社団法人 電子情報通信学会
THE INSTITUTE OF ELECTRONICS,
INFORMATION AND COMMUNICATION ENGINEERS

信学技報
TECHNICAL REPORT OF IEICE.

Feynmanの2つの提唱からグラフと計算量への展開

今井 浩[†,††,†††]

† 東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻 〒113–8656 東京都文京区本郷 7–3–1
†† 東京大学ナノ量子情報エレクトロニクス研究機構
††† JST ERATO-SORST 量子情報システムアーキテクチャ
E-mail: †imai@is.s.u-tokyo.ac.jp

あらまし ナノテクと量子力学計算に関する Feynman の提案から、グラフ理論での周期的グラフやグラフマイナー理論への展開、そして量子計算量理論での量子対話証明への展開の流れをまとめて、これからの課題を明らかにすることを目指す。
キーワード 量子計算、グラフ理論、量子計算量

Exploration from Two Proposals by Feynman to Graphs and Computational Complexity

Hiroshi IMAI[†,††,†††]

† Dept. Computer Science, IST, University of Tokyo Hongo 7–3–1, Bunkyo-ku, Tokyo, 113–8656 Japan
†† INQIE, University of Tokyo
††† JST ERATO-SORST Quantum Computation and Information
E-mail: †imai@is.s.u-tokyo.ac.jp

Abstract Reviewing proposals on nanotechnology and quantum computing by Feynman from the current viewpoint, we show their exploration in graph and complexity theory, and reveal current issues of these fields.
Key words Quantum computing, graph theory, quantum time complexity

1. はじめに

Feynman は、今ナノテクノロジーと呼ばれている分野を 1959 年に提唱し [7]、また量子コンピュータの構想、特に量子コンピュータによって物理力学のシミュレーションを指数爆発しないでできることについて構想している [8], [9]。これらは現在の量子情報技術の研究状況から鑑みれば、非常に先見性があったものであることがわかる。ナノテクノロジーで原子を 1 つ 1 つ操作して所望の原子配置を得ることは研究レベルでは実現されているし、量子力学シミュレーションを量子コンピュータが効率よくできることも理論的に示されている。一方、量子コンピュータの開発や、量子計算の古典計算との差の解明などまだ未解決な事項も多い。このような中で、Feynman の構想の現状をみて、今だから見えてくる点を考えるのは意味があると思われる。

本稿では、Feynman の提唱・構想の原点を踏まえ、現在の量子計算研究の展開の中で様々に現れるグラフ理論や量子計算量の問題を見たときに、Feynman の構想時にはまだ見えてこなかった事柄や新しい展開について、種々の事柄の間の関係と若干の考察を記述していく。

2. 原子の再配置

ナノテクノロジーは現在では広く使われている用語であるが、Feynman はその呼称がまだ提案されていない時期にこの分野の研究を進める必要性を指摘していた。Feynman は 1959 年末のアメリカ物理学会の講演 [7] において、

> "Why cannot we write the entire 24 volumes of the Encyclopedia Brittanica on the head of a pin?"

という将来目標を示すことから始め、原理レベルの操作実現に言及し、与えられた原子配置から、原子を再配置して所望の原子配置を実現する課題に触れ、化学的安定性等も考慮しながら 1 つ 1 つ操作することを

> "What would happen if we could arrange the atoms one by one the way we want them"

と語っている。

原子を再配置することは、Eigler, Schweizer [6] が STM を用

いて達成した。Sugimoto, Abe, Hirayama, Oyabu, Custance, Morita [21] は AFM を用いて、表面結晶格子上の隣接原子を交換する操作によって、原子の再配置できることを示し、さらに Sugimoto, Pou, Custance, Jelinek, Abe, Perez, Morita [22] は隣接原子交換でなく交換型垂直原子操作による再配置できることも示している。森田、杉本、阿倍 [15] の解説においては、Feynman の問題提起から始めてその新しい技術について解説されている。

表面結晶格子構造は規則性をもつグラフとみなせる。原子再配置全体を自動化することは、グラフ上での動作計画を設計する問題を解くことによって可能になる。グラフの立場からは、規則性をもつ無限な場合も許したグラフの上に n 個のチップ (対象原子に対応) が初期配置されており、その最終的配置位置も与えられたとき、隣接点にチップを動かすことを 1 点には高々1 つのチップしかおけない条件のものでどのようにチップを動かしていくかという動作計画を設計する問題となる。このグラフでの動作計画問題は、動作計画が常に可能であるのか理論的に解析し実際に動作計画を求めること、常に可能ではない場合に与えられた入力で可能であるのか判定する計算量を明らかにすること等が問題となる。このような問題はコンピュータ科学の様々な場面で現れる問題で、Călinescu, Dumitrescu, Path [2] の論文が一般の場合の諸問題の解析をし、またサーベイもよくされている。

Fu, Imai [11] は正方格子の場合についてさらに効率化を図り、動作計画の出力もコンパクトなものを与えている。Fu [10] はそれを L_1 埋込み可能グラフのあるクラスまで拡張している。さらに夫、今井らは、平面タイリングを表面結晶構造のよいモデルとみなして、Chavey [4] の正多角形へのタイリングについて調べている [10], [12]。Chavey の分類は、同一正多角形のみによる isohedral タイリングは 3 角格子、正方格子、ハニカム格子の 3 つがあり、複数の正多角形への isogonal タイリングはカゴメ格子を含めて 8 つあることを示している。。夫、今井らはこれらについての解析も行っている。Fu [10] の結果によれば、最少重み 2 部マッチング問題について正方格子の場合は Vaidya [24] の結果によって $O(n^2 \log n)$ 時間で解くことができけるが、3 角格子、ハニカム格子の場合は $O(n^2 (\log n)^2)$ 時間で解くことができる。

上述の AFM での隣接原子交換による動作計画問題の場合、任意の入力で可能であり、動作計画も 2 部グラフの最少重みマッチング問題（割当問題）を解くことによって構成することができる。正方格子など表面結晶格子の典型的なものの場合、土台となっている平面幾何構造を活用することで、その 2 部グラフの最少重みマッチング問題が高速に解ける。

その動作計画を高速に立てるためのグラフと幾何の活用に触れる。その問題では自然と結晶格子が出てくるが、同様にその構造は量子計算の測定ベース量子計算の計算資源の量子グラフ状態のグラフとしても出てくる。量子グラフ状態が万能な量子計算を実現する資源となっているかは、グラフのクリーク幅・ランク幅というグラフマイナー理論で導入された性質による特徴づけが知られている。本稿では量子グラフ理論の節でさらに一歩進んで、グラフマイナーの他の成果を適用することに触れる。

3. 量子力学シミュレーションと量子計算量

Feynman は 1981 年の MIT Physics of Computation Conference の講演において、量子力学シミュレーションを今のコンピュータで正確にしようとすると指数爆発が起こるのに対し、量子コンピュータならその問題が起こらずに実行できるであろうことについて論じている [8]。さらに、量子コンピュータについても、1984 年の CLEO/IQEC の基調講演で、量子コンピュータの原理についても検討を加えている [9]。量子力学の諸計算は現在でもスーパーコンピュータをより早くする原動力にもなっており、科学技術計算の将来の限界と展開を見通していたといえる。

量子力学シミュレーションが量子コンピュータで高速に行えるという議論は、Lloyd [16] によって肯定的な解決方向が理論的に示されて以来、量子計算において量子力学シミュレーションの範囲を拡大することが研究課題となっている。一方、量子コンピュータが量子力学の問題を計算で解くことについて万能的にパワフルなわけではないこともわかってきた。計算量理論の MAX SAT に対応する k-Local Hamiltonian 問題が、Kitaev らによって調べられ、最終的に 2-local Hamiltonian 問題が QMA-完全であることが示されている [13]。他のいくつかの重要な問題も QMA-完全やさらには QMA に属するかわかっていないが量子多証明者対話証明計算量クラスの QMA(2)(Kobayashi, Matsumoto, Yamakami [14]) に属するという特徴的な問題もある。ここから得られるレッスンは

量子コンピュータで解く対象問題の計算困難さを示すこと

である。Feynman の言及で量子計算量について言及されているが、2000 年頃からの量子計算量理論の研究進展によって初めて、量子計算でも難しそうということが示せるようになっており、今の時代ではそれを踏まえて簡単な問題をわざわざ量子コンピュータで解くのではなく、今のコンピュータで難しいとわかっている問題で量子コンピュータでなんとかなりそうなもの、さらには量子計算量理論で難しいと思われる問題への挑戦が必要ということである。

4. 量子彩色数からパーフェクトグラフへ

量子多証明者対話証明の 2 証明者 1 ラウンド版は、量子非局所性のモデルも含んでおり、その対応をもとにこれまで量子グラフ彩色数 (Quantum chromatic number) というグラフ彩色数の拡張がなされている。量子非局所性の観点からグラフの彩色数の問題をモデル化・解析した中期の成果は Cleve, Hoyer, Toner, Watrous [5] にまとめられている。Avis, Hasegawa, Kikuchi, Sasaki [1] は量子彩色数 (Quantum Chromatic Number) という用語を用い、その結果はさらに Cameron ら [3] で拡張されている。

ここまで 2 証明者 1 ラウンド量子対話証明のモデルとグラフの彩色問題について述べてきた。一般に、彩色数はパーフェ

クトグラフ理論でキーとなる問題である。他のキーとなる概念に、完全部分グラフであるクリークに着目して最大クリークの数を与えるクリーク数、点部分集合でその中の任意の 2 点についてその間の枝がない安定集合に着目して最大安定集合 (独立点集合ともいう) の数を与える安定数 (stable number) がある。パーフェクトグラフ定理は 21 世紀初頭で強定理が示された時点でひとまず完成したといえる。そこまでに至る過程で弱定理の証明とそれに続くグラフの Shannon 容量の問題で Lovász の theta 関数が導入され、その theta 関数の安定数との関係で組合せ最適化に対する半定値計画緩和の開発が行われている。これら問題は、量子測定の問題とも関係している。さらに、ごく最近 Lovasz の theta 関数の量子版の提案もされているところである。グラフ理論側からは量子測定と量子通信路容量との関係、さらに両方での半定値計画緩和の観点から興味深いテーマとなっている。

5. 測定ベース量子計算とグラフマイナー理論

測定ベース量子計算 (Measurement-Based Quantum Computing) では、計算資源として用いる初期状態としてグラフ状態と呼ばれる量子状態を用意する。グラフ状態は文字通りグラフに対して定義されており、グラフ理論と直結している。Van den Nest, Miyake, Dür, Briegel [23] は、量子ベース量子計算が任意の量子回路をシミュレートできる (万能計算能力であるための必要条件が、グラフのランク幅を拡張したエンタングルメント幅が無限に大きくできることであることを示した。さらに、正方格子以外に、ハニカム格子、3 角格子、カゴメ格子が万能計算能力を有することも示している。

グラフのランク幅そしてその論文でさらに用いられているクリーク幅というのは、グラフマイナー理論の中で出てきた概念である。グラフマイナー理論は、Robertson と Seymour らにより [19] から [20] までの一連の論文で築かれたものである。無向グラフのマイナーとは、そのグラフから枝の削除と縮約 (枝の両端点を 1 点にまとめ、元の枝を削除する操作) を繰り返して得られるグラフをいう。マイナーに関して古典となっている定理は、平面グラフの特徴付けに関する Wagner の定理で、グラフが平面グラフであるための必要十分条件が、それが 5 点の完全グラフ K_5 と 3 点 3 点の間の 9 本の枝のみもつ完全 2 部グラフ $K_{3,3}$ をマイナーとしてもたない (それらを禁止マイナーという)、というものである (マイナーと少し違った部分構造を考える Kuratowski の定理の方が有名)。グラフマイナー理論では、木幅 (tree width) というグラフの「木らしさ」を表す特徴量を導入し、木幅が有限なグラフのクラスは、有限個の禁止マイナーで特徴づけられるという定理が中心となっている。また、同じように重要な定理に、木幅が十分に大きなグラフは、ある程度大きな正方格子をマイナーとして含む、というものがある。十分とかある程度大きいというのは該当する論文を参照されたい。

マイナーは枝を中心とした操作であるといえる。枝中心のマイナーに関してグラフマイナー理論が確立された頃から、Oum [18] らによって、点が中心のグラフマイナー理論も展開をされてきている。点を中心としたとき、グラフから点の削除、点の局所補操作 (点に隣接する点の誘導部分グラフをその補グラフにする) を繰り返して得られるものを点マイナーという。枝中心の場合と類似した成果が点マイナーについても上げられつつあるが、枝の場合ほどには至っていない。

測定ベース量子計算に戻ると、万能計算能力をもつ最も基本的なグラフは正方格子であった。その正方格子はグラフマイナー理論で非常に重要な役割を果たす。また、ハニカム格子、3 角格子、カゴメ格子が万能計算能力をもつという [23] の証明は、実はそれらの点マイナーとして正方格子が得られるというものであった。最近の Miyake [17] の論文ではハニカム格子が出てきている。なので、グラフマイナー理論の枝中心の場合の定理が直接適用できるわけではないが、点マイナーでも正方格子がなんらかの役目を果たしている可能性もある。グラフ状態の万能計算可能性に点マイナーが対応するのは、点に関する 2 つの操作が量子誤り訂正符号に関連して Pauli 行列 σ_x, σ_z に対応するからで、点マイナーに関する研究は量子計算側からもされ始めているところであり、今後の研究の展開が期待できる。

格子構造は、前半の原子操作による所望の原子配置の実現のところでも触れた。量子計算側では次の命題が成り立つ。

命題. Chavey の正多角形へのタイリングの分類で、isohedral なもの 3 つ (3 角、正方、ハニカム格子) と isogonal なもの 8 つ (カゴメ格子を含む) に対応するグラフ状態は、万能計算能力を有する。□

ナノスケールの世界で、原子という単位があり、量子化されているところで、このような格子構造は自然と重要な役割を果たすことになる。その意味でもグラフマイナー理論と量子計算を融合した研究の方向性は面白いと思われる。

謝　　辞

一般の格子を表現する周期グラフ等で多くの議論をして頂いた夫紀恵氏に感謝する。

文　　献

[1] D. Avis, J. Hasegawa, Y. Kikuchi and Y. Sasaki: A Quantum Protocol to Win the Graph Colouring Game on all Hadamard Graphs. *IEICE Trans. Fundamentals*, Vol.E89A (2006), pp.1378–1381.

[2] G. Călinescu, A. Dumitrescu, and J. Pach. Reconfigurations in Graphs and Grids. *SIAM Jounal on Discrete Mathematics*, Vol.22 (2008), pp.124-138.

[3] P. J. Cameron, A. Montanaro, M. W. Newman, S. Severini and A. Winter: On the Quantum Chromatic Number of a Graph. *Electronic Journal of Combinatorics*, Vol.14, #R81 (2007), 15pp.

[4] D. Chavey: Tilings by Regular Polygons — II, A Catalog of Tilings. *Computers Math. Applic.*, Vol.17, Nos.1-3 (1989), pp.147–165.

[5] R. Cleve, P. Hoyer, B. Toner, J. Watrous: Consequences and Limits of Nonlocal Strategies. *Proc. 19th IEEE Annual Conference on Computational Complexity (CCC)*, 2004, pp.236–249.

[6] D. M. Eigler and E. K. Schweizer: Positioning Single Atoms with a Scanning Tunnelling Microscope. *Nature*, Vol.344 (1990), pp.524–526.

[7] R. Feynman: There's Plenry of Room at the Bottom. *Engineering and Science*, Vol.23 (1960), pp.22-36; available at

http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html.

[8] R. Feynman: Simulating Physics with Computers. *International Journal of Theoretical Physics*, vol.21, Nos.6/7 (1982), pp.467–488.

[9] R. Feynman: Quantum Mechanical Computers. *Opt. News*, Vol.11 (1985), pp.11–46; reprinted in R. P. Feynman: Quantum Mechanical Computers. *Foundations of Physics*, Vol.16, No.6 (1986), pp.507–531.

[10] N. Fu: Analysis of Geometric Structures of Periodic Graphs and Applications for Fast Algorithms. Master's Thesis, Department of Computer Science, University of Tokyo, 2000.

[11] N. Fu and H. Imai. Shictability of Atoms on a Lattice to Any Configuration in Minimum Moves. *Proc. the Japan-Korea Workshop on Algorithms and Computation*, 2008, pp.28–35.

[12] N. Fu, H. Imai and S. Moriyama; Voronoi Diagrams on Periodic Graphs. *Proc. 2010 International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering (ISVD 2010)*, Quebec, 2010, pp.189–198.

[13] J. Kempe, A. Kitaev and O. Regev: The Complexity of the Local Hamiltonian Problem. '*SIAM Journal on Computing*, Vol.35, No.5 (2006) pp.1070–1097.

[14] H. Kobayashi, K. Matsumoto, and T. Yamakami: Quantum Merlin-Arthur Proof Systems: Are Multiple Merlins More Helpful to Arthur? *Chicago Journal of Theoretical Computer Science*, Article 3 (2009), 19pp.

[15] 森田清三、杉本宜昭、阿部真之: 力学的原子操作による原子埋め込み文字の室温組立. 機能材料, Vol.29, No.5 (2009), pp.28–33.

[16] S. Lloyd: Unviersal Quantum Simulations. *Science*, Vol.273. No.5278 (1996), pp. 1073 - 1078.

[17] A. Miyake: Quantum Computational Capability of a Two-Dimensional Valence Bond Solid Phase. arXiv:1009.3491, 2010.

[18] S. Oum: Rank-Width and Vertex-Minors. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, Vol.95, No.1 (2005), pp.79-100.

[19] N. Robertson and P. Seymour: Graph Minors. I. Excluding a Forest. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, Vol.35, No.1 (1983), pp.39-61.

[20] N. Robertson and P. Seymour: Graph Minors. XX. Wagner's Conjecture. *Journal of Combinatorial Theory, Series B*, Vol.92, No.2 (2004), pp.325–357.

[21] Y. Sugimoto, M. Abe, S. Hirayama, N. Oyabu, Ó. Custance and S. Morita: Atom Inlays Performed at Room Temperature Using Atomic Force Microscopy. *Nature Material*, Vol.4 (2005), pp.156–160.

[22] S. Sugimoto, P. Pou, Ó. Custance, P. Jelinek, M. Abe, R. Perez and S. Morita: Complex Patterning by Vertical Interchange Atom Manipulation Using Atomic Force Microscopy. *Science*, Vol.322 (2008), pp.413–417.

[23] M. Van den Nest, A. Miyake, W. Dü, and H. Briegel: Universal Resources for Measurement-Based Quantum Computation. *Physical Review Letters*, Vol.97, 150504 (2006), 4pp.

[24] P. Vaidya: Geometry Helps in Matching. *SIAM Journal on Computing*, Vol.18, No.6 (1989), pp.1201–1225.