

令和元年6月5日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K12392

研究課題名(和文)マトロイド分解理論・不変多項式と量子物理の融合による計算論的組合せ物理の研究

研究課題名(英文)Computational Combinatorial Physics by Harmonizing Matroid Theory and Quantum Physics

研究代表者

今井 浩 (IMAI, Hiroshi)

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

研究者番号：80183010

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：マトロイドの分解理論とTutte多項式理論の研究を組合せ物理と融合し、計算論的組合せ物理という面からの研究を行った。Iceモデルとその拡張の6点モデルに対して、carving幅に関するFPTアルゴリズム構成した。Pottsモデルで枝幅に関するFPTアルゴリズムも構成した。Tutte多項式に関するMerino-Welsh予想に関して、グラフの枝の向き付けに関する問題を計算解析してTutte予想の一部解決を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来、数理物理において数学と物理の両面から研究されてきた組合せ物理において、計算解析を行うアルゴリズムの開発と、本研究グループメンバーが構築した組合せ構造のデータベースを活用した解析を行うことによって、新たに計算論的組合せ物理という研究アプローチを示した。融合する諸分野の理論予想の一部解決も行え、アルゴリズム論からはFPTアルゴリズムの有用性を広げた。物理モデルの量子情報処理との関係を通じた量子コンピュータへ研究を展開することが期待できる。

研究成果の概要(英文)：This research aimed at harmonizing matroid theory and combinatorial physics to analyze combinatorial and physical problems by developing efficient algorithm for their computational analyses. We devised FPT algorithms for computing the partition function of ice-type mode with respect to the carving width of a target underlying graph. We also developed an FPT algorithm to evaluate the partition function of Potts mode. Concerning the Merino-Welsh conjecture on the Tutte polynomial, related to Lieb's square ice constant, we performed computational analyses, and obtain counterexamples to its variant.

研究分野：アルゴリズム論

キーワード：アルゴリズム 固定パラメタ容易性 点モデル Pottsモデル Tutte多項式 グラフ向き付け

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

「組合せ物理」(Combinatorial Physics)は、組合せ論を適用して物理問題を解くとともに、物理的洞察をもって組合せ問題を解いて両分野を融合した成果創出を行う先端研究分野である。20世紀中に交代符号行列と Ice model の関係に関する予想が解決され、近年もその発展形の新予想が解決されている。その元の予想を解決した Kuperberg のアプローチでは、有限の格子での数え上げを行列のパフィアン・行列式に帰着することが鍵となっている。半世紀前の 2 次元格子 Ising model の分配関数においても、Kasteleyn の方法でもパフィアンへの帰着が鍵となって、当時の統計物理とグラフ理論が出会った成果となっている。Ising model の場合ではそのような効率的帰着が行われて有効にコンピュータで解析ができていたものの、他の事例でそのような計算解析は限られていた。半世紀ほど前に ice model に関して Lieb の square ice constant に関する漸近的成果が与えられているものの、非漸近的な面の計算解析は限定的な範囲を出てこなかった。

2. 研究の目的

本研究では、「組合せ物理」(Combinatorial Physics)に対して、さらに効率的に計算できるものはどのようなものであるかを明らかにする等の観点から組合せ物理を発展させ、それを組合せ論の分野で展開することを目指す。物理分野として数理論理、特に量子情報を対象に、組合せ論からはマトロイド不変多項式と有向マトロイドの組合せ代数幾何との間の理論展開を軸として取り組む。

これによりマトロイドの不変多項式である Tutte 多項式や、有向マトロイドの代数幾何構造をもつ離散構造を用いて、Lieb の square ice constant の成果に触発された Tutte 多項式の凸性に関する Merino-Welsh 予想の計算解析や、グラフ向き付けの数理論理問題との関係を深化させることを行う。Tutte 多項式の特殊な場合として表現できる統計物理の Ising 多項式・Potts 多項式の計算や量子多体系のテンソルネットワークによるシミュレーション、そしてこれら不変量と関係する量子情報を橋渡しとして量子計算でのアルゴリズムへと展開する萌芽的な成果を得ることに向けて、融合分野でのアルゴリズムに関する基盤となる成果を創出することを行う。

3. 研究の方法

研究代表者の今井は全体の研究進展を統括しながら、計算論的組合せ物理における計算・組合せ論の側面、物理側の側面さらにその融合の側面から、連携研究者(当初 2 年度; 延長期間は研究協力者)の森山(日本大学文理学部情報科学科・教授)と研究協力者の平石(東京大学情報理工学系研究科・助教)と以下のように分担を決め、連携しながら研究を推進していく。

【組合せ物理の組合せ論側から物理側への研究】この方向への研究については、代表者の今井とともに連携研究者の森山と研究協力者の平石が、本グループの先行研究であるマトロイドに関するマイナー理論(分解定理)・表現論・不変多項式に対する計算援用も活用した成果を精査し、そこでの課題点と拡張方向を整理することから研究を行う。元々はグラフの Tutte 多項式に関するものである Merino-Welsh 予想を、本研究グループが開発・整備したマトロイドデータベースを用いて、より広い範囲での計算解析を行う。

【組合せ物理の物理面から組合せ論面への展開】この方向へは研究代表者の今井が研究協力者の平石とともに、グラフの向き付け(orientations)が種々の物理問題と関係している点に着目して、ice model の場合が Eulerian orientations と関係している点を、他の点モデルや Ising/Potts モデルでの展開を試みる。グラフの acyclic orientations は、グラフ超平面配置のセルに対応し、このような超平面配置の一般化である有向マトロイドにおける不変量の観点からも調べる。

【量子情報における組合せ物理として】今井と平石とで、組合せ物理の観点から MPS, MERA, PEPS とこれらグラフ・マトロイドの分解との関係を詳細に調べ、そこからハミルトニアンシミュレーションや線形方程式をコンパクトに解く量子アルゴリズムとの関係についても調べて、新規成果を創出することを目指す。

4. 研究成果

(1) ice model と Eulerian orientations

Lieb の square ice constant は、無限格子グラフの極限での ice model のエネルギーを正規化したものといえる。有限格子での収束性や離散的性質を調べることを念頭に、有限グラフにおける ice model を考え、その分配関数を計算するための FPT アルゴリズムを開発することに成功した(次節の 5 節論文リストの[3,6])。我々が知る限り、代表的パラメタに関してこの問題に関して典型的なパラメタに関する FPT アルゴリズムはないと認識している。本研究では、carving 幅に関する FPT アルゴリズムを構築した。carving 幅は、グラフの点の最大次数以上になってしまうという点で、一般のグラフに関してはパラメタとして弱い面があるが、ice model を通常考えるグラフではその次数は定数で抑えられており(平面格子なら 4)、その弱さが問題にならない場合である。論文[3]ではまず各点での重みが同一の場合を考え、その場合には分配関数は Eulerian orientations の個数で与えられることから、それを求める FPT アルゴリズムを直接的に構成している。論文[6]ではそのアルゴリズムを拡張して、重み版の問題もほぼオーバーヘッドなく解けることを示した。このアルゴリズムを用いた計算解析は今後の課題

として残っているが、このアルゴリズム開発を通してグラフの他のタイプの向き付け問題へと研究を進めることができている。

(2) acyclic/totally cyclic orientations

グラフの acyclic orientations, totally cyclic orientations に関する成果を論文[9,13,20,21]で与えた。acyclic orientations は統計物理でも出てくる chip-firing ゲームや parking function とも関係しており、また Lieb の square ice constant に触発されたグラフ・マトロイドの Merino-Welsh 予想「この 2 つの orientations の数の大きい方は、グラフの木の数以上である」とも関係する。Eulerian orientation の他の orientations が普遍的に物理のモデルで現れたものといえる。

本研究では、この 2 つの orientations を列挙・数え上げる FPT アルゴリズムを構築した。ここで用いるパラメータはグラフのパス幅・枝幅であり、この代表的なグラフ幅の値が限定される場合に問題が容易に解けることを示した。

(3) Merino-Welsh 予想とその拡張の計算解析

上記(2)で出ている Merino-Weish 予想について、我々が開発・整備したデータベースもフルに活用して、計算解析を行った。その成果としては、Merino-Welsh 予想が 2 変数 Tutte 多項式のそれら変数の線形関係での凸性に関する予想に拡張できる点について、従来のものとはある程度離れたところではその凸性が成り立たない反例を見つけた。現在、そのような反例を構成的に列挙できるかどうかを調べている。

Tutte 多項式の 2 変数それぞれに着目した単峰性・log-concave 性に関する関連予想については、これまで知られていた反例が単純でない並列枝をもつグラフであった点を改善して、単純なグラフでかつ枝数はより少ない反例を見出すことができている。こちらについてもどの性質が単峰性を満たさなくするのかを調べている。

(4) 量子計算との関係

論文[8]での統計物理での Ising モデルの分配関数を計算するアルゴリズムで、枝幅に関して FPT 性を満たすものを開発している。本グループで従来から取り組んできた Ising モデルと測定型量子計算モデルとの関係、また木テンソルネットワークとの関係の観点からも、アルゴリズムの構造そして計算量に関する橋渡しとなる結果を得た。また、この成果を端緒として、新たに量子アニーリングでの Ising モデルの基底状態（最小エネルギー状態）を求める問題が核となっている点からアプローチすること、上記成果をグラフの枝幅とともにランク幅と量子情報でのエンタングルメント幅との関係等も踏まえて量子計算へと展開することについて、基礎的なレベルでの研究を進めている。量子アニーリングについては、古典ヒューリスティクスとの関係をまずは比較した成果を得た(論文[4,5,11,19,22])。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 14 件)

- [1] Farley Soares Oliveira, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Revisiting the Top-Down Computation of BDD of Spanning Trees of a Graph and Its Tutte Polynomial. IEICE Trans. Fundamentals, Vol.E102-A, No.9, Sep. 2019, to appear.
- [2] Farley Soares Oliveira, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: FPT Algorithms to Enumerate and Count Acyclic and Totally Cyclic Orientations. The X Latin and American Algorithms, Graphs and Optimization Symposium (LAGOS 2019), Electronic Notes in Theoretical Computer Science, to appear.
- [3] Hidefumi Hiraishi, Hiroshi Imai, Sonoko Moriyama, Shuma Okamura, and Shinya Shiroshita: Smallest Counterexamples for Convexity and Log-concavity of the Tutte Polynomial. The 11th Hungarian-Japanese Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, Tokyo, May 2019.
- [4] Hidefumi Hiraishi, Hiroshi Imai, Yoichi Iwata, and Bingkai Lin: Parametrized Algorithms to Compute Ising Partition Function. IEICE Trans. Fundamentals, Vol.E101-A, No.9 (2018), pp.1398-1403.
<https://doi.org/10.1587/transfun.E101.A.1398>
- [5] Hidefumi Hiraishi and Sonoko Moriyama: Excluded Minors of Rank 3 for Orientability and Representability. IEICE Trans. Fundamentals, Vol.E101-A, No.9, 2018, pp.1355-1362.
<https://doi.org/10.1587/transfun.E101.A.1398>
- [6] Kanto Teranishi, Hiroshi Imai, and Hidefumi Hiraishi: Simulated Quantum Annealing versus Breakout Local Search for Benchmark Dataset on NP-hard Problems. 18th Asian Quantum Information Science Conference (AQIS 2018), Nagoya, 2018.
- [7] Naosuke Shindo, Hidefumi Hiraishi and Hiroshi Imai: Parameterized Algorithm to Compute the Partition Function of Potts Model with Branch Decomposition. The 21st

- Japan-Korea Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2018), 2018.
- [8] Farley Soares Oliveira, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: A BDD Approach to Counting Problems in Graphic Arrangements. Proceedings of the 21st Japan-Korea Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2018), Session 4:2, 2018.
 - [9] Shinya Shiroshita, Tomoaki Ogasawara, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: FPT Algorithms Exploiting Carving Decomposition for Eulerian Orientations and Ice-Type Models. Proceedings of the Workshop on Algorithms and Computation (WALCOM 2018), Lecture Notes in Computer Science, Vol.10755, 2018, pp.216-227.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-75172-6_19
 - [10] Hyonsoku Chang, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Comparing Simulated Annealing with Simulated Quantum Annealing on Max-cut and Other NP-Hard Problems. 17th Asian Quantum Information Science Conference (AQIS 2017), Singapore, 2017.
 - [11] Hyonsoku Chang, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Experimental Evaluation of Annealing Metaheuristics for NP-hard Problems. Proceedings of the 20th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2017), Session 4:2, 2017, 8pp.
 - [12] Shinya Shiroshita, Tomoaki Ogasawara, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: An FPT Algorithm for Counting the Number of Eulerian Orientations Exploiting Carving Decomposition. Proceedings of the 20th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation (WAAC 2017), Session 3:4, 2017, 8pp.
 - [13] Jean-Francois Baffier, Vorapong Suppakitpaisarn, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Parametric Multiroute Flow and Its Application to Multilink-Attack Network. Discrete Optimization, Vol.22, Part A (2016), pp.20-36.
<https://doi.org/10.1016/j.disopt.2016.05.002>
 - [14] Akitoshi Kawamura, Sonoko Moriyama, Yota Otachi, and Janos Pach: A Lower Bound on Opaque Sets. Proceedings of the 32nd Symposium on Computational Geometry (SoCG 2016), 2016, pp.46:1-46:10.
<https://doi.org/10.4230/LIPIcs.SocG.2016.46>

〔学会発表〕(計 9 件)

- [1] 寺西 寛人, 今井 浩, 平石 秀史: Simulated Quantum Annealing と Breakout Local Search の NP-hard 問題に対する実験的な比較. 情報処理学会アルゴリズム研究会, Vol.2019-AL-172, No.7:1-4, 2019, .
- [2] Farley Soares Oliveira, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Parameterized Algorithms for Tutte Polynomial Specializations in Graph Orientations. 情報処理学会アルゴリズム研究会, Vol.2019-AL-172, No.4:1-5, 2019.
- [3] Farley Soares. Oliveira, Hidefumi Hiraishi, and Hiroshi Imai: Graph Orientations and Their Use in Modelling the Physical Sciences. 3rd ETH Zurich-UTokyo Strategic Partnership Symposium on the UN Sustainable Development Goals and Innovation, January 2019.
- [4] 今井浩: 最大カット問題と量子計算 --- 常識の「嘘」も考えながら (招待講演). 日本 OR 学会最適化とその応用研究部会未来を担う若手研究者の集い, 筑波, 2018-06.
- [5] 張亨碩, 橋本朔弥, 平石秀史, 今井浩: 制限付きボルツマンマシンに対する経路積分モンテカルロ法の実験的評価. 人工知能基本問題研究会, 104, 2017, pp.5-10.
- [6] Hidefumi Hiraishi and Hiroshi Imai: A Note on Extended Formulations of Lower-truncated Transversal Polymatroids. The fifth International Conference on Continuous Optimization, Tokyo, August 2016.
- [7] Sonoko Moriyama, Bernd Gaertner, Hiroshi Imai and Hiroyuki Miyazawa: Geometric Optimization Related with an LCP with SPD-matrices. The fifth International Conference on Continuous Optimization, Tokyo, August 2016.
- [8] Hidefumi Hiraishi and Sonoko Moriyama: $Q[x]$ -representable Excluded Minors for Q -Representable Matroids of Rank Three (invited talk). 2016 International Workshop on Structure in Graphs and Matroids, Eindhoven, Netherlands, July 2016.
- [9] Sonoko Moriyama and Hidefumi Hiraishi: Excluded Minors for Matroids of Rank Three (invited talk). SIAM on Conference on Discrete Mathematics, Atlanta, USA, June 2016.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況（計 0 件）

〔その他〕

ホームページ等

<http://qci.is.s.u-tokyo.ac.jp/~imai/>

6．研究組織

(1)研究分担者

該当者なし

(2)研究協力者

研究協力者氏名：森山 園子（日本大学文理学部情報科学科・教授）

ローマ字氏名：(Moriyama, Sonoko)

(当初 2 年度は連携研究者、延長 1 年度の間は協力研究者)

研究協力者氏名：平石 秀史（東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻・助教）

ローマ字氏名：(Hiraishi, Hidefumi)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。