# リーマン多様体上の最適化アルゴリズムの固有値問題への応用

酒井 裕行 [1], 飯塚 秀明 [2]
[1] 明治大学大学院, [2] 明治大学
e-mail : sakai0815@cs.meiji.ac.jp

## 1 概要

対称行列の固有値問題は Rayleigh 商と呼ばれる実数値関数を, 単位球面の制約を課した上で最小にする点を見つける問題として捉えられることが知られている [1, 2]. 単位球面のように Riemann 多様体という幾何学的構造を持つ制約を課した上で実数値関数を最小にする点を見つける問題は Riemann 多様体上の最適化問題と呼ばれる. Riemann 多様体上の最適化問題を解くためのアルゴリズムとして, 最急降下法や共役勾配法や Newton 法と呼ばれる関数の勾配の情報を用いた手法が数多く研究されている [1, 2]. 本発表では, Riemann 多様体上の最適化アルゴリズムとして spectral-scaling Broyden family に基づく memoryless 準 Newton 法 [3] と呼ばれるアルゴリズムを紹介し, その改良版の手法を提案する. また, 提案アルゴリズムの収束解析, および対称行列の固有値問題への応用を通じて提案アルゴリズムの評価を行う.

## 2 Riemann 多様体上の最適化

$(M, g)$ を Riemann 多様体とし, 点 $x \in M$ における $M$ の接空間を $T_xM$ で表し, $M$ の接束を $TM$ で表す. 点 $x \in M$ における接空間 $T_xM$ において Riemann 計量 $g$ から定まる正定値内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle_x := g_x(\cdot, \cdot)$ と表すこととする. Riemann 多様体上の最適化アルゴリズムの多くは Algorithm 1 のような枠組みで表される. ステップ幅 $\alpha_k$ の仮定として Armijo 条件や Wolfe 条件などが知られており, アルゴリズムに応じて適切に選択する必要がある. $R$ はレトラクション [1, Definition 4.1.1] と呼ばれる指数写像を一般化した写像である.

**Algorithm 1** Riemann 多様体上の最適化アルゴリズムの枠組み [2, アルゴリズム 7.1]

**Require:** 初期点 $x_0 \in M$
1: $\eta_0 = -g_0 = -\mathrm{grad} f(x_0)$.
2: **for** $k = 0, 1, \ldots$ **do**
3: ステップ幅 $\alpha_k > 0$ を決定.
4: 探索方向 $\eta_k \in T_{x_k}M$ を決定.
5: $x_{k+1} = R_{x_k}(\alpha_k \eta_k)$
6: **end for**

## 3 提案手法

本研究の提案手法は探索方向は以下の式 (1) で決定される [4, (21)].

$$\begin{aligned}\eta_k =& -\gamma_{k-1} g_k + \gamma_{k-1}\left(\phi_{k-1}\frac{z_{k-1}^\flat g_k}{s_{k-1}^\flat z_{k-1}} - \left(\frac{1}{\gamma_{k-1}\tau_{k-1}} + \phi_{k-1}\frac{z_{k-1}^\flat z_{k-1}}{s_{k-1}^\flat z_{k-1}}\right)\frac{s_{k-1}^\flat g_k}{s_{k-1}^\flat z_{k-1}}\right) s_{k-1} \\ &+ \gamma_{k-1}\xi_{k-1}\left(\phi_{k-1}\frac{s_{k-1}^\flat g_k}{s_{k-1}^\flat z_{k-1}} + (1-\phi_{k-1})\frac{z_{k-1}^\flat g_k}{z_{k-1}^\flat z_{k-1}}\right) z_{k-1}\end{aligned} \tag{1}$$

 

ただし $\gamma_{k-1} > 0$, $\phi_{k-1} \geq 0$, $\xi_{k-1} \in [0,1]$, $z_{k-1} \in T_{x_k}M$, $s_{k-1} \in T_{x_k}M$ である．特に, $z_{k-1}$ と $s_{k-1}$ の計算には [4, Assumption 2.1] の仮定を満たす写像 $\mathscr{T}^{(k-1)} : T_{x_{k-1}}M \to T_{x_k}M$ を使用する．これらのパラメータの詳細な値については [4, Section 3] に記載されている．式 (1) の探索方向は既存手法である Riemann 多様体上の spectral-scaling Broyden family に複数の改良を施している．その中の一つは, Euclid 空間における既存研究 [5] で行われた改良を Riemann 多様体へ拡張したものである．

本発表では提案手法が適切な仮定の下で最適解に収束すること, すなわち

$$\liminf_{k\to\infty} \|g_k\|_{x_k} = 0$$

を満たすことを紹介する．

## 4 固有値問題への応用

Riemann 多様体上の最適化問題の応用として対称行列の固有値問題がある．$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を対称行列とする．このとき以下の制約付き最適化問題を考える．

$$\begin{aligned} &\text{目的関数 } f(x) := \frac{x^\top A x}{x^\top x}, \\ &\text{制約条件 } x \in \mathbb{S}^{n-1} := \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| = 1\} \end{aligned}$$

この最適化問題は単位球面上の Rayleigh 商最小化問題と呼ばれ, 最適解が対称行列 $A$ の最小固有値に対する固有ベクトルになることが知られている．単位球面のレトラクションとしては指数写像を選ぶことも可能だが, $R_x(\xi) := (x+\xi)/\|x+\xi\|$ というレトラクションが数値実験において, より効率的であることが知られている．

本発表では Riemann 多様体上の最適化アルゴリズムの既存手法である共役勾配法や spectral-scaling Broyden family など提案手法を比較し, 提案手法が優れた性能を持つことを数値的に示す．

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 23KJ2003 の助成を受けたものです。

## 参考文献

[1] P.-A. Absil, R. Mahony and R. Sepulchre, Optimization Algorithms on Matrix Manifolds, Princeton University Press, 2008.

[2] 佐藤 寛之, 多様体上の最適化理論, オーム社, 2024.

[3] Y. Narushima, S. Nakayama, M. Takemura and H. Yabe, Memoryless quasi-Newton methods based on the spectral-scaling Broyden family for Riemannian optimization, Journal of Optimization Theory and Applications, 197.2 (2023), 639-664.

[4] H. Sakai and H. Iiduka. Modified memoryless spectral-scaling Broyden family on Riemannian manifolds. Journal of Optimization Theory and Applications, 201.3 (2024). 1-20.

[5] S. Nakayama, A hybrid method of three-term conjugate gradient method and memoryless quasi-Newton method for unconstrained optimization, SUT journal of Mathematics, 54.1 (2018), 79-98.

 

# 量子ウォークにもとづく時系列解析

小山 翔平 [1], 今野 紀雄 [1]
[1] 立命館大学
e-mail : sho-koya@fc.ritsumei.ac.jp n-konno@fc.ritsumei.ac.jp,

## 1 先行研究

今野は 2019 年 [1]，量子ウォーク（QW）にもとづく時系列解析を導入した．すなわち，時刻 1 から時刻 $n$ までの時系列データが与えられたとき，パラメータが含まれる確率測度を用いてある評価関数を定義する．その評価関数を最小にするパラメータを用いて時刻 $n+1$ の予測値を求めるのである．

## 2 モデルの定義

我々は，先行研究のモデルを拡張し，データが連続な場合のモデルを以下のように提案した [2].

まず，$x \in \mathbb{R}_{\geq} = [0, \infty)$ と $p \in [0,1]$ を固定し，それらに対し，$\mathbb{R}$ 上の確率測度 $\{\mu_x(y,p) : y \in \mathbb{R}\}$ を導入する．そして，$x \in \mathbb{R}_{\geq}$, $p \in [0,1]$ に対し，

$$\int_{\mathbb{R}} y\mu_x(y,p)dy = (1-2p)x$$

を仮定する．さらに，この確率測度 $\mu_x(\cdot, p)$ は，$\mathbb{Z}$ 上の連続時間または離散時間 QW の弱収束極限測度から得られるとする。

つぎに，$[0,a]$ 上のグラフ $f(x)$ を固定する．ただし，$a \in \mathbb{R}_{>} = (0,\infty)$ である．このとき，評価関数を

$$V_a^{(n)}(p) = \int_0^a dx \int_{\mathbb{R}} dy (y - f(x))^n \mu_x(y,p)$$

と定義する．そして，$[0,a]$ の範囲で $V_a^{(n)}(p)$ を最小にするパラメータ $p_*$ を探す.

## 3 主結果

簡単のため,

$$\langle x^\alpha f^\beta \rangle = \int_0^a x^\alpha f^\beta(x)dx \qquad (\alpha, \beta \in \mathbb{R}),$$
$$w = 1-2p$$

とおく.

**定理** 1 連続時間 QW（CTQW）の場合，$n = 2, 4$ のときの評価関数は以下のようになる.

$$V_a^{(2)}(w) = \langle f^2 \rangle - 2\langle xf \rangle w + \frac{a^3}{3}\left(\frac{1}{2} + w^2\right),$$
$$V_a^{(4)}(w) = \langle f^4 \rangle - 4\langle xf^3 \rangle w + 6\langle x^2 f^2 \rangle \left(w^2 + \frac{1}{2}\right)$$
$$- 4\langle x^3 f \rangle w \left(w^2 + \frac{3}{2}\right) + \frac{a^5}{5}\left(w^4 + 3w^2 + \frac{3}{8}\right).$$

 

$n=2$ の場合，$\mathbb{R}$ の範囲で評価関数を最小にする $p$ は,

$$p=\frac{1}{2}-\frac{3}{2a^3}\langle xf\rangle.$$

**定理 2** 離散時間 QW（DTQW）の場合，$n=2,4$ のときの評価関数は以下のようになる．

$$\begin{aligned}
V_a^{(2)}(w) &= \langle f^2\rangle - 2\langle xf\rangle w + \frac{a^3}{3}\left(1-\sqrt{1-r^2}+w^2\right),\\
V_a^{(4)}(w) &= \langle f^4\rangle - 4\langle xf^3\rangle w + 6\langle x^2f^2\rangle\left(w^2+1-\sqrt{1-r^2}\right)\\
&\quad - 4\langle x^3f\rangle\left\{w^3+3(1-\sqrt{1-r^2})w\right\}\\
&\quad + \frac{a^5}{5}\left\{w^4+6(1-\sqrt{1-r^2})w^2+1-\sqrt{1-r^2}\left(1+\frac{r^2}{2}\right)\right\}.
\end{aligned}$$

ただし、$r\in(0,1)$．$n=2$ の場合，$\mathbb{R}$ の範囲で評価関数を最小にする $p$ は,

$$p=\frac{1}{2}-\frac{3}{2a^3}\langle xf\rangle.$$

これらの定理をもとに，CTQW と DTQW のそれぞれの場合において，具体的に $f(x)$ を与え，数値計算により $[0,a]$ の範囲で評価関数を最小にするパラメータ $p^*$ を求め，提案したモデルが間違った挙動をしないことを確認した．

予測値として，以下の 2 種類を定義する．

$$\begin{aligned}
m^{(W,n)}(a,b) &= \int_{\mathbb{R}} y\ \mu_b\left(y, p_*^{(W,n)}(a)\right) dy,\\
\widetilde{m}^{(W,n)}(a,b) &= f(a) + \int_{\mathbb{R}} y\ \mu_{b-a}\left(y, p_*^{(W,n)}(a)\right) dy.
\end{aligned}$$

ただし，$W\in\{\mathrm{CTQW},\ \mathrm{DTQW}\}$，$p_*^{(W,n)}$ はウォークが $W$ の場合の評価関数を最小にするパラメータとする．

これを整理をすると,

**定理 3**

$$\begin{aligned}
m^{(W,n)}(a,b) &= \left(1-2p_*^{(W,n)}(a)\right)b,\\
\widetilde{m}^{(W,n)}(a,b) &= f(a) + \left(1-2p_*^{(W,n)}(a)\right)(b-a).
\end{aligned}$$

ただし，$n\in\mathbb{Z}_>$, $b>a>0$.

## 参考文献


[1] N. Konno, A new time-series model based on quantum walk, *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*, **6**, (2019), pp. 61–72.

[2] N. Konno, S. Koyama, Linear extrapolation for the graph of function of single variable based on walks. *Yokohama Mathematical Journal*, **68**, (2022), pp. 127-148.

# グローヴァーの探索アルゴリズムと絶対ゼータ関数

堀田 一希 [1], 赤堀 次郎 [1], 岡本 陸希 [1], 今野 紀雄 [1], 佐藤 巌 [2], 田村 勇真 [1]
[1] 立命館大学, [2] 小山工業高等専門学校
e-mail : ra0105hp@ed.ritsumei.ac.jp

## 1 準備

初めにグローヴァーアルゴリズムの定義を述べる [1]．まず，$I_N$ は $N \times N$ の単位行列, $|j\rangle$ は, $j+1$ 番目の成分だけ 1 で，他の成分は 0 の単位ベクトルとする．さらに, 対角状態 $|D\rangle$ は以下で定義する．

$$|D\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \ {}^{T}[1, 1, \ldots, 1].$$

次に，グローヴァーアルゴリズムに対応する $N \times N$ 行列 $U_N$ は,

$$U_N = \mathcal{R}_D \mathcal{R}_f$$

で定義する．ただし，$\mathcal{R}_D$ と $\mathcal{R}_f$ も $N \times N$ 行列で,

$$\mathcal{R}_D = 2|D\rangle\langle D| - I_N,$$
$$\mathcal{R}_f = I_N - 2|0\rangle\langle 0|$$

で定める．ここで，$\mathcal{R}_D$ が一様に拡散させる作用に対応し，$\mathcal{R}_f$ がマークされたものの振幅の符号を変える作用に対応している．このとき, $U_N$ は $N \times N$ ユニタリ行列である．

**定義 1** $N \times N$ 行列 $A$ の周期 $T(A)$ は,

$$T(A) = \inf \left\{ t \geq 1 \ : \ A^t = I_N \right\}$$

で与えられ，もし $A^t = I_N$ をみたす $t$ が存在しないときは，$T(A) = \infty$ とする．

円分多項式を用いた議論より, グローヴァーアルゴリズムに対応する行列 $U_N$ の周期 $T(U_N)$ が得られている [1].

**命題 2** グローヴァーアルゴリズムに対応する行列 $U_N$ を考える．ただし，$N = 2,\ 3,\ \ldots$ とする．このとき，$U_N$ の周期 $T(U_N)$ は以下である．

$$T(U_N) = \begin{cases} 4 & (N = 2), \\ 6 & (N = 4), \\ \infty & (N \neq 2,\ 4). \end{cases}$$

一方, 絶対ゼータ関数は $\mathbb{F}_1$ 上のゼータ関数とみなすことができる [2].

**定義 3** 多重 Hurwitz ゼータ関数 $\zeta_r$, 多重ガンマ関数 $\Gamma_r$ をそれぞれ

$$\zeta_r(s, x, (\omega_1, \ldots, \omega_r)) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} (n_1\omega_1 + \cdots + n_r\omega_r + x)^{-s},$$
$$\Gamma_r(x, (\omega_1, \ldots, \omega_r)) = \exp\left( \frac{\partial}{\partial s} \zeta_r(s, x, (\omega_1, \ldots, \omega_r)) \Big|_{s=0} \right)$$

で定める.

**定義 4**　$f:\mathbb{R}\to\mathbb{C}\cup\{\infty\}$ に対して,

$$f\left(\frac{1}{x}\right)=Cx^{-D}f(x)$$

を満たすとき, $f$ は重さ $D$ の絶対保型性を持つという. ただし, $C\in\{-1,1\}$, $D\in\mathbb{Z}$.

**定義 5**　$f$ の絶対 Hurwitz ゼータ関数 $Z_f$, $f$ の絶対ゼータ関数 $\zeta_f$ はそれぞれ

$$Z_f(w,s)=\frac{1}{\Gamma(w)}\int_0^{\infty}f(e^t)\ e^{-st}\ t^{w-1}dt,$$
$$\zeta_f(s)=\exp\left(\frac{\partial}{\partial w}Z_f(w,s)\Big|_{w=0}\right)$$

で定める.

さらに, 行列に対するゼータ関数を次のように定義する [3], [4].

**定義 6**　$N\times N$ 行列 $A$ に対して, 行列ゼータ関数 $\zeta_A$ を

$$\zeta_A(u)=\{\det\left(I_N-uA\right)\}^{-1}$$

で定める.

重要なこととして, $A$ が直交行列であるならば, その行列ゼータ関数 $\zeta_A$ は絶対保型性を持つ [3], [4]. そのため, $U_N$ についての絶対ゼータ関数を計算することができる.

## 2　主結果

まず, $\mathbb{Z}_{\geq}=\{0,1,2,\ldots\}$ とし, $\sum_{\{(k,r)\in(\mathbb{Z}_{\geq})^2\ :\ k+r=\ell\}}$ を $\sum_{k,r}$, また $\prod_{m=0}^{\infty}\prod_{r_1=0,\ldots,r_{N-2}=0}^{\infty}\prod_{\ell=0}^{\infty}$ を $\prod$ と略記する. さらに, $P_\ell=\sum_{k,r}\alpha^k\beta^r$ と置く. このとき, 次の定理が成り立つ.

**定理 7**　グローヴァーアルゴリズムに対応する行列 $U_N$ に対して,

$$\zeta_{\zeta_{U_N}}(s)=\prod\left\{2\sum_{q=1}^{N-2}(r_q+1)+(\ell+2)-m+s\right\}^{(-1)^{N+m}P_\ell}.$$

この結果は, 黒川 [2] による絶対ゼータ関数の類似として, グローヴァーアルゴリズムに対する絶対ゼータ関数 $\zeta_{\zeta_{U_N}}(s)$ が与えられたことを示している.

## 参考文献


[1] 今野紀雄, 量子探索 -量子ウォークが拓く最先端アルゴリズム-, 近代科学社, 2021.

[2] 黒川信重, 絶対ゼータ関数論, 岩波書店, 2016.

[3] Konno, N.: On the relation between quantum walks and absolute zeta functions. Quantum Stud.: Math. Found., Vol.11 (2024), pp.147-157.

[4] Akahori, J., Konno, N., Sato, I.: Absolute zeta functions for zeta functions of quantum cellular automata. Quantum Inf. Comput., Vol.23 (2023), pp.1261-1274.

# 量子ウォークのゼータ関数とその応用

赤堀 次郎 [1]
[1] 立命館大理工学部数理科学科
e-mail : akahori@se.ritsumei.ac.jp

## 1 概要

一直線のグラフ上のランダムウォークのゼータ関数とそれに対応する量子ウォークのゼータ関数が, 遷移行列の固有値を具体的に求めること (cf.[1]) で計算できる。その複素関数としての性質を用いてもとのランダムウォークおよび量子ウォークの漸近挙動を知ることができる (cf. [2, 3]). 本講演では, 量子ウォークのゼータ関数 (cf. [4]) に関する概説から初めて、上の結果について報告するほか, 多様な応用の可能性についてコメントする.

## 参考文献

[1] Ide, Y., Konno, N. and Segawa, E. Time averaged distribution of a discrete-time quantum walk on the path. *Quantum Inf Process*, 11(2012), 1207–1218.

[2] Komatsu, T., Konno, N., and Sato, I. Grover/Zeta Correspondence based on the Konno–Sato theorem. *Quantum Inf Process* 20(2021), 268.

[3] Komatsu, T., Konno, N. and Sato, I. Walk/Zeta Correspondence. *J Stat Phys*, 190(2023), 36.

[4] Konno, N. and Sato, I. On the relation between quantum walks and zeta functions. *Quantum Inf. Process*, 11(2012), 341-349.