

ATS 2021 1304
豊橋技術科学大学 高専連携教育連携プロジェクト

KEG上におけるS+の実装

量子トポロジーの量子計算への応用と世界トップの軌道解析

茨城工業高等専門学校 4年生 山田海音

目次

- ▶ 本研究の位置づけと応用例
- ▶ 今回の目標
- ▶ 結び目とは
- ▶ 結び目オイラーグラフ(KEG)とは
- ▶ KEGの同値判定
- ▶ S+とは
- ▶ KEGにおけるS+の実装
- ▶ 計算量の比較



本研究の位置づけと 応用例1：量子誤り訂正

目的：量子計算におけるエラー検出(量子誤り訂正)の性能評価

量子計算を安全かつ正確に行うには必須の量子誤り訂正という手法があり、その性能の評価を数学的な方面からできるようにしたい。

→ 「結び目のクロスキャップ数」というものを用いて計算できる

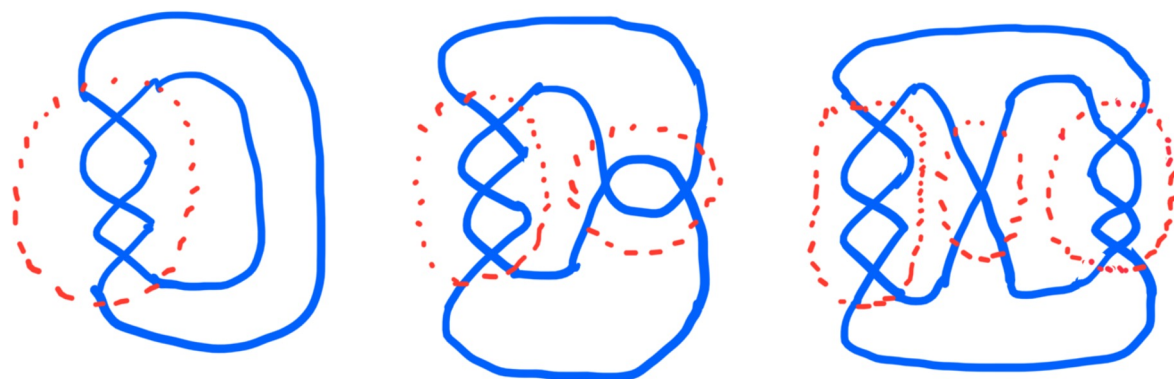
応用例2：粒子の軌道解析

目的：空間内の粒子の軌道解析

空間を移動する粒子の軌道は紐と対応しているため、結び目のクロスキャップ数を計算することで粒子の軌道が計算できる。医療工学、材料工学など他分野に応用できる。

→複雑な軌道を高速に計算するために**クロスキャップ数**を求める。

クロスキャップ数とは



結び目のツイスト(赤丸の部分)の数とほぼ対応している。
今回の目的は「あるクロスキャップ数の結び目の列挙」

これまでの活動

- 結び目の同値判定に関する論文を「JP Journal of Geometry and Topology」に投稿(2021年11月に査読付き国際誌に出版)
- 高専機構からのプレスリリース
- 高専機構 理事長賞(対象は51高専の全高専生)を受賞

記録の更新

現在の世界記録：クロスキャップ数 3 までの列挙

今回のアルゴリズムでは1秒でクロスキャップ数 10^5 までの列挙が可能

計算リソースがあれば $10^6 \sim 10^7$ までにはリスト化が可能

→世界記録の大幅な更新が可能

今回の目標

クロスキャップ数を求める(格段に)効率の良いアルゴリズム
の提案と実装



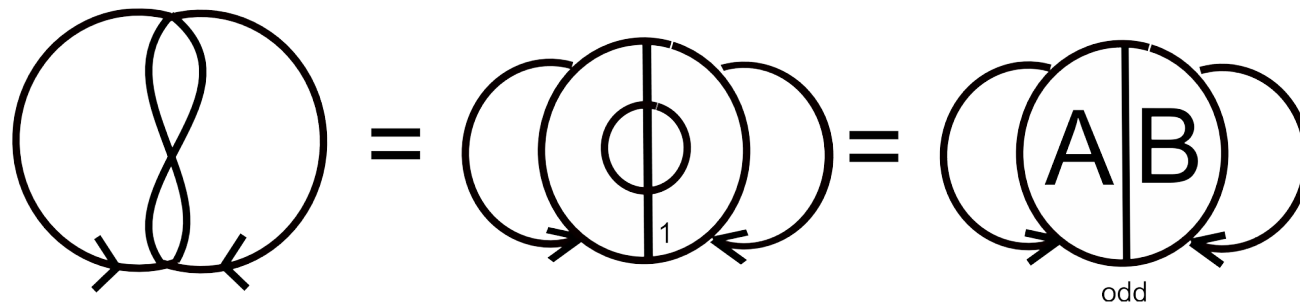
結び目とは

- ▶ 3次元空間に埋め込まれた円周（閉じた紐）のこと
- ▶ 結び目は無限個あり、どれくらいの複雑さであるかを調べる指標の一つが結び目を境界とする曲面であり、100年ほど前から研究されてきた
- ▶ この曲面が最大のオイラー数を持つ時、1からオイラー数を引いたものを**クロスキャップ数**という。クロスキャップ数の決定は未解決問題
- ▶ トポロジカル量子符号など量子計算への応用が期待されている

結び目オイラーグラフとは

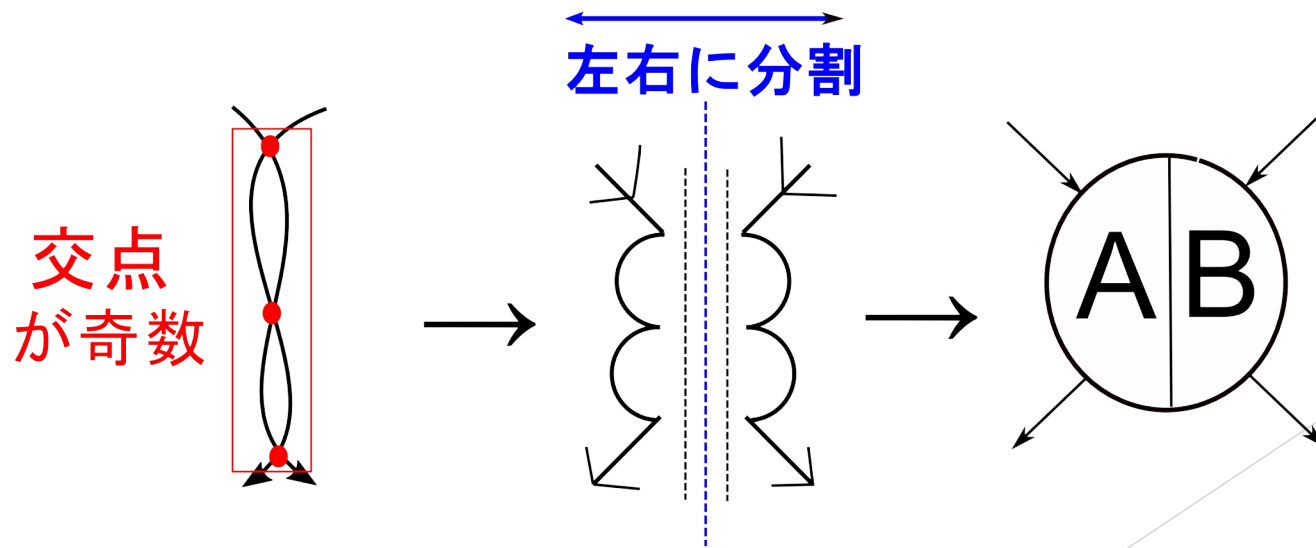
目的：結び目をデータ構造として定義し、プログラム上で操作できるようにする。

→ツイストを頂点に変換したグラフとして表現

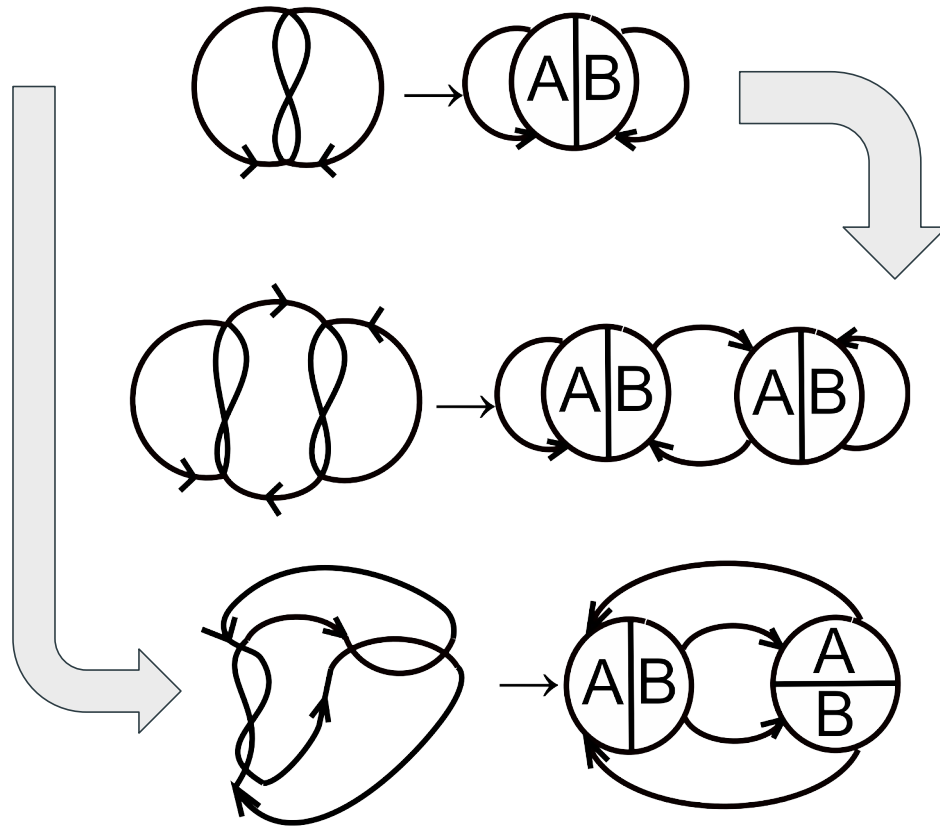


結び目オイラーグラフとは

このようなグラフをKnot Eulerian Graph (KEG) として定義。
いふなれば「2頂点を一つにまとめた特殊なグラフ」

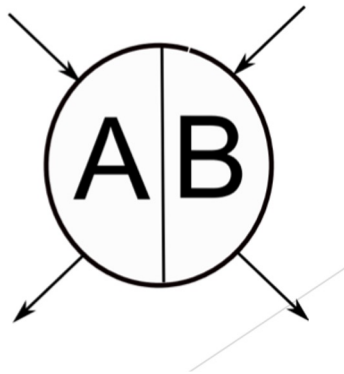


Knot -> KEGの例



KEGの同値判定

各頂点について、ラベル(A/B)が逆になっていたり、頂点番号(データ構造としての表現の際必要になる。整数。)が違っていても、**グラフとしての同値性を判定できるアルゴリズム**を考案した。



※理論や実装については前出の論文
(<https://arxiv.org/pdf/2105.14453.pdf>)やGitHubリポジトリを参考

同値判定の計算量改善

N: クロスキャップ数 として、
 $O(N \cdot N! \cdot 2^N) \rightarrow O(N^2)$ に改善

現在の最高記録の13交点は6頂点以下なので、計算回数が
 $276480 \rightarrow 36$ に改善される。(約8000倍の高速化)

アルゴリズムの改善がわかりやすいのはNが大きいとき
 $\rightarrow N=10^8(100万)$ などを見るとわかりやすい

同値判定の計算量改善

N=1000(1000頂点)の時愚直なアルゴリズムだと

```
431161412594705058816523456061757271340179686893986206500474320235824002211094750157829731286563658018733230923147958984
770605905794543457645674019143830995190938525025766739716103025316804170488482376563849308203398197601513052241775898116
886631695837287995110283042789978181735720998001111355851549869894666999408651197920432155672803050047648380043053694887
773089860380374331813698834497424173585061125860187444925078266610187072121920467902791595633392271022966772171029655295
869866824173147120550282964103062017166323451249966069187455775415681871175850677673609036321219985198555513839232865570
345807697388592247626378442315526492375827428963580891859050094092499299113640481516837593784630091694739029702308184831
979454564689958124499297969261046443317476591382254167767853049157697668051585600670963723714208792249723407331046728592
020005706051243886738078675832042573784617573566757785759189469440564302969704600714688529001314319639714203831060497707
331925084147582654795668830722324889872196907646048830287516966743929278224216012101437535614194071767038328775812450182
603372922756813215545197574297372722569507572127317503740596762028911530002988079988031579395988187022990661832762347441
580408419025105706658530724435927871371823096505683698858774944823126385026411714724160655006112217147649611404055245958
690764085259104328061609902308483509922978514818142151500345298205243437991667046660093368330362906675206263668864632265
640653958485082356198403690182526489173388235038492610439236054205289719544492225038750798150789703924713891403334459746
276496677274533919617529868645174650943642818417247874567726411695622994359242574770985939305485049874594674254276115786
758150829260905536846049130647480184754276983586421991852173931007640219020858185528514041840791640314825073828972710666
040094941113757836713961221406183229671740119708514600690087908931385489174661327800940871864590469398829258061311224074
668586758146646201611494329637590497780491980989775272233831932574458834251950812755899639995065855318196625012000233953
473135671609156608405238428828435962052740952420555991736084406081013616877834730690683109988219873306581683341325710997
990046485982413023423601389560276831671819958111081350632401355462557024077080098341890993405235489635218011240608719013
434960539545760780062681402476797371517297807796661705311688634236242725125322883849821606239923380052804989745976591056
917644800766849057639907849889233349680813722933726708266183455048658392078293263604242181643784229660322925434343825995
7789972521411484373616511974660517187313499440725491159012104275467286777060242306091521724720873472000000000000000000
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
```

回の計算が必要。改善後は1000000回。

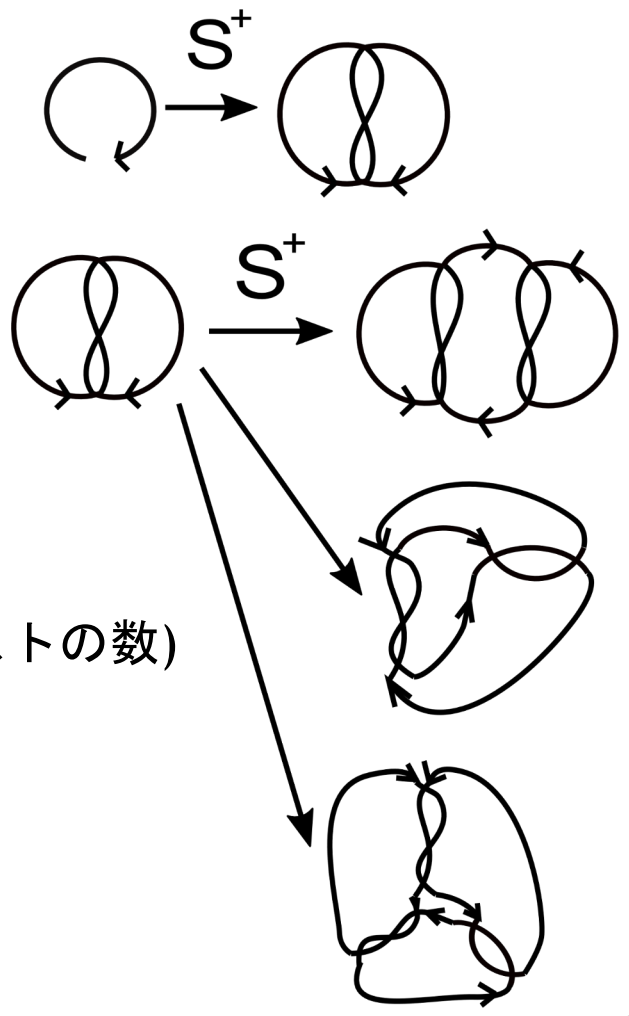
同値判定の計算量改善

計算時間で比較してみると、富嶽(スパコン)で計算してみると

```
136720387048041938995599776782647536574131052414379187753828741830233384770134053195658844268950931639628751561119976847
022642664191572633702966140012630325720109882364842319798358392096906446755607044826182555873731036783838486885393169113
675365200354289699109044597536142244335274289066816132626696432615000951106244037899680414660325675433678456380978467430
166504902454456599382831949041547492892269509722281660618048663942854855442009280791093225403790040278718535061843498000
973448384123905099109044572584684810111086837661709179727123216456012769906091665928972931355029168315117806265611639260
003110000440319713225005848019890440251086830594742799295741404773116216106557737670230084279753326894577317891396557848
80119690661147834998075151232275698989011814795226229758958983116976683172116184890589714521248348633220258539778896686
967277304049734870223896079348060176872341950014826796600453281786074423823473046903440045979615144482405569454293663656
561366401619603835234547447590793026976216675433171242480820955969028817295857436612581664007545050661795512676246971772
768700191132931638617832817826411949064404988624847001439813788060918166540775012680121632228560434748538388455340673338
908044272902430779635505683801346991175742991027931157679723156019509888707005236784678036214520616802273468862270182001
106914030079624660090566305907053370726464521441572219526999396944838736045049164973393381636974539153731057733658242093
366518885871728296612888029611404898900744620445995881037302148086405923244701999314672373842843006064406992454126858113
355053487212878589427172079098545995352499625322567184984692545565583141285908984896938717435782930579209371592553309166
272878877873194297579290059185527709523806755322939495133236279492529242459683595106707902663873554133315916358755933113
280090988430288507329389022515912997739643619897423452780976632715431725385166580352911235370557606988466913388289961971
926873020721285578897607283624299371442317345570070799160905610278557469004296934537005213088237523883243475714104589660
538158191149529619610996457644734894106018820529095634112152589447302643606619333679186678712652166827302664682054068682
772084755829024931324074514700747346420541589964193731174657964060932592617034531437687402779437940650436964497909918510
094799765203501008391261226051749547031106610792954624971996649618291072147806596857503046118697165161341003851463911420
889664130126474206506820094460056237214869901995727647217841024558808470344461334222552695853559179877068406086486499871
8223608739666249484277179088870027012719907230062624035709064014290742889732446190414612419051520000000000000000000000
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
```

年かかる。(当然終わらない)。改善後は0.000001秒

S^+ の要件定義



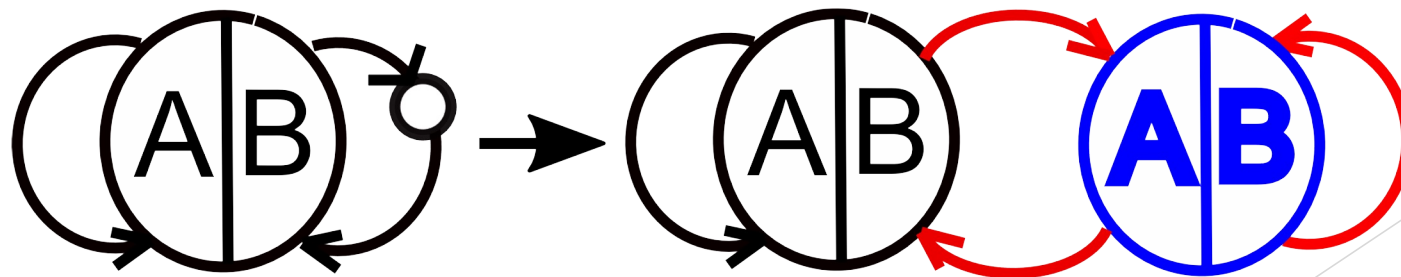
大まかに言うと
「クロスキャップ数(ツイストの数)
を1増やす」操作



S+の実装

大まかな説明

1. 対象となる2辺を選ぶ
2. Odd頂点を追加する
3. Oddに対して辺を繋ぐ
4. 2辺の間の辺を反転させる



S+の実装

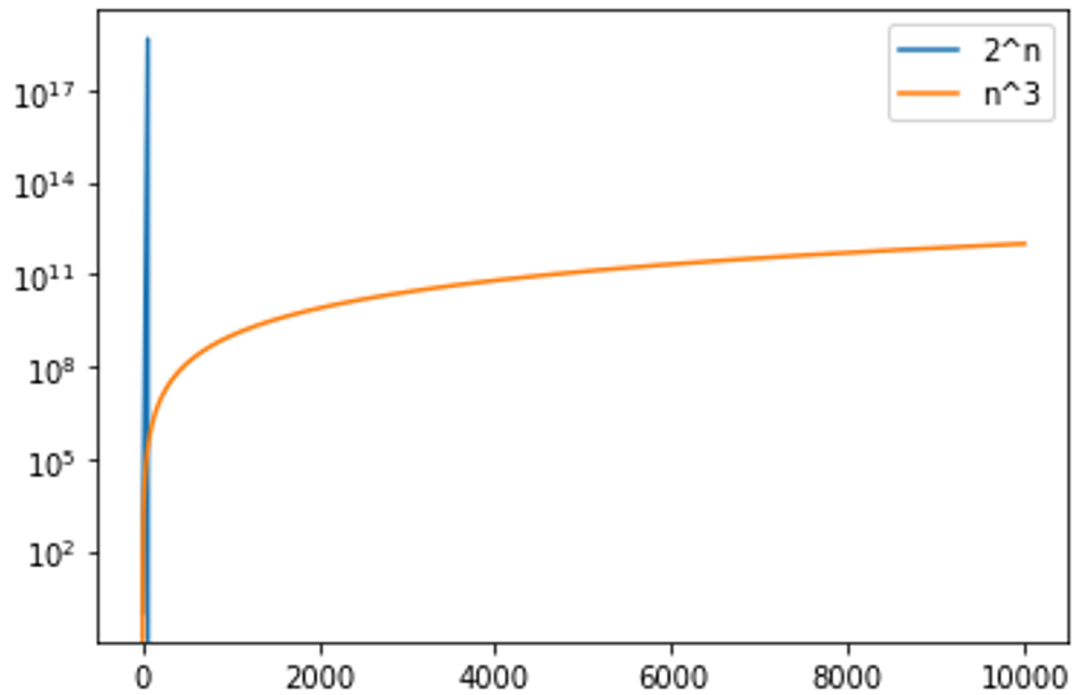
厳密なアルゴリズム

1. オイラー閉路を辺のリストで持つ
2. オイラー閉路から始辺 $e_s(a, b, Ta, Tb)$ と、終辺 $e_g(c, d, Tc, Td)$ を選ぶ(この時 $e_s < e_g$ となるようにする)
3. Odd頂点 O を追加する。
4. a, b から O に、 O から c, d に繋がるように辺を追加する。この時 a と d, b と c がそれぞれ O の同じ側(A/B)に繋がるようにする。即ち、 $(a, O, Ta, A), (b, O, Tb, B), (O, c, B, Tc), (O, d, A, Td)$ の4辺を追加する。
5. オイラー閉路で e_s と e_g の間にある辺全てを逆向きにした辺を追加する。即ち、 (u, v, Tu, Tv) を (v, u, Tv, Tu) にする。
6. e_s から e_g までの辺を削除する

S+の計算量の比較

従来の計算量 : $O(2^N)$

今回の実装の計算量 : $O(N^3)$



S+の計算量の比較

すべての結び目の列挙の現在の世界記録は3頂点(ツイスト)

従来の方式では102頂点の時の富嶽(10^{13} step/s)での実行時間は**200億年**
(宇宙の年齢は137億年)

→今回提案するアルゴリズムでは**0.000001秒**

今回のアルゴリズムならノートパソコンで実行しても1秒で終了
富嶽を使う場合、100000頂点までは数秒で終了

まとめ

- ▶ 結び目という多分野に応用できる数学分野がある
- ▶ 量子計算・医療工学・材料工学などに対する応用が期待されている
- ▶ KEGに対する新たなアルゴリズムを考案している
- ▶ 計算量が大幅に改善している(宇宙の寿命よりも長い実行時間
→1秒未満)

謝辞

本研究は以下の機関・プロジェクトのご協力の下成り立っています

- ・ 豊橋技術科学大学 高専連携教育プロジェクト(1304)
- ・ 茨城工業高等専門学校 同窓会

以上の皆様には多大なご協力を頂きました
この場を借りて深くお礼申し上げます

プロジェクトメンバー

- ・ 豊橋技術科学大学

鈴木幸太郎

- ・ 理化学研究所

吉田純

- ・ 茨城工業高等専門学校

安細勉

伊藤昇

奥出真理子

矢作優樹

山中稜斗

山田海音



補足：S+の要件定義

目的：結び目射影図に対するS+という操作をKEGに対する「厳密なアルゴリズムとして」再定義する。

S+：交点（グラフの言葉では4価頂点）を向きに沿って平滑化する方法をSeifert spliceとし，そうでない平滑化をS-と呼ぶ．S+はS-の反対操作として定義する

RI+は何回やっても良い

