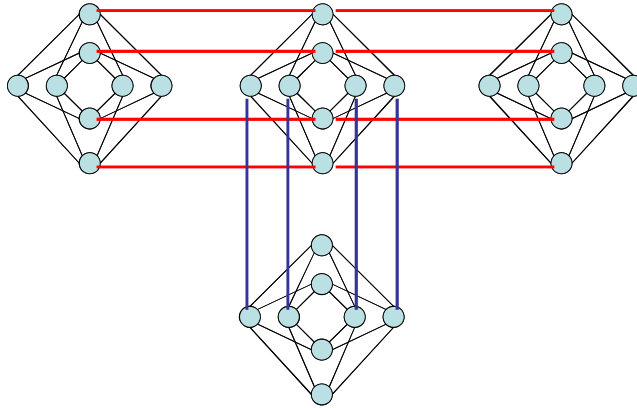


図 2: キメラグラフの結線

ミルトニアンからキメラグラフでのマッピングを直接求める方法などがある。また、マッピングを実現するためのツールも開発が進められている [1]。

2.2 グラフ彩色問題

一般的なグラフに対する 3 彩色問題は、次のように定義される。

グラフにおける 3 彩色問題 グラフ $G = \{V, E\}$ が与えられる。写像 $c: V \rightarrow \{1, \dots, k\}$ を考えたとき、どの隣接する 2 頂点 $v, y, (v, u) \in E$ に対しても $c(v) \neq c(u)$ となる c は存在するか否かを判定しなさい。

ここで、 V は頂点の集合、 E は辺の集合である。この問題は NP 完全問題であり、また実際の写像 c を求める問題は NP 困難問題となる。

この問題を解くハミルトニアンは以下ようになる [12]。

$$H = A \sum_{v \in V} \left(1 - \sum_{t=1}^3 x_{v,t} \right)^2 + A \sum_{(u,v) \in E} \sum_{t=1}^3 x_{v,t} x_{u,t}$$

ここで、 $x_{v,t}$ は 0 もしくは 1 の値をとり、各色で塗られているか否かを表現する。つまり、 $x_{v,1}, x_{v,2}, x_{v,3}$ のうち、いずれかのみが 1 となり、 $c(u) = t \Leftrightarrow x_{v,t} = 1$ である。また、 x_v, x_u は隣接する 2 頂点

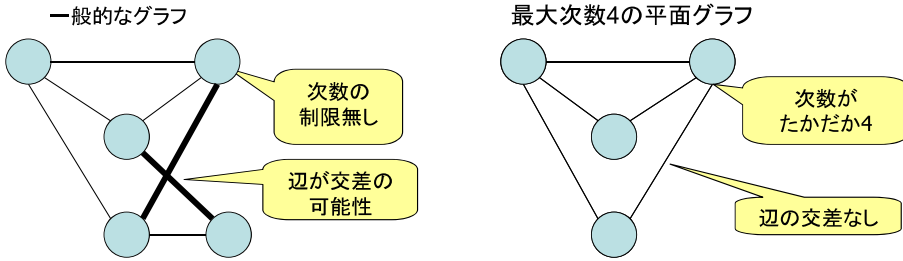


図 3: 一般的なグラフと最大次数 4 の平面グラフ

であり、同じ t に対する $x_{v,t}$ と $x_{u,t}$ は両方 1 であってはならない。そして、式の右辺中、1 つめの総和は $x_{v,t}$ のうち 1 つのみが 1 のときに最小になり、2 つ目の総和隣接する 2 頂点の同じ色に対応する $x_{v,t}x_{u,t}$ が異なる値のときに最小になる。このようなハミルトニアンを最小にする組み合わせを発見することにより、彩色の割り当てを発見することができる。

一般的なグラフは、そのまま平面に描くと辺が交差する場合がある。一方、どの 2 本の辺も交差しないグラフを平面グラフという。一般的なグラフと最大次数 4 の平面グラフの違いを、図 3 に示す。平面グラフ G の 3 彩色問題の 1 つとして最大次数 4 の平面グラフにおける 3 彩色問題が知られており、以下のように定義されている。

最大次数 4 の平面グラフにおける 3 彩色問題 最大次数 4 の平面グラフ $G = \{V, E\}$ が与えられる。写像 $c: V \rightarrow \{1, 2, 3\}$ を考えたとき、どの隣接する 2 頂点 $v, y, (v, u) \in E$ に対しても $c(u) \neq c(v)$ となる c は存在するか否かを判定しなさい。

最大次数 4 の平面グラフにおける 3 彩色問題も NP 完全問題であり、また実際の写像 c を求める問題は NP 困難問題となる。

2.3 量子セルネットワークを用いた指田の手法

最大次数 4 の平面グラフにおける 3 彩色問題を、量子セルネットワーク上で断熱量子計算 [7, 2] を行うことにより解く手法が、指田によって提案されている [16]。ここで、量子セルとは、量子ドットを 3 段に重ねたものである。図 4 に量子セルの概念図を示す。量子セル内ではいずれかの量子ドットに電子を保存することができる。そして、量子セルを並べ、隣接するもの間のみ相互作用が起きるようにしたものが量子セルネットワークである [17]。量子セルネットワークでは、各セルの間隔を等距離にした状態で、クーロン相互作用を働かせることが重要である。そこで、指田は論文 [15] に基づき、最大次数 4 の平面グラフを最大次数 4 の平面直交グラフに変換している。例を図 5 に示す。図中左の平面グラフを、図中右のように格子状に並んだグラフへ変換している。ここで、図中右の線の太さは誘電率を表しており、誘電率を調整することにより、拡張点に対応する量子セル間の相互作用を調整する。この変換は、頂点数 n の最大次数 4 の平面グラフを $n \times n$ の格子点状に直交グラフとして還元できるアルゴリズムが知られている [11]。このようにして構成された直交グラフに対して、隣接する量子セル同士では同じ位置（高さ）の量子ビットに電子がない状態になるようなハミルトニアンに設定し、断熱定理に基づく変換を行うことが、指田の提案したアルゴリズムの基本的なアイデアとなる。

指田による提案アルゴリズムは以下のようなものである。

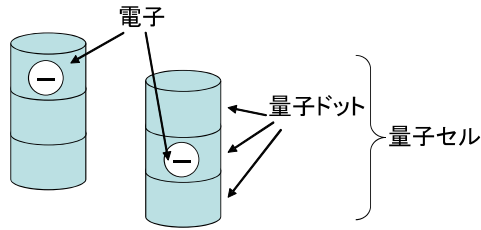


図 4: 量子セル

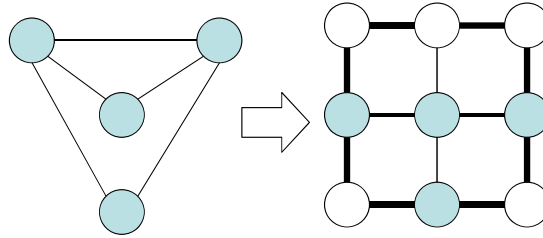


図 5: 直行平面グラフへの変換

入力 最大次数 4 の平面グラフ $G = \{V, E\}$

ステップ 1 グラフ G を [15] の手法に基づき、平面直交グラフ G' に変換する。

ステップ 3 各頂点間の結合のハミルトニアンを定める。

ステップ 4 断熱定理に基づいて状態を変化させ、出力を得る。

3 提案手法

提案手法の基本的なアイデアは、指田の結果 [16] と同様のことを、キメラグラフ上で実行できるようにすることである。

指田の研究で使用する量子セルネットワークによる実行環境と、本研究で使用する D-Wave のシステムの実行環境の比較を、図 1 に示す。各環境における構成要素は、量子セルネットワークでは 3 量子ドットの量子セルであるのに対し、D-Wave のシステムでは 8 ビットから構成されるユニットである。そして、どちらの環境においても、これらの構成要素が格子状に並んだ状態で結線される。また、どちらにおいても、ハミルトニアンにしたがって時間発展する。したがって、量子セルネットワークにおける 3 量子ドットの量子セルで行っていた表現を 8 ビットからなるユニットで表現するとともに、必要な格子状の結線を行えば、指田の手法と同様のことが D-Wave のシステム上で実行できる。

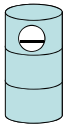
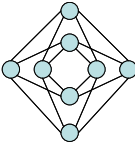
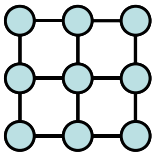
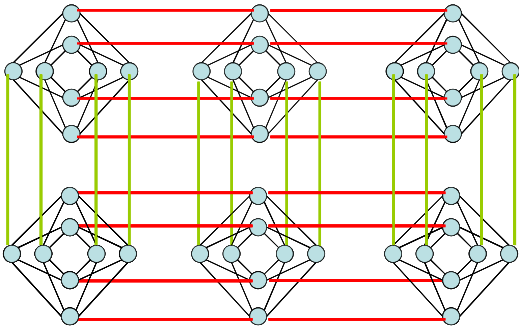
提案手法を以下に示す。

入力 グラフ $G = \{V, E\}$

ステップ 1 グラフ $G = \{V, E\}$ を平面グラフ G' に変換する。

ステップ 2 グラフ G' を [15] の手法に基づき、平面直交グラフ G'' に変換する。

表 1: 量子セルネットワークと D-Wave のキメラグラフの類似点

	量子セルネットワーク	D-Wave のキメラグラフ
構成要素	3量子ドットの量子セル 	8ビットからなるユニット 
結線	格子状に並ぶ 	格子状に並ぶ 
他	ハミルトニアンにしたがって時間発展する	

ステップ 3 G'' をキメラグラフに変換する。

ステップ 4 論文 [12] にしたがって、各頂点間の結合のハミルトニアンを定める。

ステップ 5 断熱定理に基づいて状態を変化させ、出力を得る。

ステップ 3 において、指田の結果では量子セルとして表現されていた 3 状態を、キメラグラフの 1 ユニットで表現する必要がある。図 6 に表現方法を示す。図中、 v_1, v_2, v_3 は 3 つの状態を表しており、いずれか 1 つのみが 1 となり、他は 0 となる。また、ユニット内に 2 つずつある v_1, v_2, v_3 は、同じ値をとる。このようにすることにより、 v_1, v_2, v_3 の各ビットが互いに結線され、相互作用を持つことができるようになる。

隣接頂点をキメラグラフで表現する方法を図 7 に示す。図では、頂点 v と頂点 u が結線されている様子を表しており、それぞれの頂点を表すユニット内には、 v_1, v_2, v_3 と u_1, u_2, u_3 が含まれている。このようにすることにより、隣接頂点同士の間で同じビットが結線され、相互作用を持つことができるようになる。

4 おわりに

本研究では、キメラグラフ上で彩色問題を解く方法を検討した。具体的には、量子セルネットワークとキメラグラフの類似点を検討すると共に、量子セルネットワーク上における指田の手法を、キメラグラフ上で動作させる方法の検討を行った。本提案手法で用いている最大次数 4 の平面グラフの 3 彩色問題は NP 完全問題であるため、他の問題を還元することで解くことができる。本研究では、各結線の誘電率の詳細等を検討していない。そこで、今後の課題として、実際にキメ

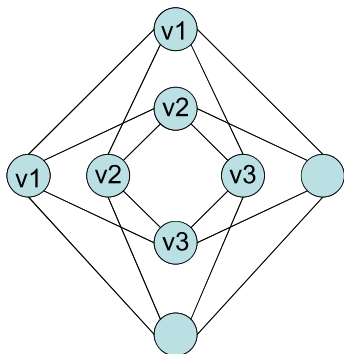


図 6: 3 彩色問題の 1 ノード

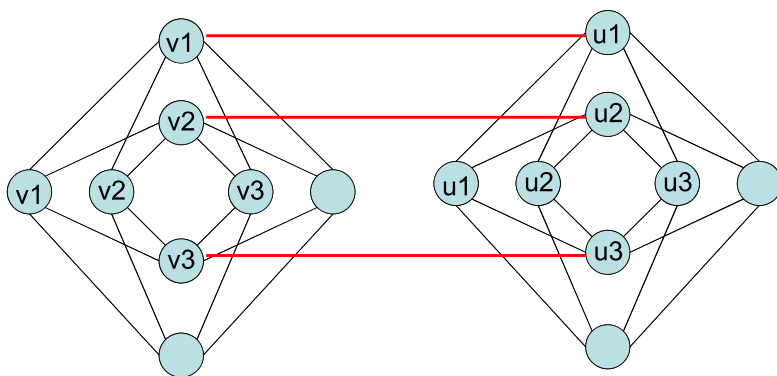


図 7: 3 彩色問題のノードの結線

ラグラフに埋め込む方法の詳細を検討するとが上げられる。加えて、提案手法の領域量等の評価を行うことがあげられる。

謝辞

This work was supported by the Research Institute for Mathematical Sciences, an International Joint Usage/Research Center located in Kyoto University.

参考文献

- [1] : Python DSL for constructing QUBOs from mathematical expressions. , <https://github.com/recruit-communications/pyqubo>.
- [2] Aharonov, D., van Dam, W., Kempe, J., Landau, Z., Lloyd, S. and Regev, O.: Adiabatic Quantum Computation is Equivalent to Standard Quantum Computation, *SIAM J. Comput.*, Vol. 37, No. 1, pp. 166–194 (2007).

- [3] Cai, J., Macready, W. G. and Roy, A.: A practical heuristic for finding graph minors, *CoRR*, Vol. abs/1406.2741 (2014).
- [4] Chi-Chih Yao, A.: Quantum Circuit Complexity, *Proceedings of the 1993 IEEE 34th Annual Foundations of Computer Science*, SFCS '93, IEEE Computer Society, pp. 352–361 (1993).
- [5] Deutsch, D.: Quantum Computational Networks, *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 425, pp. 73–90 (1989).
- [6] Dutsch, D.: Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer, *Proc. R. Soc. Lond.*, Vol. A400, pp. 97–117 (1985).
- [7] Farhi, E., Goldstone, J., Gutmann, S. and Sipser, M.: Quantum Computation by Adiabatic Evolution, *quant-ph/0001106* (2000).
- [8] Grover, L.: Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack, *Physical Review Letters*, Vol. 79, No. 2, pp. 325–328 (1997).
- [9] Johnson, M. W., Amin, M. H. S., Gildert, S., Lanting, T., Hamze, F., Dickson, N., Harris, R., Berkley, A. J., Johansson, J., Bunyk, P., Chapple, E. M., Enderud, C., Hilton, J. P., Karimi, K., Ladizinsky, E., Ladizinsky, N., Oh, T., Perminov, I., Rich, C., Thom, M. C., Tolkacheva, E., Truncik, C. J. S., Uchaikin, S., Wang, J., Wilson, B. and Rose, G.: Quantum annealing with manufactured spins, *Nature*, Vol. 473, No. 7346, pp. 194–198 (2011).
- [10] Kadowaki, T. and Nishimori, H.: Quantum annealing in the transverse Ising model, *Phys. Rev. E*, Vol. 58, pp. 5355–5363 (1998).
- [11] Kant, G.: Drawing planar graphs using the canonical ordering, *Algorithmica*, Vol. 16, No. 1, pp. 4–32 (1996).
- [12] Lucas, A.: Ising formulations of many NP problems, *Frontiers in Physics*, Vol. 2, No. 5, pp. 1–15 (2015).
- [13] Pakin, S.: A quantum macro assembler, *2016 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC)*, pp. 1–8 (2016).
- [14] Shor, P.: Algorithms for Quantum Computation : Discrete Log and Factoring, in *Proceedings of the 35th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science* (1994).
- [15] Wocjan, P., Janzing, D. and Beth, T.: Treating the Independent Set Problem by 2D Ising Interactions with Adiabatic Quantum Computing, *Quantum Information Processing*, Vol. 2, No. 4, pp. 259–270 (2003).
- [16] 指田真宏: 断熱量子計算による3彩色問題の解法に関する研究, 電気通信大学大学院電気通信学研究科 電子情報学専攻 修士論文 (2004).
- [17] 鶴木博: 量子セルネットワークによるアナログコンピューティング, 電気通信大学電気通信学部電子工学科卒業論文 (1999).