

断熱量子コンピューティングによる 巡回セールスマン問題の解法

中原幹夫,¹ 坂東将光,^{2,3} 田中宗

〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1 近畿大学

¹ 〒518-0459 三重県名張市春日丘7-1 近畿大学工業高等専門学校

² 〒169-8050 東京都新宿区西早稲田1-6-1 早稲田大学高等研究所

³ 〒332-0012 埼玉県川口市本町4-1-8

国立研究開発法人科学技術振興機構 さきがけ

(Received 平成29年1月10日)

概要

巡回セールスマン問題とは、 N 都市と各都市間の距離が与えられたとき、セールスマンが N 都市すべてを1回ずつ訪問し、かつその全距離を最小にする経路を探す問題である。古典的にはすべての可能性を列挙して、その中で最小距離の経路を求めればよいが、それには $N!$ 程度のステップが必要となる。これはNP困難とよばれるクラスに属する問題で、 N が大きくなると実用的ではない。最近、量子コンピュータを用いて、この問題を解く方法が提案され、注目されている。これは断熱的量子コンピューティングと言われる手法であり、実用的な量子コンピュータが存在すれば、 N に関して多項式時間で問題が解けると期待される。実際には古典コンピュータを用いて、シミュレーテッド・アニーリングや量子アニーリングとよばれる手法で問題を解くのであるが、本論文では、教育面に重点を置いて、4都市の問題を表現するシュレーディンガー方程式を直接解き、解法の原理的デモンストレーションを行う。

keywords: 巡回セールスマン問題, 断熱量子コンピューティング

1 はじめに

巡回セールスマン問題は、NP困難なクラスの典型的な問題である。あるセールスマンが N 都市を巡回する。都市 i と j 間の距離を L_{ij} とすると、

巡回の順序 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_N$ が決まれば、セールスマンが旅行する距離が

$$L = \sum_{k=1}^N L_{i_k i_{k+1}} \quad (1)$$

と決まる。ただし、周期的境界条件を課し、 $i_{N+1} = i_1$ とした。すなわち、セールスマンは、最後は出発した都市 i_1 に戻ってくる。巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem; 以下 TSP と略記) とは、順序 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_N$ のうち、 L が最小となるものを求めるも問題である。都市の数 N が小さいときは、 $N!$ 通りのすべての順序を書き下し、それぞれに対して L を求めて、そのうち最小のものを見つければ問題は解ける。しかし N が大きくなると、これは実質的に不可能となる。例えば、 $100! \sim 10^{157}$ となり、これらをすべて尽くすことは不可能である。

本論文では、最近提案された量子コンピュータを使った TSP の解法を紹介する。これは、統計力学模型であるイジング模型を用いて巡回セールスマン問題を定式化し、このイジング模型の基底状態を求める問題に帰着させる方法である。現実には、古典コンピュータでこのイジング模型の基底状態を得るため、シミュレーテッド・アニーリングや量子アニーリング [1, 2] とよばれる手法が用いられており、 $N \sim 1,000$ くらいまでは問題を解くことができる。しかし、本論文では、教育的な立場から、 $N = 4$ の場合に実際にシュレーディンガー方程式を解いて、その原理を説明する。また、その過程で問題を簡約化する様々なテクニックも併せて紹介する。

次章では、固有値が経路に対する距離を与えるハミルトニアンを定義する。3章では、このハミルトニアンの基底状態を求める方法を解説する。基底状態は TSP の解を与え、対応する固有値が最短距離を与える。4章では、 $N = 4$ の場合にシュレーディンガー方程式を解き、それが TSP の解を与えることを実証する。5章では、まとめと展望を行う。

¹固有値 1 に対応する固有ベクトルを $|0\rangle$ 、0 に対応する固有ベクトルを $|1\rangle$ とするのは不自然に思われるかもしれないが、通常量子情報ではパウリ行列 σ_z の固有値 1 に対応する固有ベクトルを $|0\rangle$ 、-1 に対応する固有ベクトルを $|1\rangle$ とするので、その習慣を継承した。

2 ハミルトニアン

演算子

$$n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

を定義する。 n は固有値 1 と 0 を持ち、それぞれに対応する固有ベクトルは

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で与えられる。¹

I_2 を 2 次の単位行列として、

$$n_k = I_2 \otimes I_2 \otimes \dots \otimes n \otimes \dots \otimes I_2 \quad (3)$$

とする。ただし n は k 番目の位置にある。

さて、 N 都市があり、セールスマンがそれを i_1, i_2, \dots, i_N の順番で巡回して元の都市 i_1 に戻ってくる。ただし i_1, i_2, \dots, i_N は $1, 2, \dots, N$ の置換である。都市 i と j の間の距離を $L_{ij} (i < j)$ とすると、この巡回で旅行した距離は

$$\sum_{k=1}^N L_{i_k i_{k+1}} \quad (4)$$

となる。ここで、この距離を固有値としてもつハミルトニアンを考えよう。それには都市 $1 \sim N$ を縦に並べ、それを N 回コピーしたものを横に並べて正方形をつくる (図 1)。

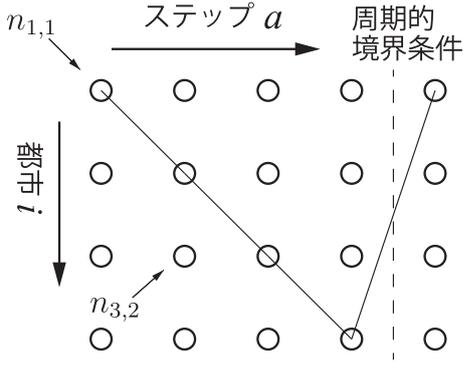


図 1: $N = 4$ の場合の系の配置. \circ は都市を表す. i は都市の番号で, a は巡回のステップの番号である. $n_{3,2}$ は第 2 ステップにおける 3 番目の都市を表す. 線は巡回を表し, 図中の線は $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ という巡回を表す.

ステップ 1 からは最初のステップで滞在する都市を選び, ステップ 2 からは 2 番目のステップで滞在する都市を選ぶ. 都市を i で, ステップを a で表すと正方形の各点は座標 (i, a) で表される. そこでハミルトニアン

$$H_0 = \sum_{i,a} L_{ij} n_{i,a} n_{j,a+1} \quad (5)$$

を考えよう. 全系のヒルベルト空間は, \mathbb{C}^2 の $N^2 = 16$ 回のテンソル積で与えられるが, それを $\{(1, 1), (1, 2), (1, 3), (1, 4); (2, 1), \dots; (3, 1), \dots; (4, 1), \dots, (4, 4)\}$ の順番に並べる. ただし最初の数字は i (都市に関する添字) を, 次の数字は a (ステップに関する添字) を表す. 図 1 は $N = 4$ 都市の例であるが, そこで $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ という巡回を行ったとする. 滞在した都市のベクトルを $|0\rangle$, 滞在しなかった都市のベクトルを $|1\rangle$ とすると, この巡回に対応するベクトルは

$$|\psi\rangle = |0111; 1011; 1101; 1110\rangle$$

となる. これに H_0 を作用させると

$$H_0|\psi\rangle = (L_{12} + L_{23} + L_{34} + L_{14})|\psi\rangle$$

となることが容易に確かめられる. したがって $|\psi\rangle$ は H_0 の固有ベクトルで, 対応する固有値は, 与えられた巡回の総距離を表している. これから, TSP の解を求めることは, H_0 の最小固有値と基底状態 (最小固有値に対応する固有ベクトル) 求めることに帰着するように思われる. しかし, 例えば $1 \rightarrow 1 \rightarrow 1 \rightarrow 1 \rightarrow 1$ に対応するベクトル

$$|\psi'\rangle = |01111; 01111; 01111; 01111\rangle$$

に対しては $H_0|\psi'\rangle = 0$ となるが, これは TSP の経路には対応しない.

上の不都合は, 制限

- 巡回の中で, 各都市を 1 回だけ訪問する.
- 巡回の各ステップで, 訪問中の都市は 1 つだけである.

を考慮していなかったために生じる. そこで, これらの制限を破る経路に「ペナルティ」を課すことにする. すなわち, ハミルトニアンに, これらの制限を破る経路に対する固有値を大きくする項を加えるのである. それには

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 = & \sum_{i,a} L_{ij} n_{i,a} n_{j,a+1} \\ & + \gamma \left[\sum_{a=1}^N \left(\sum_{i=1}^N n_{i,a} - I \right)^2 \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{a=1}^N n_{i,a} - I \right)^2 \right] \quad (6) \end{aligned}$$

として, $\gamma \in \mathbb{R}$ を十分大きくとればよい. ただし I は 2^{N^2} 次の単位行列. このようにすれば, \tilde{H}_0 は, $\sum_{i=1}^N n_{i,a}$ や $\sum_{a=1}^N n_{i,a}$ が固有値 1 をもつ部分空間でのみ H_0 と同じ固有値を持ち, その直交補空間

では γ に比例する大きな固有値を持つので、基底状態を与えることはない。以下、(6)を単に H_0 とよぶ。

H_0 の固有値は一般に $2N$ 重に縮退していることに注意する。それは経路 $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_N \rightarrow i_1$ と、それを逆に辿る経路 $i_1 \rightarrow i_N \rightarrow \dots \rightarrow i_2 \rightarrow i_1$ が同じ距離を与えるからである。また、出発点をどの都市にとるかで N 通り考えられるので、合計 $2N$ 重の縮退をすることになる。

3 断熱量子コンピューティング

H_0 は明らかに対角行列であるが、 N が大きいときにその対角要素は 2^{N^2} 個あり、その中から最小値を探すのは容易ではない。そこで、本節では断熱量子コンピューティング [3, 4, 5, 6] を用いて、基底状態と最低固有値を求める方法を紹介する。

H_0 と非可換で、その基底状態が既知であるハミルトニアンを H_1 とする。ここでは H_1 として

$$H_1 = -B \sum_{i,a=1}^N \sigma_{i,a} \quad (7)$$

をとる。ここに

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

で

$$\sigma_{i,a} = I_2 \otimes \dots \otimes I_2 \otimes \sigma \otimes I_2 \otimes \dots \otimes I_2 \quad (9)$$

である。ただし (i, a) 番目の I_2 を σ で置き換えてある。 σ の固有値は $+1, -1$ で、対応する固有ベクトルは

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

である。したがって、 H_1 の基底状態が

$$|\Psi_0\rangle = |+\rangle^{\otimes N^2} \quad (10)$$

となることは、直ちに分かる。また $[H_0, H_1] \neq 0$ も明らかであろう。

ここで、時間に依存するハミルトニアン

$$H(t) = H_0 + f_T(t)H_1 \quad (11)$$

を考える。ただし $f(0) = 1$ で、 $f_T(t)$ は、時間スケール T で 0 に近づく。(例えば $f_T(t) = e^{-t/T}$ など。) $[H_0, H_1] \neq 0$ のときは、一般にその固有値は縮退しないことが「準位反発」として知られている [7, 8]。さらに、 $f_T(t)$ の時間変化のスケール T が、準位間の最小ギャップ Δ の逆数に比べて、充分ゆっくり変化すれば(すなわち $T \gg 1/\Delta$)、最初 $H(0)$ の k 番目の固有状態であった状態は、任意の時刻 $t > 0$ においても $H(t)$ の k 番目の固有状態にとどまる、仮定より、 H_1 は H_0 に比べて十分大きいので、 $H(0)$ の固有ベクトルは $|\Psi_0\rangle$ とおいてもよい。

これらのことから、 H_0 の基底状態を求めるには以下のプロトコルを実行すれば良いことが分かる。

1. ハミルトニアン $H(0)$ のもとで、系を $|\Psi_0\rangle$ にセットする。
2. $f_T(t)$ を充分ゆっくり変化させて、シュレーディンガー方程式

$$i \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\Psi(t)\rangle \quad (12)$$

に従って、系を時間発展させる。ただし $\hbar = 1$ とした。

3. T に比べて十分時間がたってから $|\Psi(t)\rangle$ を観測すると、それは十分大きな確率で H_0 の基底状態になっている。

4. 基底状態が分かると、対応する経路が読み取れ、それから総距離が求められる。

次節では、これを $N = 4$ の場合に具体的に実行する。

4 4都市の TSP

以下では、今まで述べたことのデモンストレーションとして、 $N = 4$ の場合を具体的に解く。また、図2の4都市とその間の距離を考える。

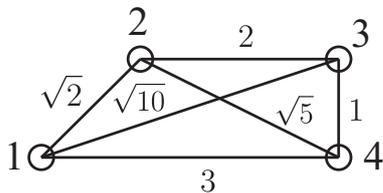


図2: $N = 4$ の場合の都市と都市間の距離。○は都市を表す。都市と都市を結ぶ線の数字は距離を表す。例えば $L_{13} = \sqrt{10}$ 。

直接計算すればわかるように、制限を満たす経路には図3の3通りある。図3には、対応する総距離も与えた。我々の目的は、図3(a)の経路を観測で求めることである。

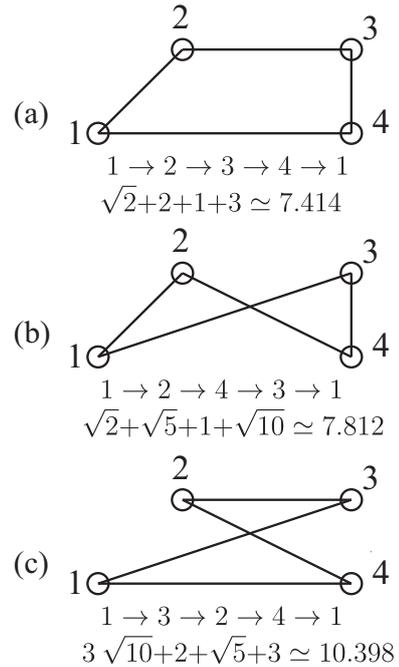


図3: 制限を満たす3種類の巡回経路。(a)の総距離が最も小さく、TSPの解になっている。

まず $\gamma = 10$ において H_0 の固有値問題を解く。ここで、以下の点に注意して、ハミルトニアン次元を大幅に縮小する。出発点は任意に取ることができるので、 $n_{1,1}$ の固有ベクトルを、固有値1に対応する $|0\rangle$ にとる。すると、2つの制限から、 $n_{1,a}$ ($a = 2, 3, 4$) の固有値は0、および $n_{i,a}$ ($i = 2, 3, 4$) の固有値は0に限ることができる。

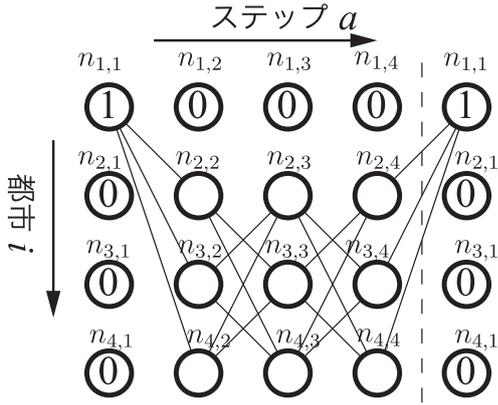


図 4: $n_{1,a}, n_{i,1}$ の固有値が固定されたハミルトニアン. L_{ij} は図に記入されたものだけを考慮すればよい. また, \circ で表された都市のみが, 量子力学的自由度を持つ.

すなわち, 問題をこの部分空間で解くことに帰着させる. これらの固有値をハミルトニアンに代入すると図 4 の L_{ij} だけを考慮すればよいことが分かる. 特に固有値を 0 と置いたサイトはハミルトニアンから落とすことができる. その結果, 自由度としては図 4 で 9 個の \circ のみを考慮すればよく, ハミルトニアンの行列としての次数は $2^{16} = 65536$ から $2^7 = 128$ と大幅に削減できる. $n_{1,1}$ は固有値が 1 に固定されているので, 外場とみなすことができる.

Mathematica を使って, H_0 の固有値を求めると, 小さいものから

7.41421, 7.41421, 7.81256, 7.81256, 10.3983,
10.3983, 23.4142, 23.4142, 23.6503, 23.6503,
24., 24., 24.1623, 24.1623...

となる [9]. 最初の 2 つは図 3(a) に, 次の 2 つは図 3(b) に, 次の 2 つは図 3(c) の距離を与えているこ

と分かる. また最初の 6 個の固有値と, そのあとの固有値の間には大きなギャップがあることに注意されたい. ギャップの上の固有値は 2 つの制限を満たさない巡回の対応しており, γ に比例するペナルティが現れている. 固有値が $2N$ 重ではなく, 2 重縮退しているのは, 出発した都市を 1 に固定したからである. 最低固有値 7.41421 に属する固有ベクトルは, 経路 $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$ に対応する $|g_1\rangle = |011; 101; 110\rangle$ と $1 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ に対応する $|g_2\rangle = |110; 101; 011\rangle$ である. この固有空間への射影演算子は

$$P_g = |g_1\rangle\langle g_1| + |g_2\rangle\langle g_2| \quad (13)$$

となる.

さて, 断熱量子コンピューティングで, TSP の解を求めるために, $H(0)$ の基底状態の固有ベクトル $|\Psi_0\rangle$ を初期値として, $f(t) = e^{-t/T}$, $B = 100$ ととり,

$$H(t) = H_0 - e^{-t/T} 100 \sum_{i,a} \sigma_{i,a} \quad (14)$$

のシュレーディンガー方程式

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle, \quad |\Psi(0)\rangle = |\Psi_0\rangle \quad (15)$$

を数値的に解く. 本来, 初期値は H_1 の固有ベクトル $|+\rangle^{\otimes 9}$ にとるべきであるが, $|\langle \Psi_0 | + \rangle^{\otimes 9}|^2 = 0.975$ であり, その差はわずかである. さらに, B の値を大きくすることによりこの差はより小さくなる.

図 5 に, 各時刻における $H(t)$ の固有値のうち, 小さなものをプロットした. $f(t)$ が有限な間は, 縮退は見られないが, t が大きくなり, $f(t)$ が小さくなると, H_0 の 2 重縮退が回復することがみられる.

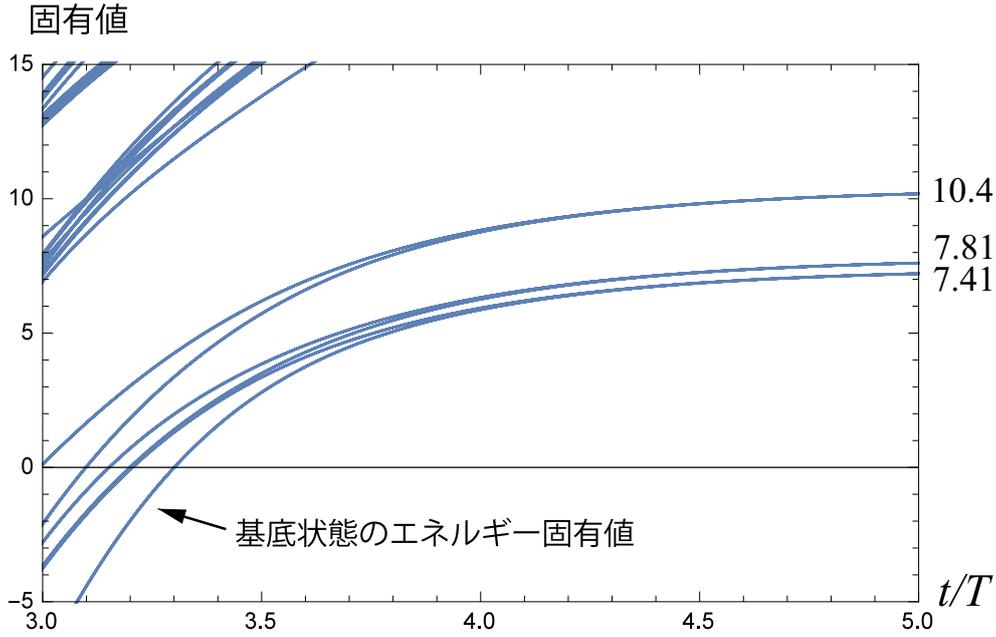


図 5: $3 \leq t/T \leq 5$ において, $H(t)$ の固有値を下から数個プロットした. $H(5)$ において, 下から 3 つの固有値は図 3 の 3 つの経路の総距離を与える.

時間に依存するシュレーディンガー方程式の解は, $[0, t]$ を N 個の微小区間 Δt に分け, 時刻 $t_k = k\Delta t$ における時間推進演算子 $e^{-iH(k\Delta t)\Delta t}$ を順番にかけて

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iH(N\Delta t)\Delta t} e^{-iH((N-1)\Delta t)\Delta t} \times \dots \times e^{-iH(\Delta t)\Delta t} |\Psi_0\rangle \quad (16)$$

と求められる. ただし $t = N\Delta t$ である.

以下の計算では $\Delta t = 0.001$ ととる. $T = 1$ のとき, $t = 5T = 5$ における波動関数 $|\Psi(5)\rangle$ を観測して, 正しい解が得られる確率を求めると

$$\langle \Psi(5) | P_g | \Psi(5) \rangle = 0.518 \quad (T = 1, t/T = 5) \quad (17)$$

となる. この確率で $|g_1\rangle$ または $|g_2\rangle$ が観測されるのであるが, この 2 つのベクトルの違いは巡回の向きだけであるので, どちらが観測されるかは重

要ではない. 確率が 1 とならないのは, $H(t)$ の時間変化が速く, 基底状態から励起状態への遷移が起こったからである. また, $t/T = 5$ では, まだ H_1 の影響が残っており, 完全に断熱変化をしたとしても, $H(5)$ の基底状態と, H_0 の基底状態の重なりは 0.990 である.

一方, $T = 5$ ととると, $t = 5T = 25$ における波動関数 $|\Psi(25)\rangle$ を観測して正しい解が得られる確率は

$$\langle \Psi(25) | P_g | \Psi(25) \rangle = 0.776 \quad (T = 5, t/T = 5) \quad (18)$$

となり, $T = 1$ の場合に比べて改善がみられる.

5 まとめと補足

断熱量子コンピューティングを使った巡回セールスマン問題の解法を, 4 都市の場合に具体的に

示した。都市の数が増えて N 都市となると、ハミルトニアンは次数が 2^{N^2} となり、古典コンピュータによるシュレーディンガー方程式の数値解法では対処できない。しかし、このハミルトニアンを実装する物理系があれば、 $\sim N^2$ の距離 L_{ij} を入力して、 $H(t)$ のシュレーディンガー方程式にしたがって系を時間発展させるだけで、解が求められる。最近では、D-Wave と呼ばれる量子アニーリング・ハードウェアが作成されており、大きな注目

を集めている [10].

実際の解法では、ここにあげなかったシミュレーテッド・アニーリング法や量子アニーリング法を用いて、古典コンピュータでも $N \sim 1,000$ 程度までの解が求められる [11, 12]. 一方、本論文ではその原理を示す立場から、シュレーディンガー方程式を直接解くことにより、 $N = 4$ の場合の解法を具体的に示した。

参考文献

- [1] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, *Science*, **220** (1983) 671.
- [2] S. Kirkpatrick, *J. Stat. Phys.* **34** (1984) 975.
- [3] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E*, **58** (1998), 5355.
- [4] T. Kadowaki, “Study of Optimization Problems by Quantum Annealing”, Ph. D. thesis, Department of Physics, Tokyo Institute of Technology, 1998. [arXiv:quant-ph/0205020]
- [5] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, D. Preda, *Science*, **292** (2001), 472.
- [6] S. Tanaka, R. Tamura, B. K. Chakrabarti, “Quantum Spin Glasses, Annealing and Computation”, Cambridge University Press, In press.
- [7] 中原幹夫, 「量子物理学のための線形代数—ベクトルから量子情報へ」, 培風館 (2016).
- [8] P. A. Lax, “Linear Algebra and Its Applications (2nd ed.)”, Wiley-Interscience, (2007).
- [9] Mathematica ファイルは
<http://alice.math.kindai.ac.jp/~bando/pub/TSP/TSP.pdf>
から pdf 版がダウンロードできる.
- [10] <http://www.dwavesys.com/>
https://www.youtube.com/watch?v=EAOPp_5YBBM
<http://www.slideshare.net/RecruitCommunications/quantum-computing-and-dwave>

- [11] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti, Phys. Rev. E **70** (2004) 057701.
- [12] S. Tanaka and R. Tamura, “Quantum Annealing from the Viewpoint of Statistical Physics, Condensed Matter Physics, and Computational Physics” in Kinki University Series on Quantum Computing Vol. 8 “Lectures on Quantum Computing, Thermodynamics and Statistical Physics”, ed. M. Nakahara and S. Tanaka, World Scientific (2012).