

量子アニーリングに伴う残留エネルギー

東京大学大学院 新領域創成科学研究科
理化学研究所 脳科学総合研究センター
鈴木 正¹, 岡田 真人

1 研究の背景と目的

関数の最適化問題は科学のいたるところで顔を出す。最も簡単な一変数2次関数の極値は一回微分を計算することで求まる。しかし、多変数高次関数となると問題は難しく、極値やそれを与える変数の値は、手で求めることはおろか計算機を使って数値的に求めることすら困難になる。そのような問題のうち、バイナリ変数を引数とする関数の最小化問題は学問的にも応用的にも重要である。バイナリ変数によって与えられる関数の最適化問題は、物理の言葉でいうとイジングスピンの（一般にランダムに）結合した古典ハミルトニアン基底状態探索問題として定式化される。固体物理のスピングラス磁性体の問題がまさにこれであるし、経済学にも関わりのあるランダム k -SAT (充足) 問題や巡回セールスマン問題、情報科学のエラー修復、電気工学の回路設計など、広い分野にわたる多数の問題がランダム・イジング模型に帰着する。

ランダム・イジング模型のハミルトニアンは一般に多数のエネルギー極小を持つ。そのため単純な降下法では正しい基底状態は得られない。原理的には全てのスピン配置をしらみつぶしに調べてエネルギー最少の状態を見つけることはできるが、状態数はスピンの数とともに指数関数的に増大するので、大きなサイズの問題ではその方法は全く現実的ではない。スピンの数の多項式で表せる程度の操作で解を得るアルゴリズムがこれまでに見つからない組み合わせ最適化問題は NP 困難問題と呼ばれる。そのような困難な問題に対して、物理学に起源を持つ有効な手法がいくつか知られている。代表的なものがシミュレーテッド・(熱的) アニーリング法である。量子アニーリング法は熱的アニーリング法のアナロジーから最適化問題に対して提案された [1, 2]。

量子アニーリング法のアルゴリズムは、いわゆる古典問題に対する量子アルゴリズムであり、NP 困難問題に対して有効な新しい手法として注目されている。古典問題に対する量子アルゴリズムとして因数分解に対する Shor アルゴリズムが知られているが、それと同様に量子アニーリング・アルゴリズムも古典的問題の困難さを和らげる可能性がある [3]。しかしながら、現時点で量子アニーリング・アルゴリズムに関する我々の知見は十分とは言えない。そこで本稿では、問題のサイズを固定したときに、消費時間とともに得られる解の精度がどのように向上するかについて調べることにする。

¹E-mail: sei@mns.k.u-tokyo.ac.jp

2 量子アニーリング法のアルゴリズムとメカニズム

\mathcal{H}_0 がある古典ハミルトニアンを表すとする。古典ハミルトニアンとは、イジング模型のように、ある自明な基底があつてそれに関して対角的なハミルトニアンのことである。問題はこの基底状態を求めることである。 \mathcal{H}_0 と非可換なトンネル・ハミルトニアン \mathcal{H}_T を導入する。 \mathcal{H}_T の具体例は後で示すが、イジング模型に対する横磁場ハミルトニアンがこれに相当する。 \mathcal{H}_0 と \mathcal{H}_T により、次のような時間に依存したハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}_\tau(t) = \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) \mathcal{H}_T + \frac{t}{\tau} \mathcal{H}_0 \quad (1)$$

ここで、 τ はアニーリング時間を定めるパラメータである。 $\mathcal{H}_\tau(t)$ は時間 $0 \leq t \leq \tau$ に対して定義され、 $t=0$ ではトンネル・ハミルトニアンに一致し、 $t=\tau$ では古典ハミルトニアンに一致する。途中の時刻では t に関して線形に変化する。量子力学的状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ は Schrödinger 方程式に従う。

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}_\tau(t) |\Psi(t)\rangle$$

$|\Psi(t)\rangle$ に関する初期条件として、 $t=0$ で $|\Psi(0)\rangle$ は $\mathcal{H}_\tau(0) = \mathcal{H}_T$ の基底固有状態であると仮定する。時間発展後の $t=\tau$ における $|\Psi(\tau)\rangle$ を量子アニーリング法によって得られる解とする。

終状態が古典ハミルトニアンの基底状態になるわけは、量子状態の断熱的発展によって説明される。 $\mathcal{H}_\tau(t)$ の各時刻での基底状態と励起状態の間に有限のエネルギーギャップがあり、 $\mathcal{H}_\tau(t)$ の時間変化が十分緩やかであれば（すなわち $1/\tau$ が十分小さければ）、状態 $|\Psi(t)\rangle$ は断熱的に時間発展し、終時刻において近似的に $\mathcal{H}_\tau(\tau) = \mathcal{H}_0$ の基底状態に到達する。このことは量子力学の断熱定理によって保証される。エネルギーギャップの存在は、基底状態に縮退が無いことと等価であるが、考える古典ハミルトニアンはたいていランダムで複雑なものなので、途中の時刻での偶発的な対称性とそれに伴う基底状態の縮退はないと考えてよい。ハミルトニアンの時間変化を緩やかにすることは τ を大きくすることで達成できる。どの程度大きくするかは、 $\mathcal{H}_\tau(t)$ の各時刻の基底状態と第一励起状態間のエネルギーギャップの最小値 ε_{\min} と、二つの状態に関する $\mathcal{H}_T - \mathcal{H}_0$ の行列要素の最大値 ε' により決まる。すなわち時間スケール $\tau_C = \varepsilon' / \varepsilon_{\min}^2$ が定義され、 $\tau \gg \tau_C$ であれば、励起状態に遷移することはほとんどなく、断熱的に時間発展する。

ハミルトニアンの時間依存性には自由度があり、量子アニーリング法そのものは式 (1) 以外のハミルトニアンに対してでも定式化できる。しかし、量子力学の断熱定理が t/τ に線形に依存したハミルトニアンに対して、 $\tau \rightarrow \infty$ で終状態が終時刻ハミルトニアンの基底固有状態に厳密に一致することを保証する。他の依存性では必ずしも保証されるとは限らず、式 (1) のハミルトニアンが自然な選択であると考えられる。

3 残留エネルギー

量子アニーリング法にせよ、熱的アニーリング法やその他の方法にせよ、無限に時間をかければ真の解が得られるのは当然である。しかし、現実には有限時間で解を求める必要があり、そう

して得られた解は誤差を持つ。異なる手法の効率を比較するとき、誤差が時間とともにより早く減る方が効率が良い。したがって、誤差の消費時間依存性を明らかにすることはその手法の効率を知るうえで重要である。誤差を評価するために残留エネルギーは適切な量である。残留エネルギーは得られた解のエネルギー期待値と真の基底エネルギーの差で定義される。前節の表記法を用いて、 E_0 を真の基底エネルギーとすると、残留エネルギーは

$$E_{\text{res}} = \langle \Psi(\tau) | \mathcal{H}_0 | \Psi(\tau) \rangle - E_0 \quad (2)$$

と書かれる。本来は解のわからない問題を解くのが目的であるが、ここでは手法の効率を調べるのが目的なので、真の解があらかじめわかっている問題に量子アニーリング法を適用して残留エネルギーを求め、そのアニーリング時間 τ 依存性を調べる。

まず、二つの模型に対して量子アニーリングを実際に行い、残留エネルギーを調べる。一つ目は強束縛模型である。 N 個のサイトからなる系にいる一粒子を考える。粒子がサイト j にいる状態を $|j\rangle$ と書くと、古典ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{j=1}^N V_j |j\rangle \langle j| \quad (3)$$

となる。ここで、 V_j はサイト j でのポテンシャル・エネルギーである。各サイト上でのポテンシャル・エネルギーは異なるとする。この模型に対するトンネル・ハミルトニアンはサイト間のホッピングにより与えられる。

$$\mathcal{H}_T = -\alpha \sum_{j=1}^{N-1} (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) \quad (4)$$

α はトンネリングの強さを調節するパラメーターである。二つ目はランダム・イジング模型である。サイト j におけるスピン演算子の z 成分を S_j^z と書くと、古典ハミルトニアンは次のようになる。

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_j S_j^z \quad (5)$$

z 軸方向の縦磁場 h によるゼーマンエネルギーも含めていることに注意する。スピン間の結合定数 J_{ij} はペアごとに異なる値をとるとする。系の幾何学的形状は後で指定する。ランダム・イジング模型に対するトンネル・ハミルトニアンは横磁場によるゼーマンエネルギーによりもたらされる。横磁場の強さを α で表すと、トンネル・ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_T = -\alpha \sum_j S_j^x \quad (6)$$

と与えられる。ここで S_j^x はサイト j におけるスピン演算子の x 成分である。上述の強束縛模型が一体問題であるのに対し、ランダム・イジング模型は多体問題であり、問題の質が全く異なることに注意する。量子アニーリングを数値的に実行するのに必要なメモリ容量は、スピン系の場合、普通は系のサイズとともに指数関数的に増大する。そこで、我々はできる範囲のサイズに対して、Runge-Kutta 法を用いて Schrödinger 方程式を解くことにより残留エネルギーを計算した。

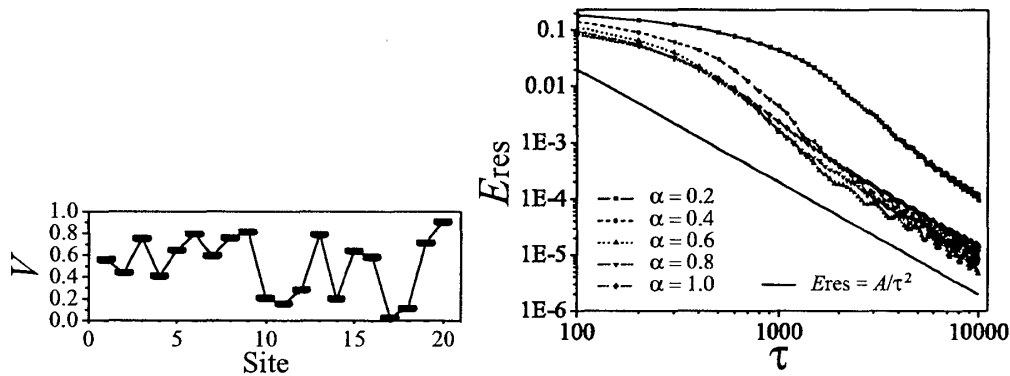


図 1: 強束縛模型の各サイト上のポテンシャル・エネルギー (左図) と量子アニーリング後の残留エネルギーのアニーリング時間依存性 (右図)。20 サイトの系を扱った。右図は両軸とも対数スケールになっている。比較のために描かれた $E_{\text{res}} = A/\tau^2$ (A : 定数) から、 $\tau \rightarrow \infty$ で残留エネルギーは漸的に $1/\tau^2$ の振る舞いを示すことがわかる。

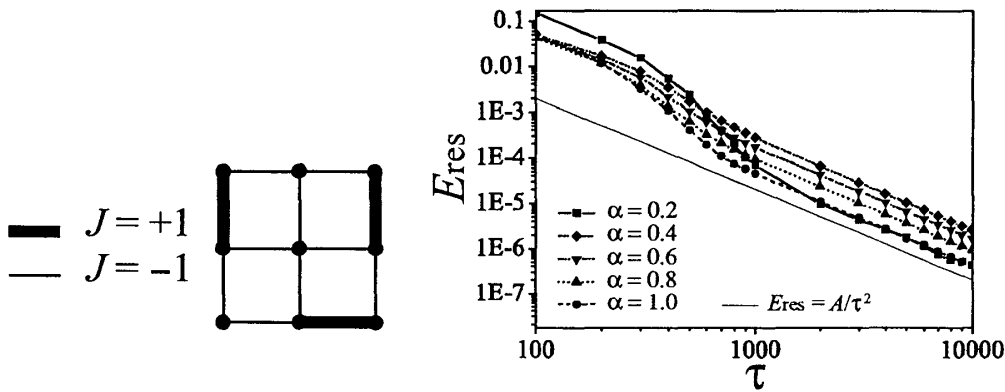


図 2: ランダム・イジング模型の格子形状 (左図) と量子アニーリング後の残留エネルギー (右図)。9 サイトからなる 2 次元正方格子を考え、最近接のスピンの間に相互作用が働くものとした。結合定数は +1 か -1 のどちらかの値をとり、その配置は左図で示される。右図からわかるように、残留エネルギーは $\tau \rightarrow \infty$ で $1/\tau^2$ に比例した関数に漸近する。

まず強束縛模型であるが、1次元、20 サイトからなる系を取り上げた。各サイト上のポテンシャル・エネルギーは $[0, 1]$ からランダムに選んだ。図 1 の左図にその値を示す。古典ハミルトニアン (式 (3)) の基底エネルギーは $E_0 = V_{17}$ である。図 1 の右図は残留エネルギーのアニーリング時間 τ 依存性を表す。いくつかの異なるトンネリング強度 α について計算を行った。図 1 の右図で $\tau \sim 10000$ 付近で残留エネルギーはほぼ直線的に減少することがわかる。この図の両軸は対数スケールなので、直線的な減少は τ の逆べきの依存性を意味する。図に示されている $E_{\text{res}} = A/\tau^2$ (A : 定数) と比較すると、残留エネルギーは $1/\tau^2$ で減少していることがわかる。

次にランダム・イジング模型の結果を図 2 に示す。9 サイトからなる 2 次元正方格子に対して計算を行った。図 2 の左図に結合定数の配置を示す。 \mathcal{H}_0 の基底状態の縮退を取り除くために有限の縦磁場 $h = 0.1$ を入れた。右図は量子アニーリング後の残留エネルギーのアニーリング時間依存性を示している。模型は質的に異なるにも関わらず、強束縛模型の場合と同様に $\tau \geq 1000$ で

残留エネルギーは τ とともに直線的に減少する。図中に示された $E_{\text{res}} \propto 1/\tau^2$ の直線と比較すると、残留エネルギーは τ が大きいところで $1/\tau^2$ で減少することがわかる。

以上の結果より、少なくとも二つの模型に関して、量子アニーリング後の残留エネルギーはアニーリング時間 τ が大きい極限で τ とともに

$$E_{\text{res}} \sim \frac{1}{\tau^2} \quad (7)$$

で減少することが示された。計算を行った二つの模型は質的に異なることから、残留エネルギーのこの性質は普遍的なものであることが推測される。

我々は量子力学の断熱定理に基づいて式 (7) の性質を以下のように導くことができる。終時刻のハミルトニアン、すなわち古典ハミルトニアンの固有状態を $|n\rangle$ と書くことにする。特に $|0\rangle$ は基底状態を表すものとする。断熱定理によると、時間発展後の終状態 $|\Psi(\tau)\rangle$ の基底状態 $|0\rangle$ からのずれは $\tau \gg \tau_C$ のとき $\sum_{n>0} |\langle n|\Psi(\tau)\rangle|^2 \sim O((\tau_C/\tau)^2)$ となる [4]。これより、終状態に古典ハミルトニアンの固有状態が見出される確率は、励起状態 ($n > 0$) に対しては $|\langle n|\Psi(\tau)\rangle|^2 \sim O((\tau_C/\tau)^2)$ 、基底状態に対しては $|\langle 0|\Psi(\tau)\rangle|^2 \sim 1 - O((\tau_C/\tau)^2)$ となる。従って、

$$E_{\text{res}} = \sum_{n>0} E_n |\langle n|\Psi(\tau)\rangle|^2 - E_0 (1 - |\langle 0|\Psi(\tau)\rangle|^2) \sim O\left(\left(\frac{\tau_C}{\tau}\right)^2\right) \quad (8)$$

が得られる。ここで、 E_n は古典ハミルトニアンの固有エネルギーである。 $\tau_C/\tau \ll 1$ なので、式 (8) において最も支配的な項は $(\tau_C/\tau)^2$ である。つまり、 $\tau_C/\tau \ll 1$ では E_{res} は $1/\tau^2$ の性質を持つ。式 (8) の導出は模型に一切よらないので、この性質は普遍的なものである。

4 議論

前節で、量子アニーリング後の残留エネルギーが $\tau \gg \tau_C$ で $E_{\text{res}}^{\text{QA}} \sim 1/\tau^2$ の振る舞いを示すことを述べた。一方で、熱的アニーリング後の残留エネルギーは $E_{\text{res}}^{\text{TA}} \sim 1/(\ln \tau)^\zeta$, $1 < \zeta < 2$ のように減少することが知られている。両者を比較すると、明らかに $E_{\text{res}}^{\text{QA}}$ の方が早く減少する。このことは量子アニーリング法の方が熱的アニーリング法よりも質的に効率が良いことを示している。

量子状態の非断熱的遷移に関する理論として、Landau-Zener (LZ) 理論がある [5, 6]。我々は断熱定理に基づいて $\tau \gg \tau_C$ の場合の残留エネルギーのベキ則を導いたが、 $\tau \sim \tau_C$ の場合には LZ 理論が有効となる。簡単な二準位系の場合、LZ 理論に従うと確率 $p \cong e^{-c\tau/\tau_C}$ (c : 1 程度の定数) で非断熱遷移が起こり、その結果、残留エネルギーも τ に関して $E_{\text{res}} \sim e^{-c\tau/\tau_C}$ の依存性を持つ。そして残留エネルギーの二つの異なる振る舞いが τ_C より大きな τ で入れ替わることが示される。大きなサイズの問題でも、 $\tau \gg \tau_C$ の時には断熱定理が有効で、そこでは残留エネルギーのベキ則がなりたつ。 $\tau \sim \tau_C$ の時には LZ 理論を適用するのが妥当であるが、非断熱遷移が立て続けに起こりえるので二準位系の結果はそのまま当てはめられない。実際に残留エネルギーが $E_{\text{res}} \sim 1/(\ln \tau)^6$ となることが予想されている [7]。しかし、対数的な振る舞いは数値的に確かめられておらず、この予想が正しいかどうかは不明である。残留エネルギーのグローバルな振る舞いを明らかにするためには大規模で精度の高い数値計算法が必要で、それは今後の課題である。

最後に、量子アニーリング法の古典計算機での応用について触れる。量子アニーリング法をイジングスピン模型で表される組み合わせ最適化問題に適用するには、量子スピン系の実時間発展を計算する必要がある。残念ながら、それを可能にする標準的な手法はこれまでのところ知られていない。しかし、いくつかの可能性が検討に値する。一つは量子モンテカルロ法を使うことである [8]。量子モンテカルロ法では大きな系を扱うことが可能である。ただし、実時間発展がマルコフ過程に置き換えられる。また、経路積分量子モンテカルロ法では有限の温度揺らぎが精度を悪くする可能性がある。最近、世界線量子モンテカルロ法で温度揺らぎをなくす方法が開発されているので [9]、その利用が有効かもしれない。別の可能性は、密度行列繰り込み群法 (DMRG) の利用である。近年 DMRG による実時間発展の計算法が開発された [10]。DMRG は扱えるサイズはモンテカルロ法に及ばないまでも、これまで知られているどんな手法よりも大きなサイズに対して高精度の実時間発展の計算が可能である。唯一の問題は、DMRG は長距離相互作用のある模型、または高次元の問題を苦手とすることである。しかし、我々は量子アニーリング法への利用に限り、その困難は克服可能であることを示唆する結果を得ている。これに関しては現在研究を進めているところである。

謝辞

本研究は日本学術振興会科学研究費補助金 (14084212) の援助を受けて行われました。

参考文献

- [1] A. B. Finnila, *et al.*, Chem. Phys. Lett. **219**, (1994) 343.
- [2] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E **58**, (1998) 5355.
- [3] E. Farhi, *et al.*, Science **292**, (2001) 472.
- [4] メシア, 量子力学 3 (東京図書).
- [5] ランダウ、リフシッツ, 量子力学 2 (東京図書).
- [6] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **137**, (1932) 696.
- [7] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car, Science **295**, (2002) 2427.
- [8] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **66**, (2002) 94203.
- [9] T. Nakamura and Y. Ito, J. Phys. Soc. Jpn., **72**, (2003) 2405.
- [10] S. R. White and A. E. Feiguin, Phys. Rev. Lett. **93**, (2004) 076401.
- [11] S. Suzuki and M. Okada, J. Phys. Soc. Jpn. in press.; cond-mat/0502203.